

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE MATEMÁTICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

**Solução em Representação Analítica da  
Equação de Cinética com Modelo de  
Difusão de Nêutrons em Geometria  
Cilíndrica Unidimensional**

por

Guilherme Monteiro

Trabalho submetido como requisito parcial de  
Doutorado em Matemática Aplicada

Prof<sup>a</sup>. Dra. Cynthia Feijó Segatto  
Orientadora

Prof. Dr. Bardo Ernst Josef Bodmann  
Coorientador

Porto Alegre, 21 de Julho de 2017.

## CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Monteiro, Guilherme

Solução em Representação Analítica da Equação de Cinética com Modelo de Difusão de Nêutrons em Geometria Cilíndrica Unidimensional / Guilherme Monteiro.—Porto Alegre: PPGMAP da UFRGS, 2017.

75 p.: il.

Doutorado —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2017.

Orientadora: Feijó Segatto, Cynthia; Coorientador: Ernst Josef Bodmann, Bardo

Doutorado: Matemática Aplicada,  
Equações de Cinética, seção de choque dependente do tempo,  
homogêneo

# Solução em Representação Analítica da Equação de Cinética com Modelo de Difusão de Nêutrons em Geometria Cilíndrica Unidimensional

por

Guilherme Monteiro

Trabalho submetido ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial de

## Doutorado em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Fenômenos de Transporte

Orientadora: Prof<sup>ª</sup>. Dra. Cynthia Feijó Segatto

Coorientador: Prof. Dr. Bardo Ernst Josef Bodmann

Banca examinadora:

Prof. Dr. Ricardo Carvalho de Barros  
UERJ

Prof. Dr. Rubem Vargas  
PUCRS

Prof. Dr. Esequia Sauter  
PPGMAp-UFRGS

Tese apresentada em  
21 de Julho de 2017.

Prof. Dr. Carlos Hoppen  
Coordenador

# Sumário

<b>LISTA DE FIGURAS</b> . . . . .	<b>vi</b>
<b>LISTA DE TABELAS</b> . . . . .	<b>ix</b>
<b>RESUMO</b> . . . . .	<b>x</b>
<b>ABSTRACT</b> . . . . .	<b>xi</b>
<b>1 INTRODUÇÃO</b> . . . . .	<b>1</b>
<b>2 EQUAÇÃO MULTIGRUPO DE CINÉTICA DE DIFUSÃO DE NÊUTRONS</b> . . . . .	<b>7</b>
2.1 A relevância dos nêutrons atrasados . . . . .	9
<b>3 REPRESENTAÇÃO ANALÍTICA DA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE CINÉTICA ESPACIAL PARA GEOMETRIA CILÍNDRICA</b>	<b>13</b>
3.1 Método de Resolução . . . . .	17
3.2 Resultados Numéricos . . . . .	19
3.2.1 Seção de Choque Linear . . . . .	23
3.2.2 Seção de Choque do tipo Senoidal . . . . .	26
3.2.3 Seção de Choque Degrau . . . . .	28
<b>4 REPRESENTAÇÃO ANALÍTICA DA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE CINÉTICA ESPACIAL PARA GEOMETRIA CILÍNDRICA COM DOIS GRUPOS DE ENERGIA E SEIS GRUPOS DE PRECURSORES DE NÊUTRONS ATRASADOS</b> . . . . .	<b>31</b>
4.1 Método de Resolução . . . . .	31
4.2 Resultados Numéricos . . . . .	38
4.2.1 Seção de Choque Linear . . . . .	42
4.2.2 Seção de Choque do tipo Senoidal . . . . .	44
4.2.3 Seção de Choque do tipo Degrau . . . . .	46

<b>5</b>	<b>SEÇÃO DE CHOQUE DE FISSÃO VARIÁVEL</b>	<b>50</b>
<b>5.1</b>	<b>Resultados Numéricos</b>	<b>54</b>
5.1.1	Seção de Choque de fissão linear	55
5.1.2	Seção de Choque de Fissão do tipo senoidal	57
<b>5.2</b>	<b>Seção de Choque de Fissão do tipo Degrau</b>	<b>59</b>
<b>6</b>	<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS E PERSPECTIVAS</b>	<b>62</b>
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b>	<b>64</b>
<b>APÊNDICE A</b>	<b>UMA COMPARAÇÃO COM UM MÉTODO NUMÉRICO DO MATLAB</b>	<b>66</b>
<b>A.1</b>	<b>Fórmulas Implícitas para Sistemas Stiff</b>	<b>68</b>
A.1.1	Fórmulas de Diferenciação Numérica	68
A.1.2	Mudando o Tamanho do Passo	70
<b>A.2</b>	<b>O Programa ODE15s</b>	<b>72</b>
<b>APÊNDICE B</b>	<b>DEMONSTRAÇÃO DO LEMA (3.1)</b>	<b>74</b>

## Lista de Figuras

Figura 2.1	Variação de energia para um grupo $g$ . . . . .	7
Figura 3.1	$\vartheta(t)$ - Solução Proposta (J=3, N=5) e Analítica (N=4) . . . . .	20
Figura 3.2	Razão entre as soluções . . . . .	21
Figura 3.3	$\vartheta(t)$ - Solução Proposta (J=3, N=5) e Analítica (N=4) . . . . .	22
Figura 3.4	$\phi(r, t)$ - Solução proposta na tese . . . . .	22
Figura 3.5	$\vartheta(t)$ - Solução Proposta (J=3, N=4) e do método ODE15S (N=18) para $\Sigma_a(t) = 0.001 \cdot t$ . . . . .	23
Figura 3.6	Razão entre as soluções obtidas para $\Sigma_a(t) = 0.001 \cdot t$ . . . . .	24
Figura 3.7	$R_1(t)$ - Termos residuais das soluções obtidas para $\Sigma_a(t) = 0.001 \cdot t$ - Sistema (3.16) . . . . .	25
Figura 3.8	Fluxo obtido via proposta da tese para $\Sigma_a(t) = 0.001 \cdot t$ . . . . .	25
Figura 3.9	$\vartheta(t)$ - Solução Proposta (J=4, N=5) e do método ODE15S (N=23) para $\Sigma_a(t) = 0.01 \cdot (1 + \text{sen}(t))$ . . . . .	26
Figura 3.10	Razão entre as soluções obtidas para $\Sigma_a(t) = 0.01 \cdot (1 + \text{sen}(t))$ . . . . .	26
Figura 3.11	$R_1(t)$ - Termos residuais das soluções obtidas para o sistema (3.16) . . . . .	27
Figura 3.12	Fluxo obtido pela proposta do trabalho . . . . .	27
Figura 3.13	$\vartheta(t)$ - Solução Proposta (J=2, N=5) e do método ODE15S (N=16) para $\Sigma_a(t) = 1.5843 \cdot 10^{-2} \cdot H(-t + 10)$ . . . . .	28
Figura 3.14	Razão entre as soluções obtidas para $\Sigma_a(t) = 1.5843 \cdot 10^{-2} \cdot H(-t + 10)$ . . . . .	28
Figura 3.15	$R_1(t)$ - Termos residuais das soluções obtidas para o sistema (3.16) . . . . .	29
Figura 3.16	Fluxo - ODE15S com $\Sigma_a(t) = 1.5843 \cdot 10^{-2} \cdot H(-t + 10)$ . . . . .	29
Figura 4.1	$\varsigma_1(t)$ - Solução Proposta (J=4, N=6) e Analítica (N=4) . . . . .	40
Figura 4.2	Razão entre as soluções $\varsigma_1(t)$ . . . . .	40
Figura 4.3	$\varsigma_1(t)$ - Solução Proposta (J=4, N=6) e Analítica (N=4) . . . . .	41
Figura 4.4	$\Phi_1(r, t)$ - Solução proposta na tese . . . . .	41

Figura 4.5	$\Phi_2(r, t)$ - Solução proposta na tese . . . . .	41
Figura 4.6	$\varsigma_1(t)$ - Solução Proposta (J=3,N=5) e via ODE15S (N=14) . . .	42
Figura 4.7	Razão entre as soluções $\varsigma_1(t)$ para $\Sigma_{r_2}(t) = 0,001 \cdot t$ . . . . .	42
Figura 4.8	$R_1(t)$ - Termos residuais das soluções $\varsigma_1(t)$ obtidas para $\Sigma_{r_2}(t) = 0,001 \cdot t$ . . . . .	43
Figura 4.9	$\Phi_1(r, t)$ para $\Sigma_{r_2}(t) = 0,001 \cdot t$ . . . . .	43
Figura 4.10	$\Phi_2(r, t)$ para $\Sigma_{r_2}(t) = 0,001 \cdot t$ . . . . .	44
Figura 4.11	$\varsigma_1(t)$ - Solução Proposta (J=3, N = 5) e via ODE15S (N = 17). . . . .	44
Figura 4.12	Razão entre as soluções obtidas para $\varsigma_1(t)$ no caso $\Sigma_{r_2}(t) = 0.01 \cdot (1 + \text{sen}(t))$ . . . . .	45
Figura 4.13	$R_1(t)$ - Termos residuais das soluções obtidas para o sistema (4.19). . . . .	45
Figura 4.14	$\Phi_1(r, t)$ - Solução proposta na tese. . . . .	46
Figura 4.15	$\Phi_2(r, t)$ - Solução proposta na tese. . . . .	46
Figura 4.16	$\varsigma_1(t)$ - Solução Proposta (J=4, N=5) e ODE15S (N=17) . . . . .	47
Figura 4.17	Razão entre as soluções $\varsigma_1(t)$ para $\Sigma_{r_2}(t) = 0,08 \cdot H(-t + 10)$ . . . . .	47
Figura 4.18	$R_1(t)$ - Termos residuais das soluções $\varsigma_1(t)$ para $\Sigma_{r_2}(t) = 0,08 \cdot H(-t + 10)$ . . . . .	48
Figura 4.19	$\Phi_1(r, t)$ para $\Sigma_{r_2}(t) = 0,08 \cdot H(-t + 10)$ . . . . .	48
Figura 4.20	$\Phi_2(r, t)$ para $\Sigma_{r_2}(t) = 0,08 \cdot H(-t + 10)$ . . . . .	49
Figura 5.1	$\varsigma_1(t)$ - Solução Proposta (J=2, N=4) e via ODE15S (N=13) . . . . .	55
Figura 5.2	Razão entre as soluções $\varsigma_1(t)$ para $\Sigma_{f_2}(t) = 0,001 \cdot t$ . . . . .	55
Figura 5.3	$R_1(t)$ - Termos residuais das soluções obtidas para o sistema (5.7) . . . . .	56
Figura 5.4	$\Phi_1(r, t)$ - Solução Proposta na tese . . . . .	56
Figura 5.5	$\Phi_2(r, t)$ - Solução Proposta na tese . . . . .	57
Figura 5.6	$\varsigma_1(t)$ - Solução Proposta (J=4, N=5) e via ODE15S (N=17) . . . . .	57
Figura 5.7	Razão entre as soluções $\varsigma_1(t)$ para $\Sigma_{f_2}(t) = 0,01 \cdot (1 + \text{sen}(t))$ . . . . .	58
Figura 5.8	$R_1(t)$ - Termos residuais das soluções obtidas para o sistema (5.7) . . . . .	58

Figura 5.9	$\Phi_1(r, t)$ - Solução Proposta na tese . . . . .	59
Figura 5.10	$\Phi_2(r, t)$ - Solução Proposta na tese . . . . .	59
Figura 5.11	$\varsigma_1(t)$ - Solução Proposta (J=4, N=6) . . . . .	60
Figura 5.12	$R_1(t)$ - Termos residuais para o sistema (5.7) . . . . .	60
Figura 5.13	$\Phi_1(r, t)$ - Solução Proposta na tese . . . . .	61
Figura 5.14	$\Phi_2(r, t)$ - Solução Proposta na tese . . . . .	61



## Lista de Tabelas

Tabela 2.1	Frações de nêutrons atrasados ( $\beta_i$ ) e constantes de decaimento ( $\lambda_i$ ) para seis grupos de energia . . . . .	10
Tabela 3.1	Parâmetros Nucleares [Duderstadt e Hamilton, 1976] . . . . .	20
Tabela 4.1	Parâmetros Nucleares – Grupos de Energia[Duderstadt e Hamilton, 1976] . . . . .	39
Tabela 4.2	Nêutrons Atrasados[Duderstadt e Hamilton, 1976] . . . . .	39
Tabela A.1	As NDF's de Klopfenstein-Shampine - Eficiência e A( $\alpha$ )-estabilidade em relação às BDF's . . . . .	70

# RESUMO

Neste trabalho constrói-se uma representação analítica para a solução da equação de cinética espacial de nêutrons em geometria cilíndrica. O domínio estudado é unidimensional e homogêneo. As equações foram resolvidas, primeiramente, para os casos com um grupo de energia e um grupo de precursores de nêutrons atrasados e, posteriormente, com dois grupos de energia e seis de precursores de nêutrons atrasados. A originalidade do trabalho consiste em inserir uma dependência temporal nas seções de choque de absorção e fissão na equação de cinética. A ideia principal para a representação das soluções reside na obtenção da solução das equações com seções de choque e fissão constantes, utilizando resultados conhecidos para a resolução de sistemas de equações diferenciais lineares de primeira ordem. Em seguida, aplicando a ideia de decomposição, é formado um sistema recursivo de maneira que os termos de correções são considerados como termos fontes, os quais são compostos pelas soluções geradas nas etapas anteriores. Para finalizar, apresentam-se simulações numéricas comparando o método do trabalho e a ferramenta numérica ODE15S (MATLAB) nos casos em que as seções de choque variam com o tempo de forma linear, senoidal e degrau.

**Palavras-chave:** Equações de cinética. Seção de choque dependente do tempo. Homogêneo.

# ABSTRACT

In this work, we build an analytical representation for the solution of the neutron space kinetics equations in cylinder coordinates. The domain studied is one-dimensional and homogeneous. The equations were first solved for the cases with one energy group and one group of delayed neutron precursors and further with two energy groups and six groups of delayed neutron precursors. The originality of the work is to insert a time dependence in the absorption and fission cross sections in the space kinetics equations. The main idea for the representation of solutions lies in obtaining the solution of the equations with constant absorption/fission cross sections, using known results for the solution of system of first-order linear differential equations. Then, applying the idea of decomposition, a recursive system is formed so that the terms of corrections are considered as source terms, which are composed of the solutions generated in the previous steps. Finally, numerical simulations are presented comparing the method of the present work and the numerical tool ODE15S (MATLAB) in cases where the cross sections are linear, sine and step functions of time.

**Keywords:** Space kinetics equations. Time dependence. Homogeneous.

# 1 INTRODUÇÃO

As características físicas de um reator nuclear influenciam e, em alguns casos determinam, o funcionamento de todo o seu sistema. Essas características estão associadas às interações dos nêutrons com todos os componentes materiais do reator. O estudo do comportamento da população neutrônica em um reator nuclear é chamado de *cinética de reatores* [1]. Um dos pontos mais importantes no estudo dessas interações é o de analisar a taxa de reação de nêutrons com o  $U^{235}$  ou outro material físsil, uma vez que isso frequentemente resulta em fissão e conseqüentemente na produção de calor. Essa fonte de calor determina a potência do reator e influencia na temperatura dos materiais que, por sua vez, estipulam as condições de segurança do reator. A taxa de reação com o  $U^{238}$  também é importante, já que essa determina a taxa de material físsil que é produzido [2]. As taxas de reações neutrônicas com os componentes estruturais representam perdas de nêutrons e tais interações, quando o nêutron possui altas energias, podem afetar a estrutura e/ou a temperatura do material. A taxa de absorção de nêutrons em barras de controle ou outros absorvedores pode afetar significativamente o custo do sistema do reator. E, por fim, deve-se atentar aos nêutrons que escapam do reator.

Em geral, todas essas interações devem ser consideradas como uma função do tempo durante toda a vida útil do reator. Entretanto, deve-se diferenciar dois diferentes efeitos dependentes do tempo. O primeiro efeito está associado à queima de material físsil, à produção de novos materiais físseis (frequentemente plutônio) e ao planejamento de estratégias que maximizem o uso do combustível. Esses efeitos ocorrem numa escala de tempo medida em dias, meses, ou mesmo anos, e podem ser estudados seguindo a evolução de um reator que funciona a plena potência de uma maneira quase estacionária. Os problemas de controle são os de manter o reator crítico na medida em que os materiais do núcleo lentamente mudam. Em um primeiro momento esses problemas não caracterizam cinética porém, a longo

prazo, a reatividade ou o ciclo do combustível varia com o tempo, evidentemente, não pode ser deixado de lado em um controle de segurança padrão. O segundo efeito dependente do tempo em um reator possui uma escala muito mais curta e está associado com a resposta do sistema às mudanças nas condições de operação. Algumas dessas mudanças podem ser deliberadas e planejadas; por outro lado, também podem surgir consequências inesperadas, decorrentes, por exemplo, da falta de algum elemento do complexo circuito do reator. A consideração e o estudo de possíveis falhas são de vital importância para a construção de um sistema de proteção satisfatório e adequado. O reator geralmente é protegido contra falhas por um sistema de controle e segurança. Tal sistema é capaz de detectar mudanças nos parâmetros físicos, tais como: fluxo de nêutrons, temperatura dos materiais, pressão do refrigerante, etc. Alguma alteração em um ou em mais desses parâmetros normalmente irá iniciar alguma ação de controle, com a finalidade de manter o reator em condições seguras. Esse controle resultará no reator, operando de forma segura e, se possível, a plena potência ou, em última instância, no desligamento do reator.

O estudo detalhado do comportamento de um reator nuclear é uma tarefa árdua, pois, o reator é espacialmente não-uniforme e altamente heterogêneo. As maiores dificuldades desse estudo são aquelas introduzidas pelos efeitos de retroalimentação, ou seja, por efeitos secundários no tempo. Outros fatores complicadores são oriundos de alterações nas temperaturas dos materiais, os quais modificam a densidade de nêutrons e, portanto, a fonte de calor [3]. Tais efeitos podem ser puramente físicos e associados às relativas expansões ou contrações, ou podem ser mais sutis, quando relacionados às alterações nas propriedades de absorção dos nêutrons. Em todos os casos citados, o efeito consequente é o de perturbação do delicado balanço neutrônico que existe no reator. Outro efeito de "feedback" importante, em alguns sistemas que utilizam água, está associado às mudanças de temperaturas dos vapores d'água contidos no refrigerante. Essas modificações na densidade dos nêutrons em reatores BWR (*Boiling Water Reactor*), por exemplo, provocam a variação na taxa de fissão, que, por sua vez, alteram a quantidade de calor que entra

no refrigerante gerando uma espécie de "vazio" ou bolhas provocando novamente perturbações no equilíbrio neutrônico.

A abordagem básica para o estudo da cinética espacial do reator passa por um modelo matemático do sistema. Em muitos casos, as várias características físicas que influenciam o funcionamento do reator são bem ou, pelo menos, adequadamente compreendidas, e o principal problema é decidir quais aspectos devem ser incluídos no modelo e em que grau de detalhe. Na maioria dos estudos, os aspectos neutrônicos e térmicos do núcleo do reator devem ser considerados (embora, nos estudos de remoção de calor, após o desligamento, a descrição do fluxo de nêutrons possa ser omitida). A ação e a resposta dos dispositivos de controle e as características do refrigerante podem ser incluídas.

O ponto de partida em qualquer modelo cinético espacial é a representação do estado estacionário a partir do qual o sistema é perturbado. Esse modelo estacionário fornece a base do projeto do sistema e é usado para avaliar desempenho, economia e condições operacionais. Em seguida, utiliza-se um modelo matemático, no qual todos os processos relevantes de produção/perda de nêutrons são representados e empregam-se os dados nucleares básicos na solução das equações do modelo. Essa abordagem só é possível quando os processos são bem compreendidos, os dados básicos possuem precisão necessária e as equações resultantes podem ser resolvidas. É dessa maneira que grande parte dos reatores térmicos são projetados. Nesse sentido é comum o uso de computadores para encontrar as soluções das equações do modelo matemático que descrevem o estado estacionário. Mesmo com a evolução dos processadores, no entanto, o modelo deve conter simplificações e aproximações para permitir que uma solução seja obtida em um intervalo razoável de tempo.

A incapacidade de se considerarem modelos detalhados mesmo em estado estacionário devido às limitações dos computadores possui implicações imediatas para modelos cinéticos espaciais de reatores. A introdução da variável in-

dependente extra, o tempo, requer aproximações compensatórias em outras partes do modelo para que o uso do computador não se torne excessivo. Em geral, as aproximações feitas são determinadas pelo reator e pelo tipo de perturbação a ser estudada. Assim, a incapacidade de manusear modelos cinéticos espaciais de aplicabilidade universal originou uma ampla gama de modelos aproximados. Uma aproximação que é aceitável em muitas situações é a suposição de que o espectro de energia de nêutrons, em qualquer ponto do reator é independente do tempo ou pode ser representado como uma função simples, de estado estacionário de alguma variável dependente, tal como a temperatura do moderador. A suposição de que o espectro de nêutrons encontra-se em um estado quase estável resulta simplesmente do fato de que os tempos de termalização de nêutrons são muito mais curtos do que a escala de tempo das mudanças físicas, que podem influenciar o processo de termalização de todo o reator. Os resultados dos cálculos do espectro de energia de nêutrons no estado estacionário podem assim ser reduzidos para um grupo. Dessa maneira, a variável energia pode ser removida do modelo cinético.

A abordagem acima referida, por muito tempo, foi bastante satisfatória, de maneira que o modelo cinético espacial de um grupo tem sido aplicado em cinética espacial de reatores térmicos. Os modelos unidimensionais também são regularmente utilizados. Com frequência, a dimensão axial é a escolhida e nas demais dimensões são feitas médias. Normalmente assume-se que a distribuição do fluxo de nêutrons satisfaz a equação de difusão homogênea a qual é uma equação diferencial simples de segunda ordem. Para que o modelo seja mais preciso são necessários que eles sejam bidimensionais ou tridimensionais.

Apesar do fato de que a era pioneira da teoria de reatores nucleares foi há cerca de meio século atrás, a maioria das abordagens existentes na literatura utilizam métodos numéricos para a obtenção de uma solução. Nesse trabalho, será adotado um método que permite derivar uma solução em representação analítica, ou seja, em princípio é uma solução exata quando não é considerado qualquer trun-

camento. Soluções em representação analítica têm a vantagem em comparação às soluções numéricas, pois a influência dos parâmetros nucleares na solução pode ser determinada diretamente pelo fato que a derivada parcial da solução em relação a um ou mais parâmetros nucleares pode ser calculada de forma direta. O modelo abordado nesse trabalho é de caráter determinístico, o qual possui como resultado valores médios nas grandezas relacionadas à população de nêutrons. Cumpre observar que existem também abordagens estocásticas, que permitem simular distribuições como população de nêutrons (Monte Carlo), fluxo escalar, entre outras a partir da soma de histórias de nêutrons individuais ao invés de utilizar um modelo contínuo, como, por exemplo, o da cinética espacial.

Existem trabalhos que analisam o problema de cinética espacial de nêutrons com a finalidade de dar uma representação analítica da solução. Dentre esses trabalhos, temos [4] e [5] os quais estudaram a equação de cinética espacial em geometria cartesiana, enquanto que [6] e [7] analisaram a equação de cinética espacial em geometria cilíndrica. Ainda em coordenadas cilíndricas, recentemente, Oliveira [8] obteve uma solução analítica fechada para o sistema de equações diferenciais parciais que modelam o problema de cinética espacial de nêutrons em geometria cilíndrica tridimensional, considerando um problema monoenergético com um grupo de precursores de nêutrons atrasados. A proposta presente introduz uma variação temporal na seção de choque de remoção nos casos das equações de cinética com um grupo de energia (e um grupo de precursores) e também dois grupos de energia (e seis grupos de precursores). Para resolver essas equações, usou-se a técnica de decomposição. Em seguida, foi construído um sistema recursivo o qual inicia-se com parâmetros nucleares constantes e cuja solução é conhecida. As demais soluções são encontradas considerando as etapas anteriores como termos fontes. Por fim, foram feitos testes para diferentes tipos de transientes.

Dessa forma, no capítulo 2 é feita a derivação das equações estudadas na tese. No capítulo 3, apresenta-se a metodologia proposta no trabalho para o



caso monoenergético e com um grupo de precursores. No quarto capítulo, aplica-se novamente a metodologia proposta no trabalho para o caso com dois grupos de energia e seis grupos de precursores de nêutrons atrasados. No quinto capítulo, ainda no caso multigrupo de energia, são exibidos os resultados obtidos quando introduziu-se uma variação temporal na seção de choque de fissão. No capítulo 6 são feitas as conclusões e perspectivas para trabalhos futuros.

## 2 EQUAÇÃO MULTIGRUPO DE CINÉTICA DE DIFUSÃO DE NÊUTRONS

Fazendo-se uso da concepção de balanço neutrônico para um determinado grupo de energia, de maneira que nêutrons podem se integrar ou sair desse grupo, pode-se estabelecer as equações multigrupo de energia. Utilizando a aproximação de multigrupos de energia, discretiza-se a variável energia em  $G$  grupos. Para um grupo de energia  $g$ , seja a figura (2.1).

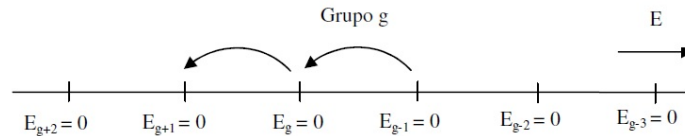


Figura 2.1: Variação de energia para um grupo  $g$

Para calcular tal balanço, efetua-se a diferença entre o número de nêutrons que são produzidos e os que são removidos do grupo.

$$\left[ \begin{array}{c} \text{Taxa de variação temporal} \\ \text{do fluxo de nêutrons} \\ \text{no grupo } g \end{array} \right] = - \left[ \begin{array}{c} \text{Perda devido} \\ \text{à fuga} \end{array} \right] - \left[ \begin{array}{c} \text{Perda devido à} \\ \text{absorção no grupo } g \end{array} \right] \\ - \left[ \begin{array}{c} \text{Espalhamento de} \\ \text{nêutrons para fora} \\ \text{do grupo } g \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{c} \text{Espalhamento de} \\ \text{nêutrons para dentro} \\ \text{do grupo } g \end{array} \right] + \left[ \begin{array}{c} \text{Fonte de} \\ \text{nêutrons} \\ \text{no grupo } g \end{array} \right]$$

A probabilidade de um nêutron se espalhar de um grupo  $g'$  para um grupo  $g$  será representada por uma aproximação da seção de choque diferencial de espalhamento, isto é  $\Sigma_{sg} = \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_s^{gg'}$ . Analogamente uma seção de choque de

absorção no grupo  $g$  será caracterizada por  $\Sigma_{ag}$  e um termo fonte  $S_g$  denotará uma taxa de nêutrons produzidos no grupo  $g$  por uma fonte. Por fim, o coeficiente de difusão do grupo  $g$  será dado por  $D_g$ . Dessa forma, a equação que representa esse balanço é dada por:

$$\frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi_g = \nabla \cdot D_g \nabla \phi_g - \Sigma_{ag} \phi_g - \Sigma_{sg} \phi_g + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{sg'g} \phi_{g'} + S_g \quad (2.1)$$

para  $g = 1, 2, \dots, G$ . Levando em conta o termo fonte devido à fissão, pode-se escrever:

$$S_g = \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'} \phi_{g'} + S_g^{ext} \quad (2.2)$$

Dessa maneira, podemos reescrever a equação (2.1) da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi_g(\mathbf{r}, t) &= \nabla \cdot D_g(\mathbf{r}, t) \nabla \phi_g(\mathbf{r}, t) - \Sigma_{ag}(\mathbf{r}, t) \phi_g(\mathbf{r}, t) - \left( \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_s^{gg'} \right) \phi_g(\mathbf{r}, t) \\ &+ \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{sg'g}(\mathbf{r}, t) \phi_{g'}(\mathbf{r}, t) + \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'}(\mathbf{r}, t) \phi_{g'}(\mathbf{r}, t) + S_g^{ext}(\mathbf{r}, t) \end{aligned} \quad (2.3)$$

para  $g, g' \in \{1, 2, \dots, G\}$ , na qual:

- $\phi_g(\mathbf{r}, t)$  denota o fluxo escalar de nêutrons na posição  $\mathbf{r}$  do grupo  $g$  no tempo  $t$ ;
- $v_g$  denota a velocidade dos nêutrons na posição  $\mathbf{r}$  do grupo  $g$  no tempo  $t$ ;
- $D_g(\mathbf{r}, t)$  denota o coeficiente de difusão na posição  $\mathbf{r}$  do grupo  $g$  no tempo  $t$ ;
- $\Sigma_{ag}(\mathbf{r}, t)$  denota a seção de choque macroscópica de absorção de nêutrons na posição  $\mathbf{r}$  do grupo  $g$  no tempo  $t$ ;

- $\Sigma_{sgg'}(\mathbf{r}, t)$  denota a seção de choque macroscópica de espalhamento de nêutrons na posição  $\mathbf{r}$  do grupo  $g$  para o grupo  $g'$  no tempo  $t$ ;
- $\Sigma_{sg'g}(\mathbf{r}, t)$  denota a seção de choque macroscópica de espalhamento de nêutrons na posição  $\mathbf{r}$  do grupo  $g'$  para o grupo  $g$  no tempo  $t$ ;
- $\chi_g$  denota a fração de nêutrons que aparece no grupo  $g$ ;
- $\nu_{g'}$  denota o número médio de nêutrons emitidos na fissão do grupo  $g'$ ;
- $\Sigma_{fg'}(\mathbf{r}, t)$  denota a seção de choque macroscópica de fissão de nêutrons na posição  $\mathbf{r}$  do grupo  $g'$  no tempo  $t$  e
- $S_g^{ext}$  representa a fonte externa de nêutrons na posição  $\mathbf{r}$  do grupo  $g$  no tempo  $t$ ;

Assume-se que os nêutrons surgem instantaneamente após a fissão. O termo  $\nu_g \Sigma_{fg} \phi_g(\mathbf{r}, t)$  denota a taxa de produção de nêutrons por fissão no grupo  $g$  e tem dimensão dada por quantidade de nêutrons por  $cm^3$  por segundo. Mas, o que de fato acontece é que há uma fração de nêutrons que é produzida no decaimento dos produtos de fissão que ocorre posteriormente aos produtos de fissão. Os nêutrons produzidos na fissão são chamados de nêutrons prontos enquanto que, os nêutrons originários desse decaimento são chamados de atrasados.

## 2.1 A relevância dos nêutrons atrasados

O processo de fissão nuclear faz com que surjam elementos com número de massa menor que o núcleo original, os quais são instáveis e durante os processos de decaimentos emitem nêutrons, denominados de nêutrons atrasados. Os núcleos que os emitem são denominados de precursores de nêutrons atrasados. Tais nêutrons não possuem as mesmas características que os nêutrons prontos produzidos no momento na fissão. Em média, a energia dos nêutrons prontos é bem superior à energia média

dos nêutrons atrasados [9]. Este fato traz dois importantes pontos que influenciam no ciclo de vida do nêutron. O primeiro é que os nêutrons atrasados possuem uma probabilidade menor de causar fissões rápidas do que os nêutrons prontos (devido a sua baixa energia). O segundo ponto é que nêutrons atrasados possuem uma probabilidade menor de fuga do núcleo, pois estes, em média, viajam distâncias menores do que os nêutrons rápidos.

Os produtos de fissão emissores de nêutrons atrasados foram separados em seis grupos de acordo com a sua meia-vida. A tabela (2.1) apresenta a fração de nêutrons atrasados para os grupos de combustíveis mais utilizados em reatores nucleares, a saber, Urânio 233 ( $U_{233}$ ), Urânio 235 ( $U_{235}$ ) e Plutônio 239 ( $Pu_{239}$ ).

Tabela 2.1: Frações de nêutrons atrasados ( $\beta_i$ ) e constantes de decaimento ( $\lambda_i$ ) para seis grupos de energia

Grupo	$\lambda_i [s^{-1}]$	Fração $\beta_i$	Grupo	$\lambda_i [s^{-1}]$	Fração $\beta_i$
1	0,0124	0,00022	1	0,0129	0,000076
2	0,0305	0,00142	2	0,0311	0,000560
3	0,111	0,00127	3	0,134	0,000432
4	0,310	0,00257	4	0,331	0,000656
5	1,14	0,00075	5	1,26	0,000206
6	3,01	0,00027	6	3,21	0,000070

(a)  $U_{235}$  (b)  $Pu_{239}$

Grupo	$\lambda_i [s^{-1}]$	Fração $\beta_i$
1	0,0126	0,00023
2	0,0337	0,00081
3	0,139	0,00068
4	0,0305	0,00075
5	1,13	0,00014

(c)  $U_{233}$

Tem-se, por definição, que  $\beta = \sum_{i=1}^6 \beta_i$ . Pela tabela acima, no caso do Urânio  $U_{92}^{235}$  tem-se que  $\beta = 0,0065$ . Isso quer dizer que os nêutrons atrasados representam 0,65% dos nêutrons produzidos pela fissão do Urânio. Pode parecer que estes nêutrons não possuem grande influência no fluxo, mas para escalas de tempo maiores quando comparadas com a escala de tempo da fissão, esses nêutrons

possuem um efeito significativo. A seguir serão definidas equações que descrevam a dependência temporal da concentração dos precursores de nêutrons atrasados. Para que tais equações possam ser deduzidas, primeiramente serão avaliados os mecanismos de perdas e ganhos dos precursores.

O balanço da variação temporal é dado por meio da produção do precursor através da fissão e pela perda causada pelo posterior decaimento. Os nêutrons gerados no grupo  $i$ , considerando  $G$  grupos de energia, podem ser calculados como segue: multiplica-se a taxa de produção de nêutrons na fissão (soma das taxas de produção em cada grupo de energia) pela fração de nêutrons atrasados, de forma que para  $i \in \{1, 2, \dots, 6\}$  tem-se:

$$\sum_{g'=1}^G \beta_i \nu_{g'} \Sigma_{fg'}(\mathbf{r}) \phi_{g'}(\mathbf{r}, t) \quad (2.4)$$

A perda é expressa pela taxa de decaimento do precursor dada pelo produto da concentração do precursor  $C_i(\mathbf{r}, t)$  e da sua respectiva constante de decaimento  $\lambda_i$  para  $i = 1, 2, \dots, 6$ .

Dessa forma, a equação de balanço representando a variação temporal da concentração de precursores é:

$$\frac{\partial}{\partial t} C_i(\mathbf{r}, t) = -\lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) + \sum_{g'=1}^G \beta_i \nu_{g'} \Sigma_{fg'}(\mathbf{r}) \phi_{g'}(\mathbf{r}, t) \quad (2.5)$$

Incluindo os nêutrons atrasados por meio da fração de nêutrons atrasados  $\beta_i$  e da taxa de decaimento  $\lambda_i$  para cada precursor, na equação de balanço para a concentração de precursores e tomando a seção de choque macroscópica de remoção no grupo  $g$  como  $\Sigma_{rg}(\mathbf{r}, t) = \Sigma_{ag}(\mathbf{r}, t) + \Sigma_{sg}(\mathbf{r}, t)$ , tem-se, considerando o modelo multigrupo de energia sem fonte externa, as equações multigrupo da cinética espacial expressas por:

$$\begin{aligned}
\frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi_g(\mathbf{r}, t) &= \nabla \cdot D_g(\mathbf{r}, t) \nabla \phi_g(\mathbf{r}, t) - \Sigma_{r_g}(\mathbf{r}, t) \phi_g(\mathbf{r}, t) + \sum_{g'=1}^G \Sigma_{sg'g}(\mathbf{r}, t) \phi_{g'}(\mathbf{r}, t) \\
&+ \sum_{g'=1}^G (1 - \beta) \chi_g^p \nu_{g'} \Sigma_{fg'}(\mathbf{r}, t) \phi_{g'}(\mathbf{r}, t) + \sum_{i=1}^P \chi_g^d \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) \\
\frac{\partial}{\partial t} C_i(\mathbf{r}, t) &= \sum_{g'=1}^G \beta_i \nu_{g'} \Sigma_{fg'}(\mathbf{r}, t) \phi_{g'}(\mathbf{r}, t) - \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t)
\end{aligned} \tag{2.6}$$

sendo  $\chi_g^p$  e  $\chi_g^d$  os espectros de fissão do grupo  $g$  para os nêutrons prontos e atrasados, respectivamente.

Esse sistema de equações é complexo e de difícil resolução numérica devido à grande diferença nas escalas dos parâmetros nucleares. Tais sistemas são denominados rígidos ("stiff") e requerem abordagens sofisticadas. Na continuação do trabalho serão mostradas representações analíticas das soluções dessas equações nos casos monoenergéticos com um grupo de precursores de nêutrons atrasados e no caso com dois grupos de energia e seis grupos de precursores de nêutrons atrasados.

### 3 REPRESENTAÇÃO ANALÍTICA DA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE CINÉTICA ESPACIAL PARA GEOMETRIA CILÍNDRICA

Nesse capítulo será considerado o problema unidimensional em geometria cilíndrica num domínio homogêneo. O modelo estudado é monoenergético com um grupo de precursor de nêutrons atrasados. Salienta-se que será deixada de forma explícita a dependência do tempo na seção de choque de remoção. Aplicando essas suposições em (2.6) e fazendo as devidas simplificações tem-se que:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \phi(r, t) = D \nabla^2 \phi(r, t) - \Sigma_a(t) \phi(r, t) + (1 - \beta) \nu \Sigma_f \phi(r, t) + \lambda C(r, t) \quad (3.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} C(r, t) = -\lambda C(r, t) + \beta \nu \Sigma_f \phi(r, t) \quad (3.2)$$

sendo  $r$  a variável espacial dada em coordenadas cilíndricas e  $\nabla^2$  é o operador laplaciano dado por:

$$\nabla^2 \phi(r, t) = \frac{\partial^2}{\partial r^2} \phi(r, t) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \phi(r, t). \quad (3.3)$$

Dada essa identidade, o sistema será reescrito como

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \phi(r, t) &= D \left[ \frac{\partial^2}{\partial r^2} \phi(r, t) + \frac{1}{r} \frac{\partial}{\partial r} \phi(r, t) \right] - \Sigma_a(t) \phi(r, t) + (1 - \beta) \nu \Sigma_f \phi(r, t) \\ &+ \lambda C(r, t) \\ \frac{\partial}{\partial t} C(r, t) &= -\lambda C(r, t) + \beta \nu \Sigma_f \phi(r, t), \end{aligned} \quad (3.4)$$

com o domínio dado por  $t > 0$  e  $0 < r < R$ , e as s condições de contorno  $\phi(R, t) = 0$  e  $\lim_{r \rightarrow 0} \phi(r, t) < \infty$ . As condições iniciais do problema são:



$$\begin{aligned}
\phi(r, 0) &= \phi_0(r) \\
C(r, 0) &= \frac{\beta\nu\Sigma_f}{\lambda}\phi_0(r)
\end{aligned}
\tag{3.5}$$

com  $\phi_0(r)$  denotando o fluxo de nêutrons no tempo inicial e  $\lambda^{-1} = \beta^{-1} \sum_{i=1}^6 \beta_i \lambda_i^{-1}$ .

A seguir, serão apresentadas algumas definições que serão de grande importância para o entendimento do trabalho. Antes, considere a equação

$$\frac{d^2}{dr^2}\phi(r) + \frac{1}{r} \frac{d}{dr}\phi(r) + \gamma_n^2\phi(r) = 0$$

com condições de contorno

$$\begin{aligned}
\lim_{r \rightarrow 0} \phi(r) &< \infty, \\
\phi(R) &= 0
\end{aligned}
\tag{3.6}$$

tem soluções dadas por  $\phi_n(r) = J_0(\gamma_n r)$ , com  $J_0$  sendo a *função de Bessel de primeira espécie de ordem 0*. Nesse momento, serão estudadas algumas propriedades dessa função. Considere a seguinte definição:

**Definição 3.1.** *Um conjunto de funções  $f_n(x)$ ,  $n = 1, 2, \dots$  é ortogonal em relação a uma função peso  $z(x)$  num intervalo  $[a, b]$  se*

$$\int_a^b z(x) f_m(x) f_n(x) dx = 0, \quad m \neq n.
\tag{3.7}$$

Com isso, enunciamos o seguinte lema:

**Lema 3.1.** *O conjunto  $\{J_0(\gamma_0 r), J_0(\gamma_1 r), \dots, J_0(\gamma_n r), \dots\}$  é um conjunto ortogonal com respeito à função  $z(r) = r$  em  $[0, R]$ , e*

$$\|J_0(\gamma_n r)\| := \sqrt{\int_0^R r J_0^2(\gamma_n r) dr} = \frac{R}{\sqrt{2}} J_1(\alpha_n),
\tag{3.8}$$

com  $\gamma_n = \frac{\alpha_n}{R}$  e  $\alpha_n > 0$  satisfazendo  $J_0(\alpha_n) = 0$ .

Como em [10], vamos assumir que uma possível solução para as equações (3.4) é dada por uma série que contém o produto de autofunções ortonormais no espaço por funções no tempo, ou seja

$$\phi(r, t) = \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)} \quad (3.9)$$

$$C(r, t) = \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \xi_n(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)}. \quad (3.10)$$

Ao substituir as equações (3.9) e (3.10) no sistema de equações (3.4), e lembrando que  $\frac{d^2}{dr^2} \phi_n(r) + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} \phi_n(r) = -\gamma_n^2 \phi_n(r)$ , obtemos as seguintes expressões

$$\begin{aligned} \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{dt} \varphi_n(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)} &= -vD \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} (\gamma_n^2) \varphi_n(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)} \\ &+ v[(1-\beta)\nu\Sigma_f - \Sigma_a(t)] \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)} \\ &+ v\lambda \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \xi_n(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)}, \end{aligned} \quad (3.11)$$

$$\begin{aligned} \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{dt} \xi_n(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)} &= -\lambda \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \xi_n(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)} \\ &+ \beta\nu\Sigma_f \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)}. \end{aligned} \quad (3.12)$$

A seguir, multiplicamos as equações acima, (3.11) e (3.12), por  $\frac{\sqrt{2}}{R} r \frac{J_0(\gamma_m r)}{J_1(\alpha_m)}$ ,  $m \in \mathbb{N}$ , e em seguida integramos na variável  $r$  de 0 a  $R$ . Matematicamente falando, aplicamos o operador integral

$$\frac{\sqrt{2}}{R} \int_0^R (\cdot) r \frac{J_0(\gamma_m r)}{J_1(\alpha_m)} dr. \quad (3.13)$$

Reorganizando as equações, temos que

$$\begin{aligned}
& \frac{2}{R^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{dt} \varphi_n(t) \frac{1}{J_1(\alpha_m) J_1(\alpha_n)} \int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) dr \\
& + \frac{2}{R^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{v[D(\gamma_n^2) + \Sigma_a - (1 - \beta)\nu\Sigma_f]}{J_1(\alpha_m) J_1(\alpha_n)} \varphi_n(t) \int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) dr \\
& + \frac{2}{R^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[-v\lambda]}{J_1(\alpha_m) J_1(\alpha_n)} \xi_n(t) \int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) dr = 0, \quad (3.14)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
& \frac{2}{R^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{dt} \xi_n(t) \frac{1}{J_1(\alpha_m) J_1(\alpha_n)} \int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) dr \\
& + \frac{2}{R^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{[-\beta\nu\Sigma_f]}{J_1(\alpha_m) J_1(\alpha_n)} \varphi_n(t) \int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) dr \\
& + \frac{2}{R^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\lambda}{J_1(\alpha_m) J_1(\alpha_n)} \xi_n(t) \int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) dr = 0. \quad (3.15)
\end{aligned}$$

Como as funções  $J_0(\gamma_n r)$  são ortogonais com relação à função  $z(r) = r$  no intervalo  $[0, R]$ , a integral  $\int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) dr = 0$  para  $m \neq n$ . Para  $m = n$  obtemos um sistema de equações diferenciais ordinárias dado por

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \varphi_n(t) &= [-vD(\gamma_n^2) + v(1 - \beta)\nu\Sigma_f - v\Sigma_a(t)] \varphi_n(t) + v\lambda\xi_n(t) \\
\frac{d}{dt} \xi_n(t) &= \beta\nu\Sigma_f \varphi_n(t) - \lambda\xi_n(t) \quad (3.16)
\end{aligned}$$

Representamos o sistema de forma matricial como abaixo:

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \varphi_n(t) \\ \xi_n(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -vD(\gamma_n^2) + v(1 - \beta)\nu\Sigma_f - v\Sigma_a(t) & v\lambda \\ \beta\nu\Sigma_f & -\lambda \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_n(t) \\ \xi_n(t) \end{bmatrix} \quad (3.17)$$

com  $n = 0, 1, \dots, N$ , sendo  $N$  o truncamento da série.

### 3.1 Método de Resolução

A fim de resolver o sistema dado por (3.17) procederemos da seguinte maneira: Seguindo a ideia de decomposição, separaremos a matriz do problema numa parte constante e outra dependente do tempo. O sistema recursivo será estruturado da maneira que segue. A inicialização da recursão é dada pelo problema com parâmetros nucleares constantes cuja solução é conhecida. Essa solução é sujeita às condições de contorno do problema original. As demais recursões são sujeitas às condições de contorno homogêneas. O sistema recursivo é construído de forma que os termos de correções são considerados como termos fontes compostos das soluções determinadas nas etapas de recursão anteriores. Com intuito de melhorar a notação, assumimos que

$$MC_n = \begin{bmatrix} -vD(\gamma_n)^2 + v(1 - \beta)\nu\Sigma_f & v\lambda \\ \beta\nu\Sigma_f & -\lambda \end{bmatrix} \quad n = 0, 1, \dots, N, \quad (3.18)$$

$$F(t) = \begin{bmatrix} -v\Sigma_a(t) & 0 \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \quad (3.19)$$

e

$$\psi_n = \begin{bmatrix} \varphi_n(t) \\ \xi_n(t) \end{bmatrix}. \quad (3.20)$$

Notemos que os autovalores das matrizes  $MC_n$ , com  $n = 1, 2, \dots$ , são todos distintos. Devido a isso, podemos escrever a exponencial de matriz como

$$e^{MC_n t} = V_n e^{D_n t} V_n^{-1}$$

onde  $V_n$  é a matriz dos autovetores de  $MC_n$ ,  $D_n$  é a matriz diagonal, contendo os autovalores de  $MC_n$ , e  $V_n^{-1}$  é a inversa de  $V_n$ .

Aplicando o operador (3.13) com  $m = n$  para a condição inicial, obtemos as seguintes expressões:

$$\begin{aligned}\phi_0(r) = \phi(r, 0) &= \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_n(0) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)} \\ \frac{\sqrt{2}}{R} \int_0^R \phi_0(r) r \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)} dr &= \frac{2}{R^2} \frac{\varphi_n(0)}{J_1(\alpha_n) J_1(\alpha_n)} \int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_n r) dr \\ \varphi_n(0) &= \frac{\sqrt{2}}{R J_1(\alpha_n)} \int_0^R \phi_0(r) r J_0(\gamma_n r) dr.\end{aligned}\quad (3.21)$$

Utilizando a mesma ideia e usando a equação (3.4), temos para  $\xi_0(0)$ :

$$\begin{aligned}0 &= -\lambda \frac{2}{R^2} \frac{\xi_n(0)}{J_1(\alpha_n) J_1(\alpha_n)} \int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_n r) dr \\ &+ \beta \nu \Sigma_f \frac{2}{R^2} \frac{\varphi_n(0)}{J_1(\alpha_n) J_1(\alpha_n)} \int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_n r) dr.\end{aligned}$$

Simplificando a equação acima, temos que:

$$\xi_n(0) = \frac{\beta \nu \Sigma_f}{\lambda} \varphi_n(0) \quad (3.22)$$

Assim, deve-se resolver o problema

$$\frac{d}{dt} \psi_n(t) - MC_n \psi_n(t) = F(t) \quad (3.23)$$

com condições iniciais dadas por (3.21) e (3.22).

Para cada  $n$  da sequência  $\psi_n(t)$ , serão calculados  $\psi_{nj}(t)$ , tais que  $\psi_{nj}(t) \rightarrow \psi_n(t)$ , da seguinte maneira:

Inicia-se resolvendo o problema

$$\begin{cases} \frac{d}{dt} \psi_{n0}(t) - MC_n \psi_{n0}(t) = 0, \\ \psi_{n0}(0) = \begin{bmatrix} \varphi_n(0) \\ \xi_n(0) \end{bmatrix}, \end{cases} \quad (3.24)$$

cuja solução é

$$\psi_{n0}(t) = e^{MC_n t} \psi_{n0}(0). \quad (3.25)$$

As demais soluções surgem ao resolver o problema

$$\begin{cases} \frac{d}{dt}\psi_{nj}(t) - MC_n\psi_{nj}(t) = F(t)\psi_{n(j-1)}(t), \\ \psi_{nj}(0) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad j \geq 1, \end{cases} \quad (3.26)$$

cuja solução é

$$\psi_{nj}(t) = \int_0^t e^{MC_n(t-s)} F(s)\psi_{n(j-1)}(s)ds. \quad (3.27)$$

A seguir, serão apresentados os resultados numéricos do que fora descrito acima, os quais visam ratificar a proposta do trabalho.

## 3.2 Resultados Numéricos

Nesta seção, analisaremos numericamente a proposta descrita neste capítulo. Cabe salientar que a menos de aproximação nas soluções propostas (truncamento nos somatórios) dado por (3.9) e (3.10) o cálculo das recursões (3.25) e (3.27) foram feitos analiticamente, pois utilizou-se o programa MATLAB, o qual possui a capacidade de operar com variáveis simbólicas. Assim, não foi necessário utilizar técnicas polinomiais de aproximação (Splines, por exemplo) e nem métodos numéricos para o cálculo das integrais. Para que possam ser feitas as simulações numéricas, foi utilizada a seguinte condição inicial:

$$\phi_0(r) = 1 - \frac{r^2}{R^2}, \quad (3.28)$$

sendo que esta condição satisfaz a equação (3.6).

Neste momento, apresentamos o conjunto de constantes nucleares utilizadas nas simulações. Considerando um cilindro de dimensão  $0 < r \leq 10cm = R$ , os parâmetros cinéticos bem como os parâmetros das concentrações de nêutrons atrasados estão apresentados na tabela 3.1:

$D_{dif} [cm]$	0.96343
$v [cm/s]$	$1.1035 \cdot 10^7$
$\Sigma_a [cm^{-1}]$	$1.5843 \cdot 10^{-2}$
$\nu\Sigma_f [cm^{-1}]$	$3.3303 \cdot 10^{-2}$
$\lambda [s^{-1}]$	0.08
$\beta$	0.0065

Tabela 3.1: Parâmetros Nucleares [Duderstadt e Hamilton, 1976]

Primeiramente, a fim de validar a proposta da tese, será comparada a solução obtida por meio do método proposto no trabalho com a solução analítica dada em [8] para os sistemas (3.16). Enfatiza-se o fato de que  $\Sigma_a$  é constante somente neste primeiro caso, nas demais análises, esta dependerá do tempo. Abaixo, segue o gráfico de  $\vartheta(t) = \sum_{n=0}^{n=N} \varphi_n(t)$  com  $0 < t < 30$ . Foi utilizado o seguinte critério de parada nesse, e nos demais casos:

$$\begin{aligned}
\left| \sum_{j=0}^{J+1} \varphi_{nj}(t) - \sum_{j=0}^J \varphi_{nj}(t) \right| &< 10^{-8}, \\
\left| \sum_{n=0}^{N+1} \varphi_n(t) - \sum_{n=0}^N \varphi_n(t) \right| &< 10^{-8},
\end{aligned} \tag{3.29}$$

com  $t = 15$  (metade do intervalo de tempo).

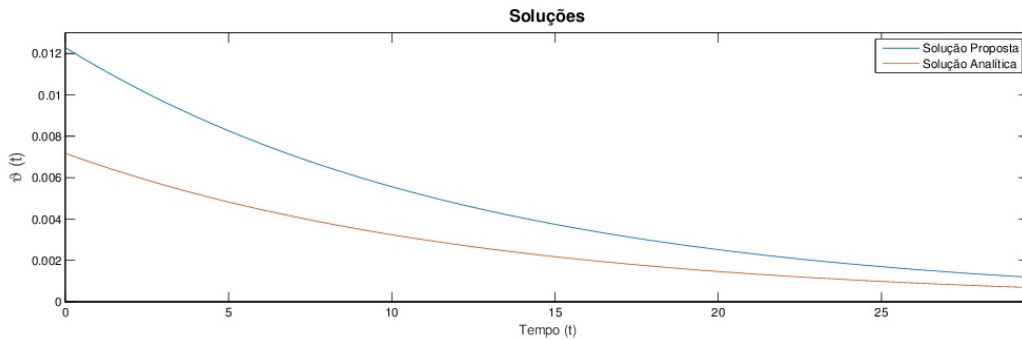


Figura 3.1:  $\vartheta(t)$  - Solução Proposta ( $J=3$ ,  $N=5$ ) e Analítica ( $N=4$ )

Como nosso problema, juntamente com as condições de contorno, são invariantes sob transformação de escala, iremos efetuar a razão entre essas soluções obtidas, a fim de analisarmos se a proposta do trabalho recria, de fato, a solução analítica. Esse fato também será utilizado nos demais casos ao longo do trabalho.

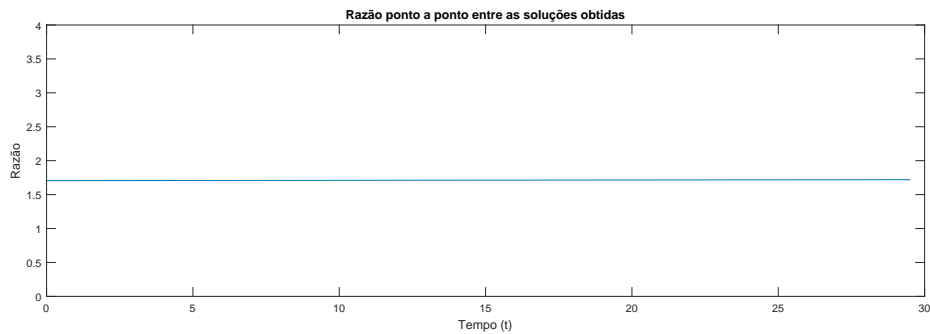


Figura 3.2: Razão entre as soluções

Uma vez que a razão ponto a ponto foi uma reta, podemos assim verificar que nossa proposta, de fato, reproduz a solução analítica, já que esta possui um grau de liberdade que o problema não restringe, independentemente se as condições iniciais são distintas. Conseqüentemente, cada solução multiplicada por um fator é também solução do problema. Nesse caso, temos que o fator possui o valor de 1.7055. Será plotado o gráfico da solução proposta dividida por esse valor\* encontrado e a solução analítica.



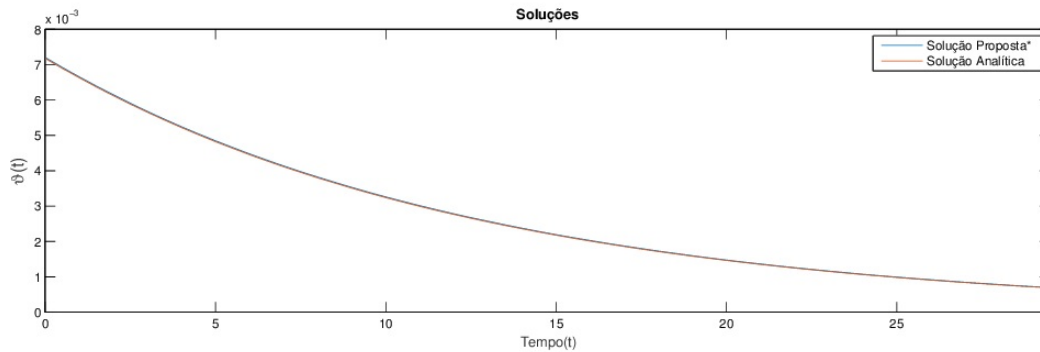


Figura 3.3:  $\vartheta(t)$  - Solução Proposta ( $J=3$ ,  $N=5$ ) e Analítica ( $N=4$ )

Como era de se esperar na figura (3.3) as soluções estão sobrepostas, provando, assim, o que fora dito acima. Agora, segue o gráfico da solução proposta na tese com a variável radial inserida ( $0 < R < 10$ ).

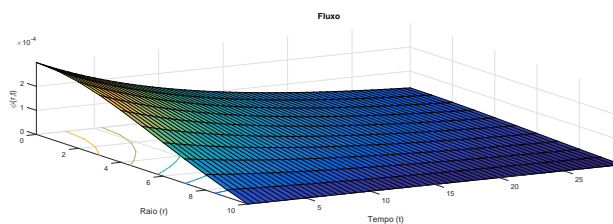


Figura 3.4:  $\phi(r, t)$  - Solução proposta na tese

De acordo com o gráfico, podemos notar que o fluxo é máximo no centro do cilindro, sendo que esse vai tendendo a zero à medida que nos aproximamos do contorno do cilindro. Isso era de se esperar já que em nosso problema temos condições de contorno homogêneas. Também podemos reparar que, fixado um valor de  $R$ , temos um comportamento análogo ao do gráfico (3.1).

Neste momento, passaremos a analisar diferentes seções de choque de absorção com dependência temporal ( $\Sigma_a(t)$ ). Vale ressaltar que é exatamente nesse ponto que apresentamos a originalidade da proposta do trabalho, uma vez que estende-se o trabalho [8], já que nessa produção todos os coeficientes das equações

são constantes. Nas simulações a seguir, os parâmetros nucleares serão os mesmos da tabela (3.1), e o critério de parada é o mesmo da equação (3.29).

### 3.2.1 Seção de Choque Linear

Será considerada uma seção de choque linear da forma  $\Sigma_a(t) = a \cdot t$  com  $a \in \mathbb{R}$ . Para que se possa comparar os resultados obtidos por meio de nossa proposta, foi utilizado um método numérico denominado ODE15S, o qual é um algoritmo de ordem variável, baseado em fórmulas de diferenciação numérica indicado para problemas Stiff ou algébricos-diferenciais. Mais detalhes sobre o método numérico ODE15S encontram-se no apêndice A. Como exemplo, será tomado  $a = 0.001$  para a construção dos gráficos. Os resultados obtidos para  $\vartheta(t)$  são mostrados na figuras (3.5).

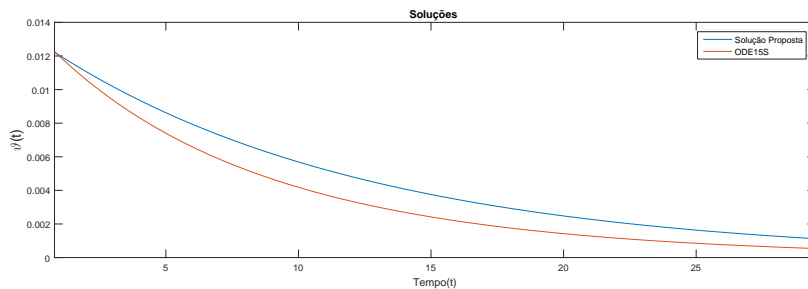


Figura 3.5:  $\vartheta(t)$  - Solução Proposta ( $J=3$ ,  $N=4$ ) e do método ODE15S ( $N=18$ ) para  $\Sigma_a(t) = 0.001 \cdot t$

Na figura (3.5), aparentemente, a solução em vermelho, obtida pelo método numérico ODE15S, também reproduz a solução do exemplo. Para melhor verificar esse fato, foi efetuada a razão ponto a ponto dessas soluções, obtendo, assim, o seguinte resultado:

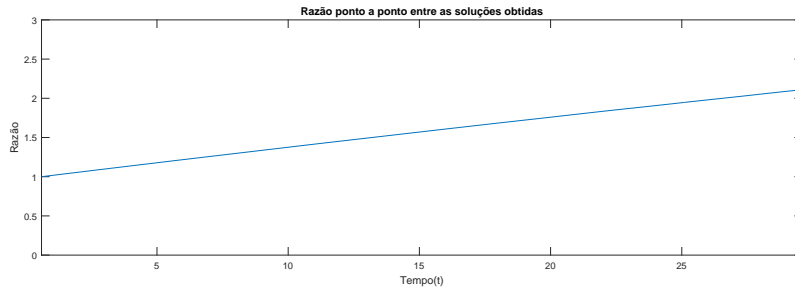


Figura 3.6: Razão entre as soluções obtidas para  $\Sigma_a(t) = 0.001 \cdot t$

Diferentemente de quando se comparou a solução proposta na tese com a solução analítica, dessa vez não obteve-se uma razão constante. Dessa forma, tem-se que uma das soluções não reproduz a real solução do problema em questão. Para sanar essa dúvida e determinar qual das duas respostas melhor aproxima a solução, serão usados os dados numéricos obtidos nas implementações numéricas e o sistema (3.16) a fim de efetuar o cálculo do termo residual. Vale frisar que na proposta do trabalho há o chamado resíduo devido ao truncamento, e, no caso do ODE15S, há o resíduo por aproximação numérica. Quando o resíduo da equação é zero existem dois casos: a solução é exata ou a solução é a trivial. Para analisar que  $\vartheta(t)$  é uma medida para o termo residual, inseriu-se a solução na equação parcial original (equação (3.4)) e integrou-se de 0 a  $R$ . Tomando o módulo, será denotado por  $R_1(t)$  e  $R_2(t)$  o termo residual para o fluxo de nêutrons e a concentração de precursor de nêutrons atrasados, respectivamente. Nos demais casos, ao longo do trabalho, o cálculo do termo residual foi feito de maneira análoga. Abaixo segue o resultado obtido:

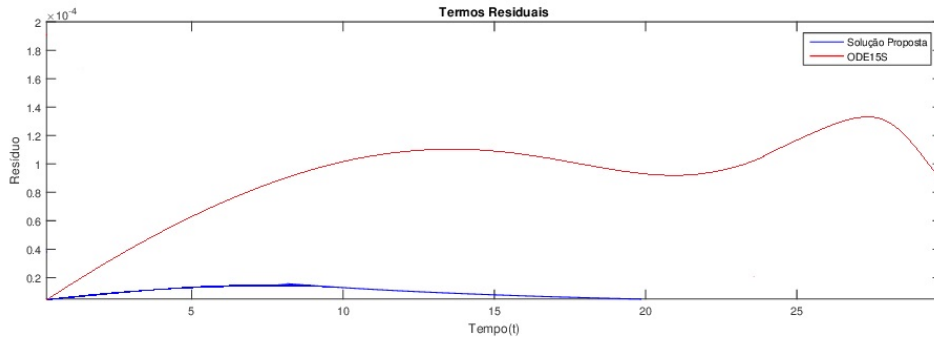


Figura 3.7:  $R_1(t)$  - Termos residuais das soluções obtidas para  $\Sigma_a(t) = 0.001 \cdot t$  - Sistema (3.16)

Do gráfico acima, pode-se ver que o resíduo da solução no trabalho foi menor do que a obtida pelo método ODE15S. Após o vigésimo segundo, o gráfico em azul vai a zero, enquanto que gráfico em vermelho segue com um valor significativo. Assim, fica evidente a maior eficácia do método do trabalho ao aproximar o sistema (3.16). Por fim, é apresentado o gráfico da solução proposta em três dimensões.

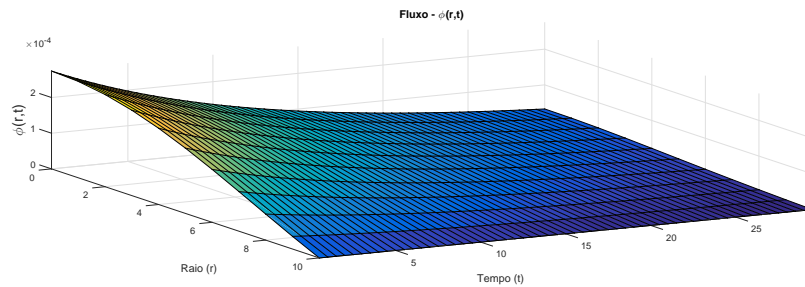


Figura 3.8: Fluxo obtido via proposta da tese para  $\Sigma_a(t) = 0.001 \cdot t$

O gráfico obtido é muito semelhante ao da figura (3.4). Novamente, o fluxo é máximo no centro do cilindro e tende a zero na medida que aproxima-se da fronteira. Nota-se também uma grande suavidade na solução encontrada.

### 3.2.2 Seção de Choque do tipo Senoidal

No segundo caso, será observado o comportamento de  $\vartheta(t)$  para  $\Sigma_a(t) = 0.01 \cdot (1 + \text{sen}(t))$ . O gráfico (3.9) mostra os resultados obtidos.

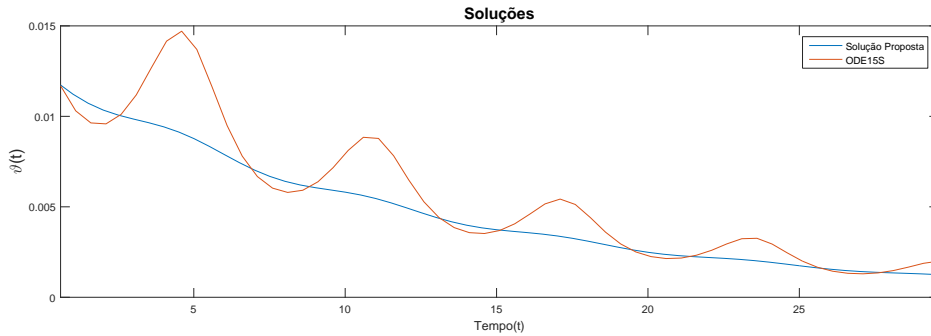


Figura 3.9:  $\vartheta(t)$  - Solução Proposta (J=4, N=5) e do método ODE15S (N=23) para  $\Sigma_a(t) = 0.01 \cdot (1 + \text{sen}(t))$

Analisando o gráfico, temos que é bem notável a diferença entre as duas soluções fornecidas. Mas, para não termos dúvida entre essa discrepância, efetuaremos a divisão entre as soluções.

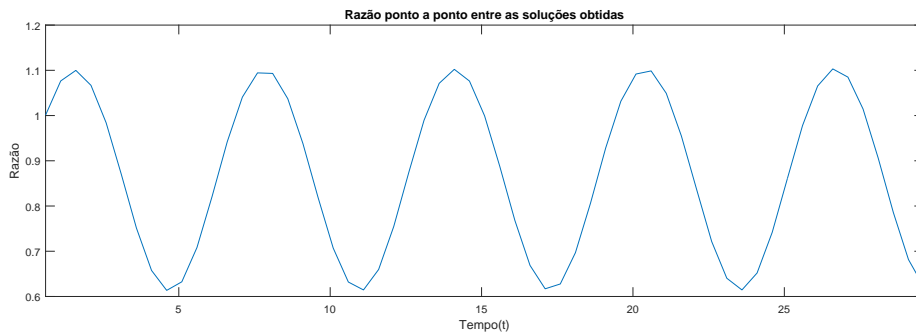


Figura 3.10: Razão entre as soluções obtidas para  $\Sigma_a(t) = 0.01 \cdot (1 + \text{sen}(t))$

Como era de se esperar, a razão ponto a ponto não resultou em uma reta, mas, sim, em um gráfico oscilatório. Sendo assim, para fazermos uma análise mais detalhada dos resultados obtidos, efetuaremos o mesmo processo de cálculo dos resíduos feito anteriormente.

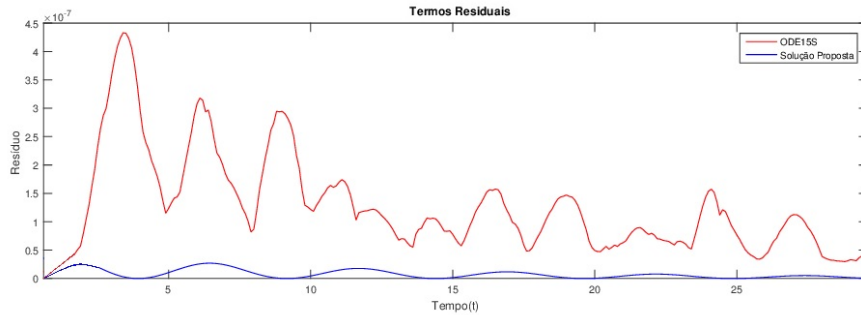


Figura 3.11:  $R_1(t)$  - Termos residuais das soluções obtidas para o sistema (3.16)

Analisando o gráfico acima, vê-se que desde o início o resíduo de ODE15S é maior do que a proposta do trabalho. Um dos fatores que torna a proposta mais eficaz deve-se ao fato de que a solução proposta foi criada para valores genéricos de  $t$ . Dessa maneira, não há o risco de propagação de erro, enquanto que o método numérico constrói a solução progressivamente (time-step) a partir da condição inicial. Abaixo, o gráfico tridimensional obtido pelo do método proposto na tese.

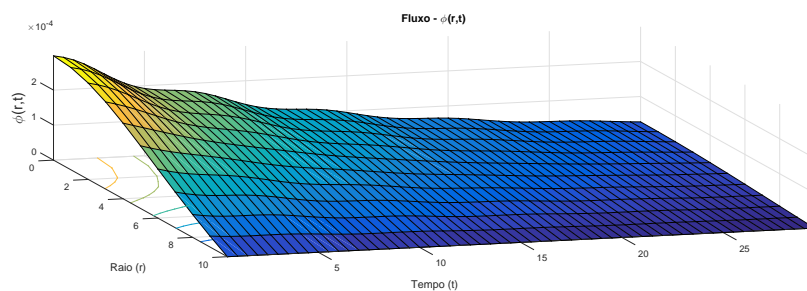


Figura 3.12: Fluxo obtido pela proposta do trabalho

Na figura, fica evidente a influência senoidal bem como o cumprimento das condições de contorno.

### 3.2.3 Seção de Choque Degrau

No terceiro e último caso desse capítulo, vamos assumir que  $\Sigma_a(t) = 1.5843 \cdot 10^{-2} \cdot H(-t + 10)$ , o qual trata-se numa mudança instantânea na seção de choque de absorção. Vale ressaltar que o valor  $1.5843 \cdot 10^{-2}$  é o mesmo apresentado para  $\Sigma_a$ , dada na tabela (3.1). O resultado é dado pelo gráfico abaixo.

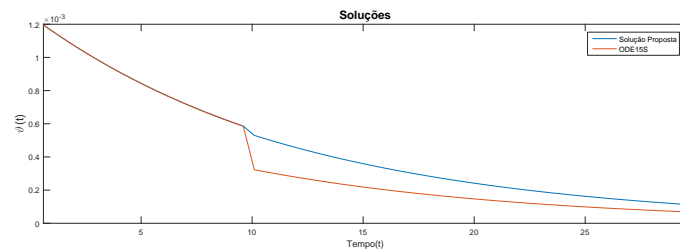


Figura 3.13:  $v(t)$  - Solução Proposta ( $J=2$ ,  $N=5$ ) e do método ODE15S ( $N=16$ ) para  $\Sigma_a(t) = 1.5843 \cdot 10^{-2} \cdot H(-t + 10)$

Pela figura até o décimo segundo, as duas soluções comportam-se da mesma maneira, mas, após esse tempo, a solução proposta sofre uma pequena influência em seu comportamento, enquanto que o gráfico do método ODE15S sofre uma alteração mais brusca, mantendo-se abaixo da solução em azul até o fim do intervalo. Foi efetuada a razão entre essas soluções para que seja feita uma análise dos resultados.

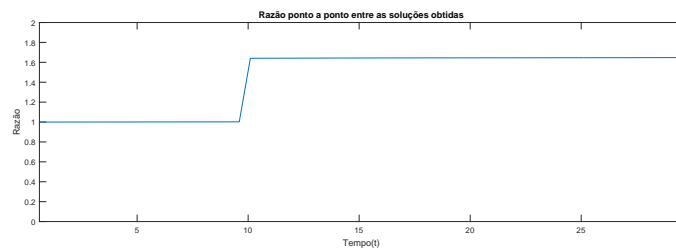


Figura 3.14: Razão entre as soluções obtidas para  $\Sigma_a(t) = 1.5843 \cdot 10^{-2} \cdot H(-t + 10)$

Do gráfico (3.13) sabia-se que a razão durante os dez primeiros segundos iria ser um. Após esse instante, a razão continuou a ser constante, porém, admitindo

o valor aproximado de 1,5. Para uma melhor análise dos resultados abaixo, segue o gráfico dos resíduos dessas soluções.

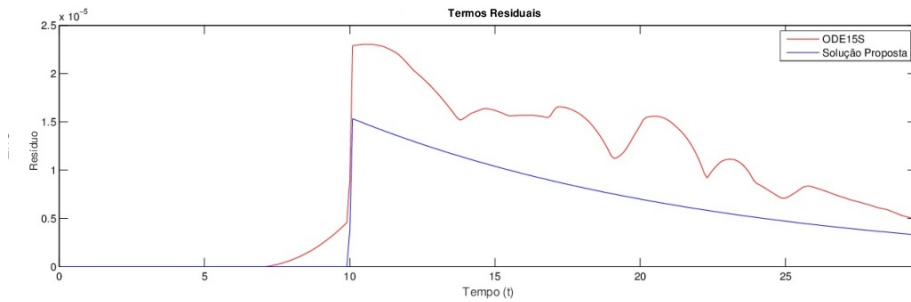


Figura 3.15:  $R_1(t)$  - Termos residuais das soluções obtidas para o sistema (3.16)

A partir do oitavo segundo, tem-se que a solução proposta no trabalho torna-se mais eficaz que a solução dada por ODE15S e à medida que o tempo passa essa diferença vai se atenuando. Assim, como em todos os casos anteriores, os resultados alcançados pela proposta do trabalho foram melhores que o método numérico ODE15S. Por fim, segue o gráfico tridimensional da proposta do trabalho para o caso em questão.

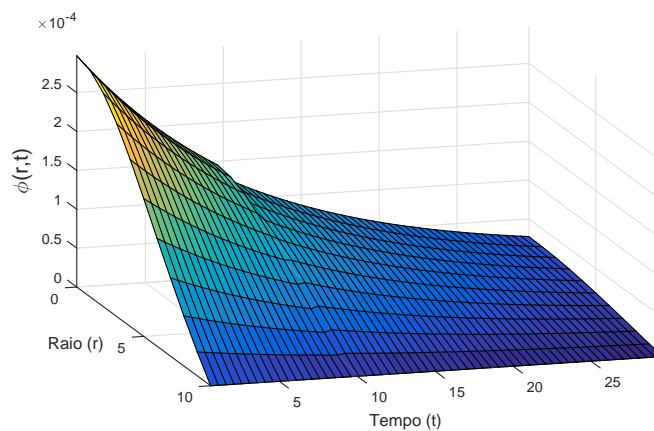


Figura 3.16: Fluxo - ODE15S com  $\Sigma_a(t) = 1.5843 \cdot 10^{-2} \cdot H(-t + 10)$



Além do comportamento nos contornos e no centro do cilindro esperados, nota-se a estabilidade da solução no instante  $t = 10$  segundos, a qual mostra a eficácia da proposta.

# 4 REPRESENTAÇÃO ANALÍTICA DA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE CINÉTICA ESPACIAL PARA GEOMETRIA CILÍNDRICA COM DOIS GRUPOS DE ENERGIA E SEIS GRUPOS DE PRECURSORES DE NÊUTRONS ATRASADOS

## 4.1 Método de Resolução

Neste capítulo, será estudada a solução em representação analítica da Equação de Cinética de nêutrons em geometria cilíndrica unidimensional com dois grupos de energia e seis grupos de precursores de nêutrons atrasados num domínio homogêneo. Será considerado o grupo rápido de energia como grupo um e o grupo dois como o térmico,  $\chi_1^p = \chi_1^d = 1$ ,  $\chi_2^p = \chi_2^d = 0$  e  $\Sigma_{r2}$  dependente do tempo. Reorganizando as equações (2.6) e aplicando as suposições feitas é obtido o seguinte sistema de equações:

$$\frac{1}{v_1} \frac{\partial}{\partial t} \phi_1(r, t) = D_1 \nabla^2 \phi_1(r, t) - \Sigma_{r1} \phi_1(r, t) + (1 - \beta) [\nu_1 \Sigma_{f1} \phi_1(r, t) + \nu_2 \Sigma_{f2} \phi_2(r, t)] + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(r, t) \quad (4.1)$$

$$\frac{1}{v_2} \frac{\partial}{\partial t} \phi_2(r, t) = D_2 \nabla^2 \phi_2(r, t) - \Sigma_{r2}(t) \phi_2(r, t) + \Sigma_{s12} \phi_1(r, t) \quad (4.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} C_i(r, t) = \beta_i [\Sigma_{f1} \phi_1(r, t) + \Sigma_{f2} \phi_2(r, t)] - \lambda_i C_i(r, t) \quad (4.3)$$

com  $i = 1, \dots, 6$ . sendo  $\Delta$  operador Laplaciano definido em (3.3). Com o intuito de simplificar a notação vamos reescrever a equação (4.1). Tomando:

$$\begin{aligned}
A_1 &= v_1 D_1, \\
B_1 &= v_1(1 - \beta)\nu_1 \Sigma_{f1} - v_1 \Sigma_{r1}, \\
E_1 &= v_1(1 - \beta)\nu_2 \Sigma_{f2}, \\
F_i &= v_1 \lambda_i \text{ para } i = 1, \dots, 6,
\end{aligned}$$

tem-se que,

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi_1(r, t) = A_1 \nabla^2 \phi_1(r, t) + B_1 \phi_1(r, t) + E_1 \phi_2(r, t) + \sum_{i=1}^6 F_i C_i(r, t). \quad (4.4)$$

Agora, reorganizando a equação (4.2) e denotando:

$$\begin{aligned}
A_2 &= v_2 D_2, \\
B_2(t) &= -v_2 \Sigma_{r2}(t) \\
E_2 &= \Sigma_{s12},
\end{aligned}$$

obtem-se que,

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi_2(r, t) = A_2 \nabla^2 \phi_2(r, t) + B_2(t) \phi_2(r, t) + E_2 \phi_1(r, t). \quad (4.5)$$

Como antes, reescrevendo as equações (4.3) e escolhendo:

$$\begin{aligned}
H_i &= \beta_i \nu_1 \Sigma_{f1} \\
L_i &= \beta_i \nu_2 \Sigma_{f2},
\end{aligned}$$

tem-se que,

$$\frac{\partial}{\partial t} C_i(r, t) = H_i \phi_1(r, t) + L_i \phi_2(r, t) - \lambda_i C_i(r, t). \quad (4.6)$$

Essas equações são definidas no domínio  $(r, t) \in (0, R.] \times [0, \infty)$  e satisfazem as seguintes condições iniciais:

$$\begin{aligned} \phi_1(r, 0) &= \phi_{1,0}(r), \\ \phi_2(r, 0) &= \phi_{2,0}(r), \\ C_i(r, 0) &= \frac{\beta_i}{\lambda_i} [\nu_1 \Sigma_{f1} \phi_{1,0}(r) + \nu_2 \Sigma_{f2} \phi_{2,0}(r)], \end{aligned} \quad (4.7)$$

para  $i = 1, \dots, 6$ . As condições de contorno são:

$$\begin{aligned} \lim_{r \rightarrow 0^+} \frac{\partial}{\partial r} \phi_j(r, t) &= 0 = \lim_{r \rightarrow 0^+} \frac{\partial}{\partial r} C_i(r, t), \\ \phi_j(R, t) &= 0 = C_i(R, t), \end{aligned} \quad (4.8)$$

$\forall t > 0$ ,  $i = 1, \dots, 6$  e  $j = 1, 2$ . Da mesma maneira que antes, supondo [10] que as soluções podem ser expressas por uma série de funções dadas por:

$$\phi_1(r, t) = \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_{1,n}(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)} \quad (4.9)$$

$$\phi_2(r, t) = \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_{2,n}(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)} \quad (4.10)$$

$$C_i(r, t) = \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \zeta_{i,n}(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)} \quad (4.11)$$

para  $i = 1, \dots, 6$ . Substituindo essas expressões nas equações (4.4), (4.5) e (4.6), lembrando que as funções de Bessel satisfazem a identidade  $\frac{d^2}{dr^2} J_0(\gamma_n r) + \frac{1}{r} \frac{d}{dr} J_0(\gamma_n r) = -(\gamma_n)^2 J_0(\gamma_n r)$ , chega-se nas seguintes equações:

$$\begin{aligned}
\frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{dt} \varphi_{1,n}(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)} &= -A_1 \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} (\gamma_n)^2 \varphi_{1,n}(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)} + \\
&B_1 \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_{1,n}(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)} + E_1 \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_{2,n}(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)} + \\
&\sum_{i=0}^6 F_i \left( \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \zeta_{i,n}(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)} \right). \tag{4.12}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{dt} \varphi_{2,n}(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)} &= -A_2 \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} (\gamma_n)^2 \varphi_{2,n}(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)} + \\
&B_2(t) \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_{2,n}(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)} + E_2 \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_{1,n}(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)}. \tag{4.13}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{dt} \zeta_{i,n}(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)} &= H_i \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_{1,n}(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)} + \\
&L_i \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \varphi_{2,n}(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)} - \lambda_i \frac{\sqrt{2}}{R} \sum_{n=0}^{\infty} \zeta_{i,n}(t) \frac{J_0(\gamma_n r)}{J_1(\alpha_n)}. \tag{4.14}
\end{aligned}$$

Em seguida aplica-se o operador integral

$$\frac{\sqrt{2}}{R} \int_0^R (\cdot) r \frac{J_0(\gamma_m r)}{J_1(\alpha_m)} dr \tag{4.15}$$

nas equações acima. O resultado é:

$$\begin{aligned}
\frac{2}{R^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{dt} \varphi_{1,n}(t) \frac{1}{J_1(\alpha_n) J_1(\alpha_m)} \int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) dr &= -A_1 \frac{2}{R^2} \sum_{n=0}^{\infty} (\gamma_n)^2 \frac{\varphi_{1,n}(t)}{J_1(\alpha_n) J_1(\alpha_m)} \\
&\int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) dr + B_1 \frac{2}{R^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varphi_{1,n}(t)}{J_1(\alpha_n) J_1(\alpha_m)} \int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) dr + \\
&E_1 \frac{2}{R^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varphi_{2,n}(t)}{J_1(\alpha_n) J_1(\alpha_m)} \int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) dr + \\
&\sum_{i=1}^6 F_i \left( \frac{2}{R^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\zeta_{i,n}(t)}{J_1(\alpha_n) J_1(\alpha_m)} \int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) dr \right) \tag{4.16}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\frac{2}{R^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{dt} \varphi_{2,n}(t) \frac{1}{J_1(\alpha_n) J_1(\alpha_m)} \int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) dr &= -A_2 \frac{2}{R^2} \sum_{n=0}^{\infty} (\gamma_n)^2 \frac{\varphi_{2,n}(t)}{J_1(\alpha_n) J_1(\alpha_m)} \\
&\int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) dr + B_2(t) \frac{2}{R^2} \sum_{n=1}^{\infty} \frac{\varphi_{2,n}(t)}{J_1(\alpha_n) J_1(\alpha_m)} \int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) dr + \\
&E_2 \frac{2}{R^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varphi_{1,n}(t)}{J_1(\alpha_n) J_1(\alpha_m)} \int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) dr.
\end{aligned} \tag{4.17}$$

$$\begin{aligned}
\frac{2}{R^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{d}{dt} \zeta_{i,n}(t) \frac{1}{J_1(\alpha_n) J_1(\alpha_m)} \int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) dr &= H_i \frac{2}{R^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varphi_{1,n}(t)}{J_1(\alpha_n) J_1(\alpha_m)} \\
&\int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) dr + L_i \frac{2}{R^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\varphi_{2,n}(t)}{J_1(\alpha_n) J_1(\alpha_m)} \int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) dr - \\
&\lambda_i \frac{2}{R^2} \sum_{n=0}^{\infty} \frac{\zeta_{i,n}(t)}{J_1(\alpha_n) J_1(\alpha_m)} \int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) dr.
\end{aligned} \tag{4.18}$$

Nesse momento, utiliza-se a propriedade de ortogonalidade das funções de Bessel de maneira que o sistema de equações é simplificado. Finalmente, é preciso resolver o seguinte sistema de equações, dependendo somente do tempo:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt} \varphi_{1,n}(t) &= [-A_1(\gamma_n)^2 + B_1] \varphi_{1,n}(t) + E_1 \varphi_{2,n}(t) + \sum_{i=1}^6 F_i \zeta_{i,n}(t) \\
\frac{d}{dt} \varphi_{2,n}(t) &= [-A_2(\gamma_n)^2 + B_2(t)] \varphi_{2,n}(t) + E_2 \varphi_{1,n}(t) \\
\frac{d}{dt} \zeta_{i,n}(t) &= H_i \varphi_{1,n}(t) + L_i \varphi_{2,n}(t) - \lambda_i \zeta_{i,n}(t)
\end{aligned} \tag{4.19}$$

para  $i = 1, \dots, 6$ . Pode-se representar matricialmente o sistema acima por:

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \varphi_{1,n}(t) \\ \varphi_{2,n}(t) \\ \zeta_{1,n}(t) \\ \vdots \\ \zeta_{6,n}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -A_1(\gamma_n)^2 + B_1 & E_1 & F_1 & \dots & F_6 \\ E_2 & -A_2(\gamma_n)^2 + B_2(t) & 0 & \dots & 0 \\ H_1 & L_1 & \lambda_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_6 & L_6 & 0 & \dots & \lambda_6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_{1,n}(t) \\ \varphi_{2,n}(t) \\ \zeta_{1,n}(t) \\ \vdots \\ \zeta_{6,n}(t) \end{bmatrix}$$

com  $n = 0, \dots, N$ , sendo  $N$  o truncamento da série.

Mais uma vez usando a ideia de decomposição, a matriz do problema será separada numa parte constante e outra dependente do tempo. A inicialização trata o problema com parâmetros nucleares constantes na qual conhece-se a solução. Esta solução é sujeita às condições iniciais do problema original e as demais recursões possuem condições de contorno homogêneas. Como antes, nosso sistema recursivo é feito de maneira que os termos de correções são considerados como termos fontes compostos pelas soluções encontradas nas etapas anteriores. Será utilizada a seguinte notação:

$$\widetilde{MC}_n = \begin{bmatrix} -A_1(\gamma_n)^2 + B_1 & E_1 & F_1 & \dots & F_6 \\ E_2 & -A_2(\gamma_n)^2 & 0 & \dots & 0 \\ H_1 & L_1 & \lambda_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ H_6 & L_6 & 0 & \dots & \lambda_6 \end{bmatrix},$$

$$\widetilde{F}(t) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & B_2(t) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix},$$

e

$$\widetilde{\psi}_n = \begin{bmatrix} \varphi_{1,n}(t) \\ \varphi_{2,n}(t) \\ \zeta_{1,n}(t) \\ \vdots \\ \zeta_{6,n}(t) \end{bmatrix} \quad (4.20)$$

para  $n = 0, 1, \dots, N$ . Utilizando o operador (3.13), obtém-se as seguintes condições iniciais:

$$\begin{aligned} \varphi_{1,n}(0) &= \frac{\sqrt{2}}{RJ_1(\alpha_n)} \int_0^R \phi_{1,0}(r)r J_0(\gamma_n r) dr \\ \varphi_{2,n}(0) &= \frac{\sqrt{2}}{RJ_1(\alpha_n)} \int_0^R \phi_{2,0}(r)r J_0(\gamma_n r) dr \\ \xi_{i,n}(0) &= \frac{\beta_i}{\lambda_i} [\nu_1 \Sigma_{f1} \varphi_{1,n}(0) + \nu_2 \Sigma_{f2} \varphi_{2,n}(0)] \quad i = 1, \dots, 6. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Assim, deve-se resolver o problema

$$\frac{d}{dt} \widetilde{\psi}_n(t) - MC_n \widetilde{\psi}_n(t) = \widetilde{F}(t) \quad (4.22)$$

com condições iniciais dadas pelas equações (4.27). Na sequência  $\widetilde{\psi}_n(t)$ , serão calculados  $\widetilde{\psi}_{nj}(t)$ , tais que  $\widetilde{\psi}_{nj}(t) \rightarrow \widetilde{\psi}_n(t)$ , da seguinte forma:

Começa-se resolvendo o problema

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt} \widetilde{\psi}_{n0}(t) - MC_n \widetilde{\psi}_{n0}(t) = 0, \\ \widetilde{\psi}_{n0}(0) = \begin{bmatrix} \varphi_{1,n}(0) \\ \varphi_{2,n}(0) \\ \xi_{1,n}(0) \\ \xi_{2,n}(0) \\ \xi_{3,n}(0) \\ \xi_{4,n}(0) \\ \xi_{5,n}(0) \\ \xi_{6,n}(0) \end{bmatrix}, \end{array} \right. \quad (4.23)$$



cuja solução é

$$\tilde{\psi}_{n0}(t) = e^{\widetilde{MC}_n t} \tilde{\psi}_{n0}(0). \quad (4.24)$$

As demais soluções surgem ao resolver o problema

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt} \tilde{\psi}_{nj}(t) - \widetilde{MC}_n \tilde{\psi}_{nj}(t) = \widetilde{F}(t) \tilde{\psi}_{n(j-1)}(t), \\ \tilde{\psi}_{nj}(0) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \end{array} \right. \quad j \geq 1, \quad (4.25)$$

cuja solução é

$$\tilde{\psi}_{nj}(t) = \int_0^t e^{\widetilde{MC}_n(t-s)} \widetilde{F}(s) \tilde{\psi}_{n(j-1)}(s) ds. \quad (4.26)$$

Na seção que segue, são apresentados os resultados do que fora desenvolvido feito nesse capítulo.

## 4.2 Resultados Numéricos

Nesta seção, como antes, primeiramente, será comparada a solução proposta com o solução analítica para o caso em que a seção de choque é constante e num segundo momento serão estudados outros casos. Vale lembrar que o cálculo das integrais (4.26) foram feitas de forma analítica (variável simbólica-MATLAB). As condições iniciais utilizadas foram as seguintes:

$$\phi_{1,0}(r) = \phi_{2,0}(r) = 1 - \frac{r^2}{R^2}. \quad (4.27)$$

Serão apresentados agora os parâmetros nucleares considerando dois grupos de energia.

Tabela 4.1: Parâmetros Nucleares – Grupos de Energia[Duderstadt e Hamilton, 1976]

Parâmetros	Grupo 1	Grupo 2
$D [cm]$	1,0	0,5
$v [cm/s]$	$10^7$	$3 \cdot 10^5$
$\Sigma_{rg} [cm^{-1}]$	0,02	0,08
$\Sigma_{g \rightarrow g+1} [cm^{-1}]$	0,01	0
$\nu \Sigma_{fg} [cm^{-1}]$	0,005	0,099

Tabela 4.2: Nêutrons Atrasados[Duderstadt e Hamilton, 1976]

i	$\beta_i$	$\lambda_i [s^{-1}]$
1	0,00022	0,0124
2	0,00164	0,0305
3	0,00147	0,111
4	0,00296	0,31
5	0,00086	1,14
6	0,00032	3,01

Destacamos o fato de que na tabela (4.1),  $\Sigma_{r2} = 0,08$  apenas para no primeiro caso, na qual considera-se este ter o constante. Nas demais análises  $\Sigma_{r2}$  depende do tempo. Definimos  $\varsigma_i(t) = \sum_{n=1}^N \varphi_{i,n}(t)$  para  $i = 1, 2$ , sendo que 1 representa o fluxo rápido e 2 o fluxo térmico. O critério de parada foi o mesmo usado em (3.29). Salientamos também o fato de que serão gerados apenas os gráficos de  $\varsigma_1(t)$ , para que as análises não sejam demasiadamente longas. No gráfico (4.1), encontram-se as soluções obtidas.

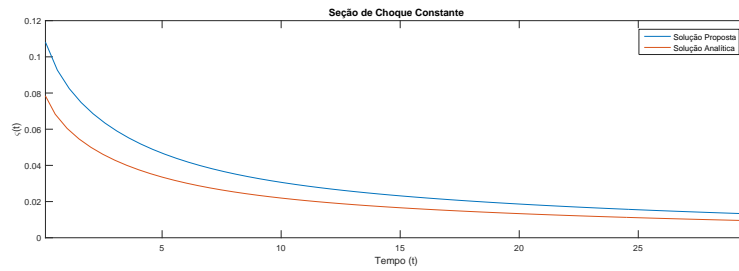


Figura 4.1:  $c_1(t)$  - Solução Proposta ( $J=4, N=6$ ) e Analítica ( $N=4$ )

Lembrando que o problema é invariante sob transformação de escala, nesse momento, será efetuada a razão entre as soluções, a fim de verificar se, de fato, a solução é recriada.

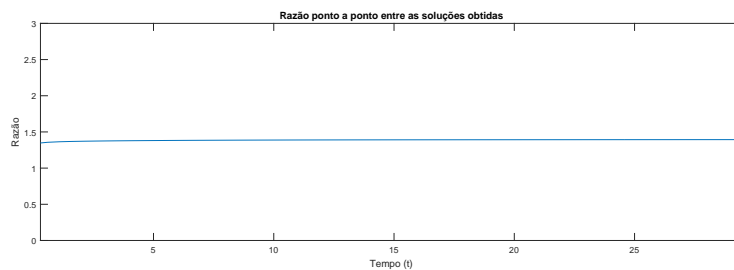


Figura 4.2: Razão entre as soluções  $c_1(t)$

Posto que a razão entre os gráficos resultou em uma reta em 1,3937, pode-se constatar que o método proposto reconstitui a solução analítica. Como antes, será plotado o gráfico entre a solução proposta dividida por 1,3937 e a solução analítica.

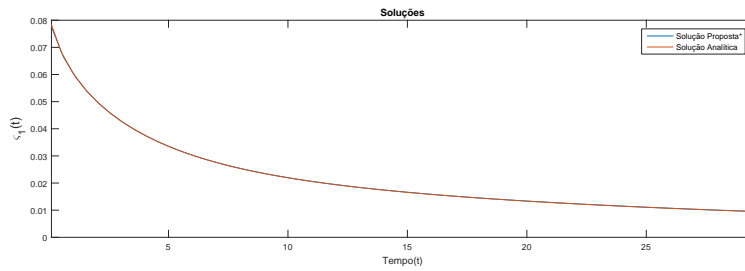


Figura 4.3:  $\varsigma_1(t)$  - Solução Proposta ( $J=4$ ,  $N=6$ ) e Analítica ( $N=4$ )

Mais uma vez, tem-se que os gráficos se sobrepõem, confirmando a reconstituição da solução. Abaixo, seguem os gráficos do fluxo rápido e térmico para  $0 < R \leq 10$  e  $0 < t \leq 30$ .

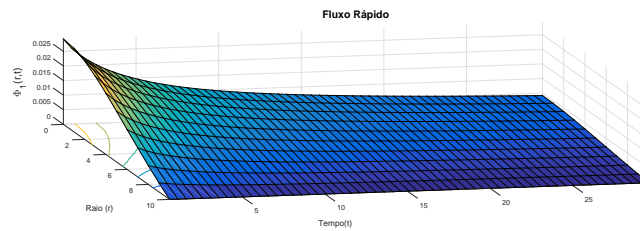


Figura 4.4:  $\Phi_1(r, t)$  - Solução proposta na tese

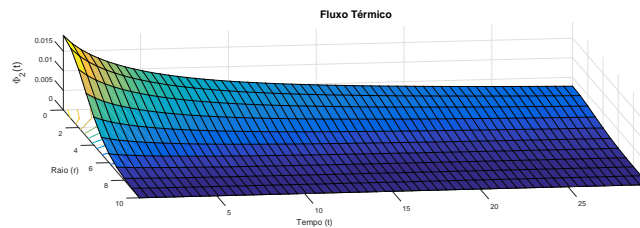


Figura 4.5:  $\Phi_2(r, t)$  - Solução proposta na tese

Nas duas figuras, pode-se observar que ambos fluxos são máximos no centro do cilindro e vão tornando-se menores à medida que o tempo aumenta.

### 4.2.1 Seção de Choque Linear

No exemplo que segue, será analisada uma seção de choque da forma  $a \cdot t$ ,  $a \in \mathbb{R}$ . Na figura (4.6), tem-se o gráfico de  $\varsigma_1(t)$  obtido pela proposta do trabalho e via ODE15S com  $a = 0,001$ .

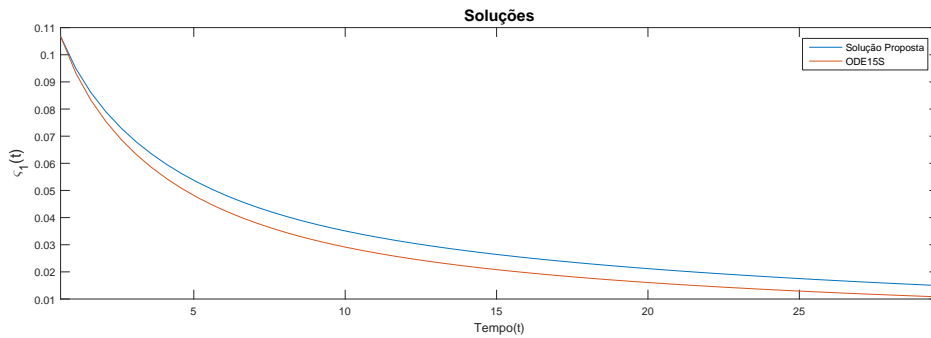


Figura 4.6:  $\varsigma_1(t)$  - Solução Proposta (J=3,N=5) e via ODE15S (N=14)

Do gráfico pode-se ver que, para esse exemplo, as duas soluções estão muito próximas e possuem um comportamento muito similar. Esse fato será melhor detalhado ao se efetuar a divisão entre as soluções.

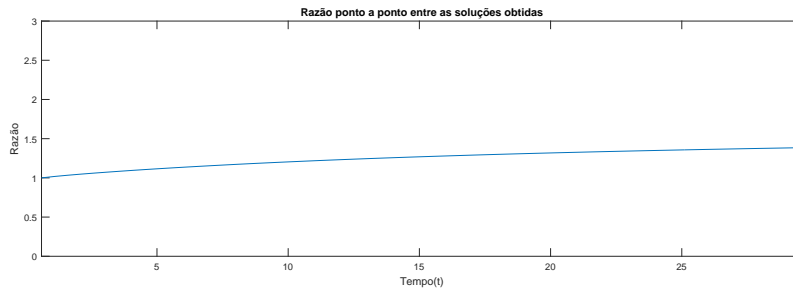


Figura 4.7: Razão entre as soluções  $\varsigma_1(t)$  para  $\Sigma_{r2}(t) = 0,001 \cdot t$

Apesar de quase parecer uma reta, a razão entre as soluções não permanece constante durante todo o intervalo. Essa diferença entre as soluções é mais acentuada nos primeiros dez segundos e atenua-se depois. Como antes, abaixo segue o gráfico dos termos residuais dessas soluções.

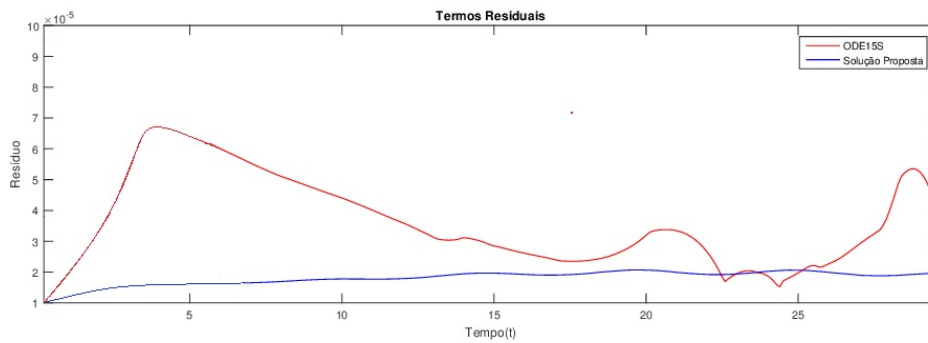


Figura 4.8:  $R_1(t)$  - Termos residuais das soluções  $\varsigma_1(t)$  obtidas para  $\Sigma_{r2}(t) = 0,001 \cdot t$

Ao colocar-se no mesmo gráfico os resíduos das duas soluções, no caso da solução proposta tem-se que esse encontra-se abaixo da linha vermelha (ODE15S), salvo no intervalo em que  $t \in (23, 24)$ , aproximadamente. Esse fato demonstra a melhor eficácia da proposta nesse caso. No que segue, tem-se os gráficos tridimensional dos fluxo rápido e térmico.

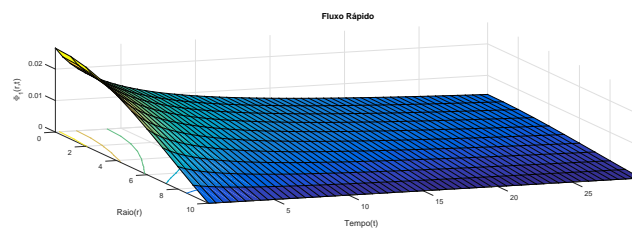


Figura 4.9:  $\Phi_1(r, t)$  para  $\Sigma_{r2}(t) = 0,001 \cdot t$

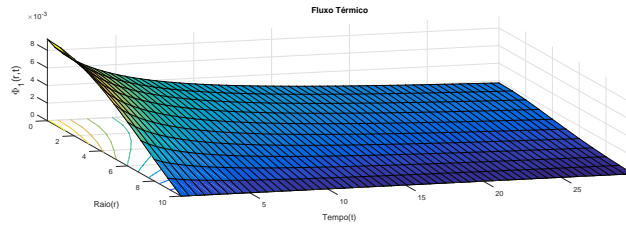


Figura 4.10:  $\Phi_2(r, t)$  para  $\Sigma_{r_2}(t) = 0,001 \cdot t$

#### 4.2.2 Seção de Choque do tipo Senoidal

Nesse segundo caso, será observado o comportamento de  $\varsigma_1(t)$  para o caso  $\Sigma_{r_2}(t) = 0.01 \cdot (1 + \text{sen}(t))$ . Segue o gráfico na figura (4.11) abaixo:

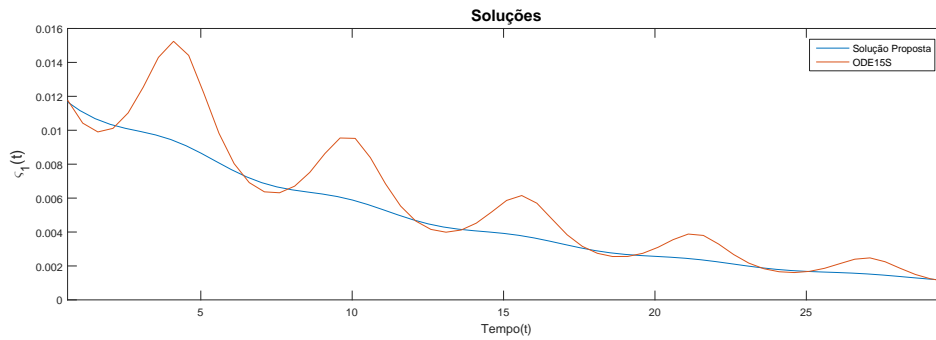


Figura 4.11:  $\varsigma_1(t)$  - Solução Proposta ( $J=3, N = 5$ ) e via ODE15S ( $N = 17$ ).

Assim como no caso monoenergético, pode-se ver a influência da função seno na solução. Também é possível ver uma notável diferença entre as duas soluções. Efetuando a razão entre os dados obtidos temos que:

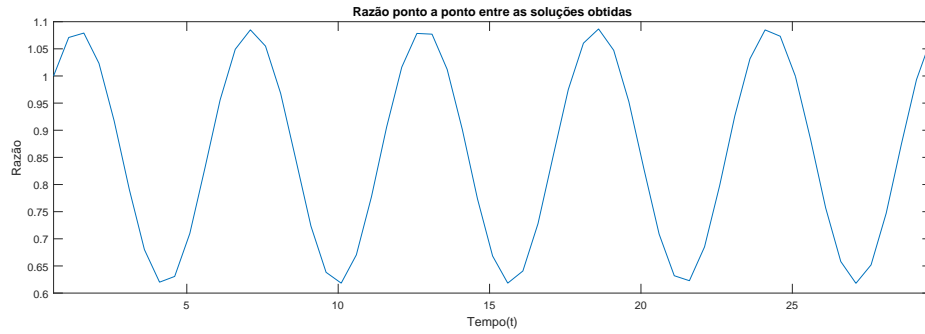


Figura 4.12: Razão entre as soluções obtidas para  $\varsigma_1(t)$  no caso  $\Sigma_{r2}(t) = 0.01 \cdot (1 + \text{sen}(t))$ .

Da figura (4.11) era de se esperar que a razão entre as soluções não resultasse em um gráfico constante. Mais uma vez, obteve-se um gráfico oscilatório. A seguir, será feita uma análise dos termos residuais dessas soluções.

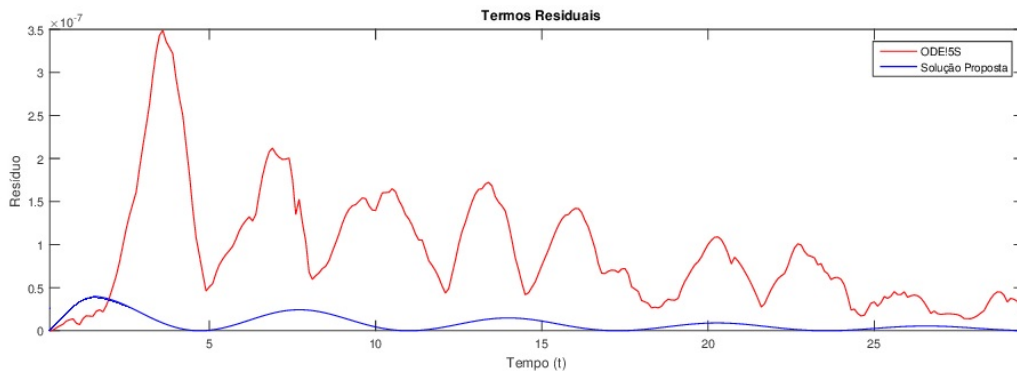


Figura 4.13:  $R_1(t)$  - Termos residuais das soluções obtidas para o sistema (4.19).

Durante aproximadamente os dois primeiros segundos tem-se que, apesar de muito próximos, o resíduo entre a solução proposta é superior ao do método ODE15S. Porém, após esse valor, o cenário é invertido o resultado é que a solução proposta no trabalho é mais eficaz ao aproximar o sistema (4.19). Agora serão apresentados os gráficos tridimensionais para os fluxos rápido e térmico.



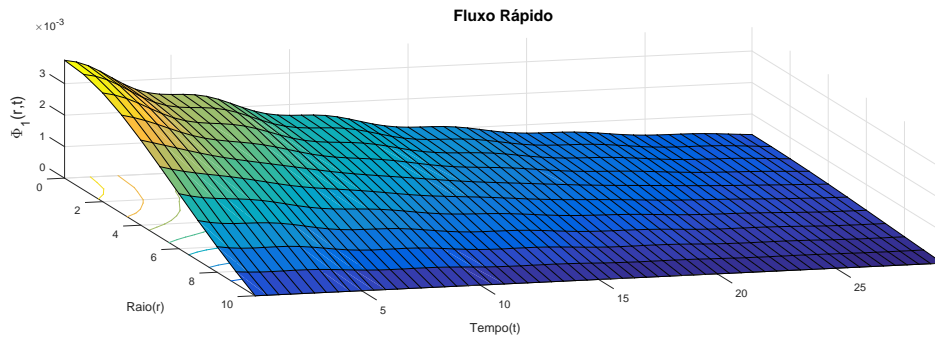


Figura 4.14:  $\Phi_1(r, t)$  - Solução proposta na tese.

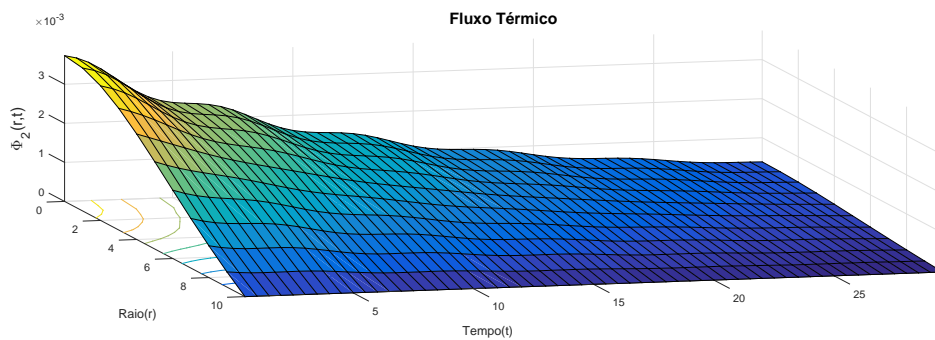


Figura 4.15:  $\Phi_2(r, t)$  - Solução proposta na tese.

Nas duas figuras, é possível ver que os fluxos são máximo no centro do cilindro, e que as condições de contorno do problema são satisfeitas.

### 4.2.3 Seção de Choque do tipo Degrau

No último caso dessa seção, vamos analisar o comportamento das soluções dos sistemas (4.19) para  $\Sigma_{r,2}(t) = 0,08 \cdot H(-t + 10)$ . Abaixo, seguem os gráficos das duas soluções estudadas no trabalho.

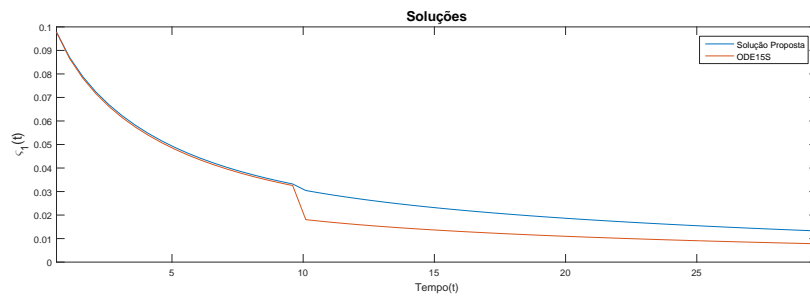


Figura 4.16:  $c_1(t)$  - Solução Proposta (J=4, N=5) e ODE15S (N=17)

Durante os dez primeiros segundos, as duas soluções possuem comportamentos similares. Após esse tempo, a solução em vermelho (ODE15S) sofre uma alteração e passa a ficar abaixo do gráfico em azul. Foi feita a razão entre as soluções para uma melhor investigação.

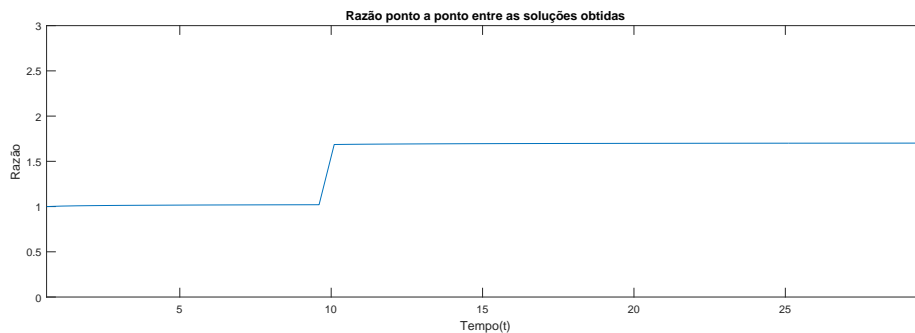


Figura 4.17: Razão entre as soluções  $c_1(t)$  para  $\Sigma_{r2}(t) = 0,08 \cdot H(-t + 10)$

Assim como no caso monoenergético, nos dez primeiros segundos a razão resultou no valor constante um, e após  $t = 10$  segundos o gráfico continuou a ser constante, entretanto, com o valor aproximado de 1,7. Por fim, foram computados os termos residuais das duas soluções para os sistemas (4.19).

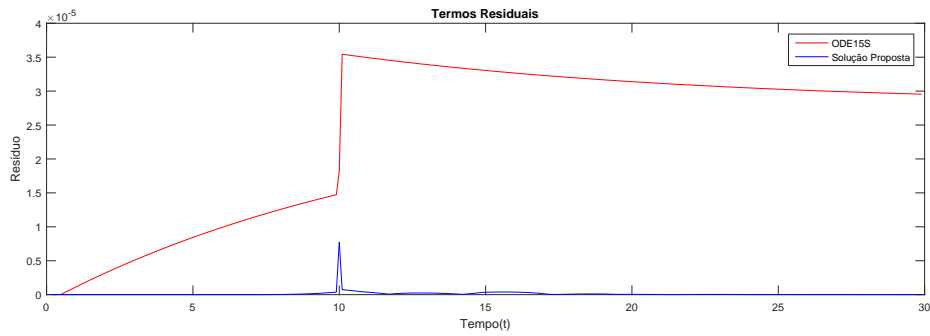


Figura 4.18:  $R_1(t)$  - Termos residuais das soluções  $\varsigma_1(t)$  para  $\Sigma_{r2}(t) = 0,08 \cdot H(-t + 10)$

Do gráfico acima, é possível concluir que o resíduo da solução proposta é sempre menor que o dado pelo método ODE15S, já que essa encontra-se sempre abaixo do gráfico em vermelho. Em particular, temos que, visualmente, o gráfico em azul é praticamente zero, de forma que seu resíduo é praticamente desprezível, salvo no instante  $t = 10$  segundos. Com isso, é possível concluir que o método proposto no trabalho possui um melhor desempenho quando comparado ao método ODE15S. Para fechar, seguem os gráficos tridimensionais para os fluxos rápido e térmico.

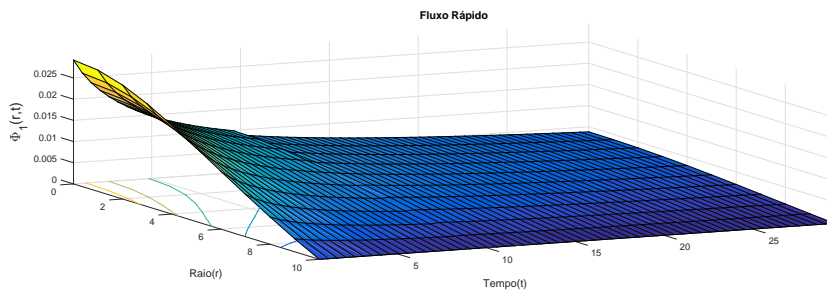


Figura 4.19:  $\Phi_1(r,t)$  para  $\Sigma_{r2}(t) = 0,08 \cdot H(-t + 10)$

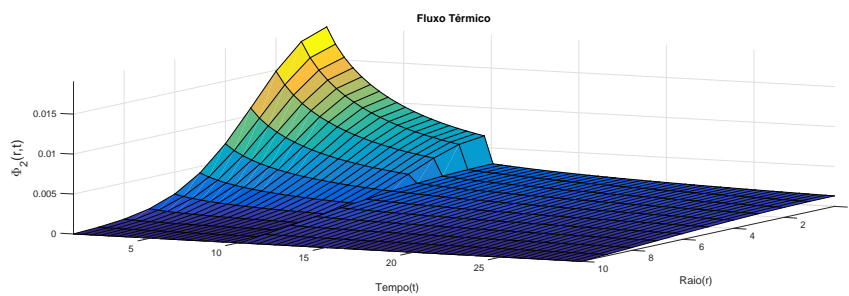


Figura 4.20:  $\Phi_2(r, t)$  para  $\Sigma_{r_2}(t) = 0,08 \cdot H(-t + 10)$

Pelos gráficos, é possível ver que as condições de contorno são satisfeitas e que os fluxos são máximos no centro do cilindro. O gráfico do fluxo térmico foi girado para que seja possível visualizar bem o exato momento em que o fluxo sofre alteração em seu comportamento.

## 5 SEÇÃO DE CHOQUE DE FISSÃO VARIÁVEL

Neste último capítulo, será estudada a solução em representação analítica da Equação de Cinética de nêutrons em geometria cilíndrica unidimensional com dois grupos de energia e seis grupos de precursores de nêutrons atrasados num domínio homogêneo. Diferentemente do capítulo anterior, será considerada a seção de choque de fissão dependente do tempo ( $\Sigma_{f2}(t)$ ).

A justificativa para se utilizarem dependências temporais na seção de choque de fissão, reside em dois principais fatores. O primeiro é para testar a robustez do algoritmo em relação às variações do termo "multiplicativo". E o segundo fator é que existem concepções que consideram combustível variável, por exemplo, um reator tipo Hamm-Untrop (reator alemão de leito de esferas), no qual o combustível é retirado e repostado durante a operação e parâmetros nucleares dependentes do tempo simulando, por exemplo, a assinatura temporal pulsada que é utilizada nas concepções ADS. Dessa maneira, parte-se das equações

$$\frac{1}{v_1} \frac{\partial}{\partial t} \phi_1(r, t) = D_1 \nabla^2 \phi_1(r, t) - \Sigma_{r1} \phi_1(r, t) + (1 - \beta) [\nu_1 \Sigma_{f1} \phi_1(r, t) + \nu_2 \Sigma_{f2}(t) \phi_2(r, t)] + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(r, t) \quad (5.1)$$

$$\frac{1}{v_2} \frac{\partial}{\partial t} \phi_2(r, t) = D_2 \nabla^2 \phi_2(r, t) - \Sigma_{r2} \phi_2(r, t) + \Sigma_{s12} \phi_1(r, t) \quad (5.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} C_i(r, t) = \beta_i [\Sigma_{f1} \phi_1(r, t) + \Sigma_{f2} \phi_2(r, t)] - \lambda_i C_i(r, t) \quad (5.3)$$

com  $i = 1, \dots, 6$ . sendo  $\nabla^2$  é o operador Laplaciano definido em (3.3). Para simplificar a notação, a equação (5.1) será reescrita tomando:

$$\begin{aligned}
\widehat{A}_1 &= v_1 D_1, \\
\widehat{B}_1 &= v_1(1 - \beta)\nu_1 \Sigma_{f1} - v_1 \Sigma_{r1}, \\
\widehat{E}_1(t) &= v_1(1 - \beta)\nu_2 \Sigma_{f2}(t), \\
\widehat{F}_i &= v_1 \lambda_i \text{ para } i = 1, \dots, 6,
\end{aligned}$$

tem-se que,

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi_1(r, t) = \widehat{A}_1 \nabla^2 \phi_1(r, t) + \widehat{B}_1 \phi_1(r, t) + \widehat{E}_1(t) \phi_2(r, t) + \sum_{i=1}^6 \widehat{F}_i C_i(r, t). \quad (5.4)$$

Reorganizando a equação (5.2) e denotando:

$$\begin{aligned}
\widehat{A}_2 &= v_2 D_2, \\
\widehat{B}_2 &= -v_2 \Sigma_{r2} \\
\widehat{E}_2 &= v_2 \Sigma_{s12},
\end{aligned}$$

obtem-se que,

$$\frac{\partial}{\partial t} \phi_2(r, t) = \widehat{A}_2 \nabla^2 \phi_2(r, t) + \widehat{B}_2 \phi_2(r, t) + \widehat{E}_2 \phi_1(r, t). \quad (5.5)$$

Da mesma forma, reescrevendo as equações (5.3) e escolhendo:

$$\begin{aligned}
\widehat{H}_i &= \beta_i \nu_1 \Sigma_{f1} \\
\widehat{L}_i(t) &= \beta_i \nu_2 \Sigma_{f2}(t),
\end{aligned}$$

tem-se que,

$$\frac{\partial}{\partial t} C_i(r, t) = \widehat{H}_i \phi_1(r, t) + \widehat{L}_i(t) \phi_2(r, t) - \lambda_i C_i(r, t). \quad (5.6)$$

Considerando as condições iniciais e de contorno dadas por (4.7) e (4.8), respectivamente, e adotando o mesmo raciocínio usado no capítulo anterior, chega-se no seguinte sistema de equações:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \varphi_{1,n}(t) &= \left[ -\widehat{A}_1(\gamma_n)^2 + \widehat{B}_1 \right] \varphi_{1,n}(t) + \widehat{E}_1(t) \varphi_{2,n}(t) + \sum_{i=1}^6 \widehat{F}_i \zeta_{i,n}(t) \\ \frac{d}{dt} \varphi_{2,n}(t) &= \left[ -\widehat{A}_2(\gamma_n)^2 + \widehat{B}_2 \right] \varphi_{2,n}(t) + \widehat{E}_2 \varphi_{1,n}(t) \\ \frac{d}{dt} \zeta_{i,n}(t) &= \widehat{H}_i \varphi_{1,n}(t) + \widehat{L}_i(t) \varphi_{2,n}(t) - \lambda_i \zeta_{i,n}(t) \end{aligned} \quad (5.7)$$

para  $i = 1, \dots, 6$ . Representando matricialmente o sistema acima por:

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} \varphi_{1,n}(t) \\ \varphi_{2,n}(t) \\ \zeta_{1,n}(t) \\ \vdots \\ \zeta_{6,n}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\widehat{A}_1(\gamma_n)^2 + \widehat{B}_1 & \widehat{E}_1(t) & \widehat{F}_1 & \dots & \widehat{F}_6 \\ \widehat{E}_2 & -\widehat{A}_2(\gamma_n)^2 + \widehat{B}_2 & 0 & \dots & 0 \\ \widehat{H}_1 & \widehat{L}_1(t) & \lambda_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \widehat{H}_6 & \widehat{L}_6(t) & 0 & \dots & \lambda_6 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \varphi_{1,n}(t) \\ \varphi_{2,n}(t) \\ \zeta_{1,n}(t) \\ \vdots \\ \zeta_{6,n}(t) \end{bmatrix}$$

com  $n = 0, \dots, N$ , sendo  $N$  o truncamento da série.

Novamente fazendo-se uso da ideia de decomposição, a matriz do problema será separada numa parte constante e outra dependente do tempo. Inicializa-se o problema com parâmetros nucleares constantes, no qual conhece-se a solução. Essa solução é sujeita às condições de contorno do problema original e as demais recursões possuem condições de contorno homogêneas. Seja:

$$\widehat{MC}_n = \begin{bmatrix} -\widehat{A}_1(\gamma_n)^2 + \widehat{B}_1 & 0 & \widehat{F}_1 & \dots & \widehat{F}_6 \\ \widehat{E}_2 & -\widehat{A}_2(\gamma_n)^2 + \widehat{B}_2 & 0 & \dots & 0 \\ \widehat{H}_1 & 0 & \lambda_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \widehat{H}_6 & 0 & 0 & \dots & \lambda_6 \end{bmatrix},$$

$$\widehat{F}(t) = \begin{bmatrix} 0 & \widehat{E}_1(t) & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \widehat{L}_1(t) & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \widehat{L}_6(t) & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix},$$

e

$$\widehat{\psi}_n = \begin{bmatrix} \varphi_{1,n}(t) \\ \varphi_{2,n}(t) \\ \zeta_{1,n}(t) \\ \vdots \\ \zeta_{6,n}(t) \end{bmatrix} \quad (5.8)$$

para  $n = 0, 1, \dots, N$ . Desta maneira, deve-se resolver o seguinte problema de valor inicial

$$\frac{d}{dt}\widehat{\psi}_n(t) - MC_n\widehat{\psi}_n(t) = \widehat{F}(t) \quad (5.9)$$

com condições iniciais dadas pelas equações (4.27). Na sequência  $\widehat{\psi}_n(t)$ , serão calculados  $\widehat{\psi}_{nj}(t)$ , tais que  $\widehat{\psi}_{nj}(t) \rightarrow \widehat{\psi}_n(t)$ , da seguinte forma:



Começa-se resolvendo o problema

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt}\widehat{\psi}_{n0}(t) - MC_n\widehat{\psi}_{n0}(t) = 0, \\ \widehat{\psi}_{n0}(0) = \begin{bmatrix} \varphi_{1,n}(0) \\ \varphi_{2,n}(0) \\ \xi_{1,n}(0) \\ \xi_{2,n}(0) \\ \xi_{3,n}(0) \\ \xi_{4,n}(0) \\ \xi_{5,n}(0) \\ \xi_{6,n}(0) \end{bmatrix}, \end{array} \right. \quad (5.10)$$

cuja solução é

$$\widehat{\psi}_{n0}(t) = e^{\widehat{MC}_n t}\widehat{\psi}_{n0}(0). \quad (5.11)$$

As demais soluções surgem ao resolver o problema

$$\left\{ \begin{array}{l} \frac{d}{dt}\widehat{\psi}_{nj}(t) - \widehat{MC}_n\widehat{\psi}_{nj}(t) = \widehat{F}(t)\widehat{\psi}_{n(j-1)}(t), \\ \widehat{\psi}_{nj}(0) = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \quad j \geq 1, \end{array} \right. \quad (5.12)$$

cuja solução é

$$\widehat{\psi}_{nj}(t) = \int_0^t e^{\widehat{MC}_n(t-s)}\widehat{F}(s)\widehat{\psi}_{n(j-1)}(s)ds. \quad (5.13)$$

## 5.1 Resultados Numéricos

Serão apresentados agora os resultados numéricos para o cálculo das equações (5.11) (5.13). Os parâmetros nucleares constam nas tabelas (4.1) e (4.2).

As condições iniciais são as mesmas dadas em (4.27). Dessa vez não será feita uma comparação entre a solução proposta e a analítica, pois isso já foi feito no início da seção 4.2.

### 5.1.1 Seção de Choque de fissão linear

Considerando  $\Sigma_{f2}(t) = 0,001 \cdot t$ , temos na figura (5.1) a seguinte solução para  $\varsigma_1(t)$ :

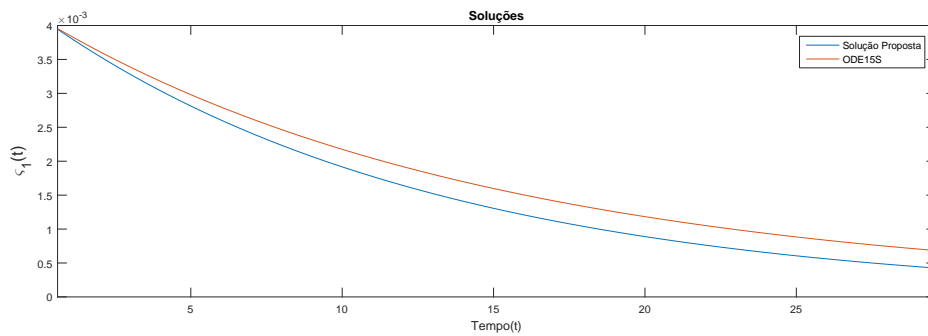


Figura 5.1:  $\varsigma_1(t)$  - Solução Proposta (J=2, N=4) e via ODE15S (N=13)

Da figura acima vê-se que as soluções possuem um comportamento similar. Apesar de  $\Sigma_{f2}$  aumentar na medida em que o tempo passa, pode-se notar que o fluxo de nêutrons diminui com o avanço temporal. Será efetuada a divisão a fim de melhor explorar esse fato.

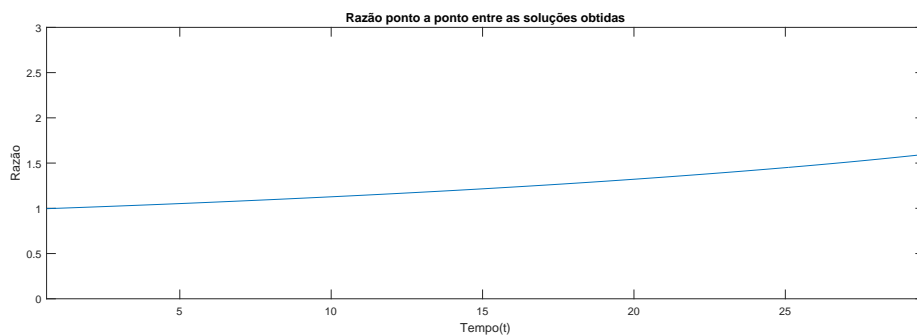


Figura 5.2: Razão entre as soluções  $\varsigma_1(t)$  para  $\Sigma_{f2}(t) = 0,001 \cdot t$

Apesar das soluções possuírem comportamentos parecidos a razão entre as soluções cresce de maneira não linear. Para ver qual delas melhor aproxima o sistema (5.7), serão analisados os termos residuais:

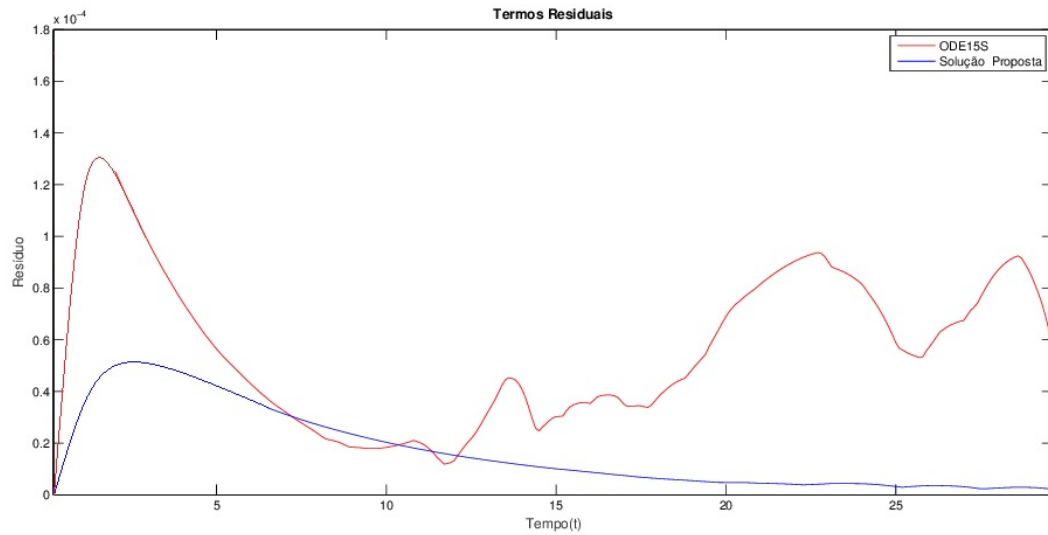


Figura 5.3:  $R_1(t)$  - Termos residuais das soluções obtidas para o sistema (5.7)

Do gráfico observa-se que entre  $t = 7$  e  $t = 12$  segundos, aproximadamente, os dois gráficos encontram-se muito próximos. No entanto, após esse instante, o gráfico em azul passa a estar abaixo do gráfico em vermelho durante o resto do intervalo. Agora, seguem os gráficos dos fluxos rápido e térmico.

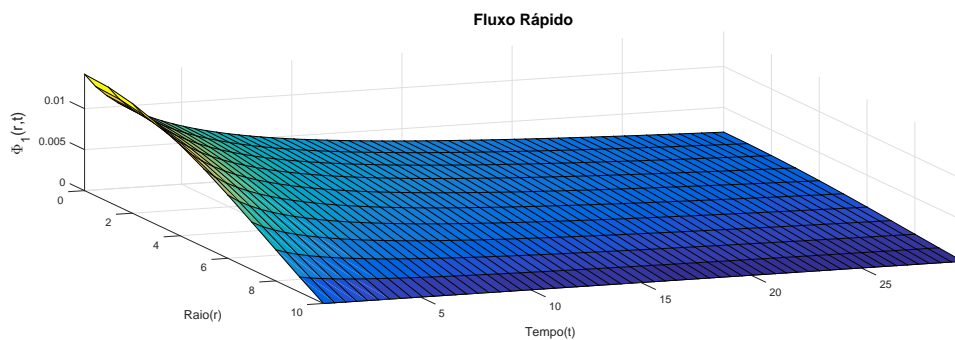


Figura 5.4:  $\Phi_1(r, t)$  - Solução Proposta na tese

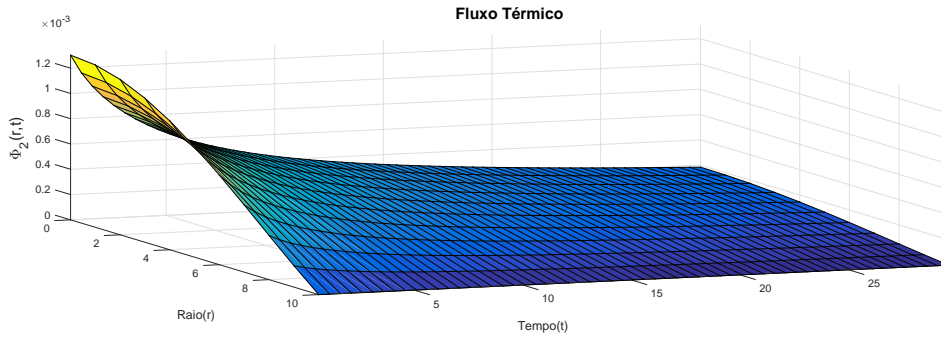


Figura 5.5:  $\Phi_2(r, t)$  - Solução Proposta na tese

Pelos gráficos é possível perceber que as condições de iniciais e de contorno são satisfeitas. Os comportamentos das soluções em ambos casos são similares aos das figuras (4.9) e (4.10).

### 5.1.2 Seção de Choque de Fissão do tipo senoidal

Nessa seção, será analisado  $\varsigma_1(t)$  para o caso  $\Sigma_{f2}(t) = 0,01 \cdot (1 + \text{sen}(t))$ . O gráfico para esse caso segue abaixo:

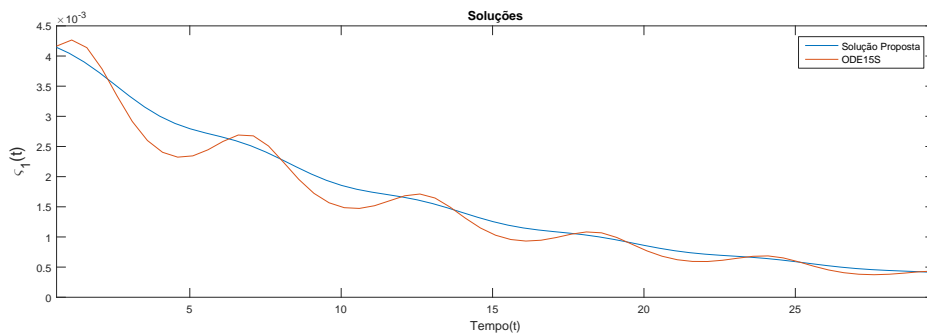


Figura 5.6:  $\varsigma_1(t)$  - Solução Proposta (J=4, N=5) e via ODE15S (N=17)

Pela da figura (5.6) pode-se notar um comportamento oscilatório bem mais acentuado no gráfico em vermelho. Aparentemente, as soluções portam-se de maneira diferente ao longo de todo o intervalo. Será efetuada a razão entre essas soluções para que se possa fazer uma melhor análise.

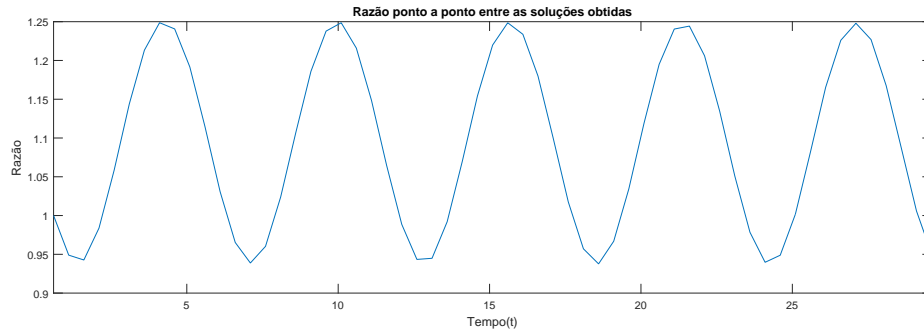


Figura 5.7: Razão entre as soluções  $\varsigma_1(t)$  para  $\Sigma_{f2}(t) = 0,01 \cdot (1 + \text{sen}(t))$

Como esperado, no gráfico (5.7), não foi obtido uma reta. Agora, com os dados obtidos, serão calculados os resíduos ao aproximar o sistema (5.7).

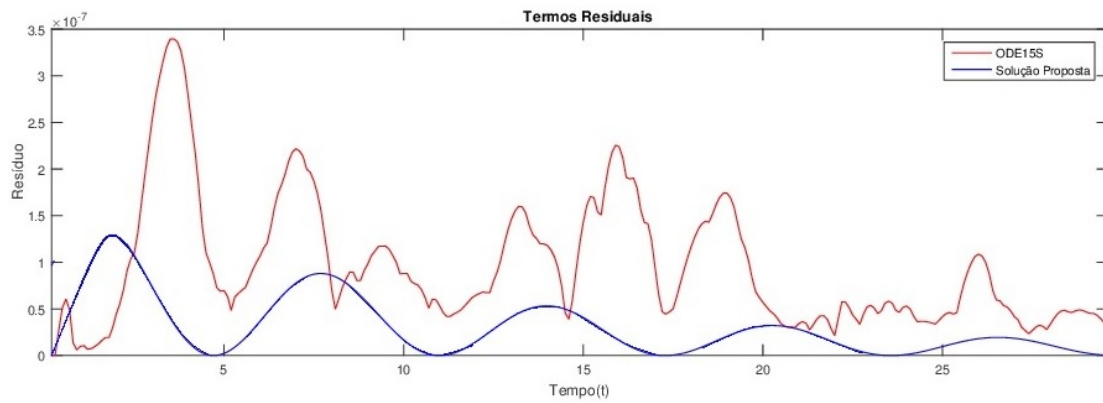


Figura 5.8:  $R_1(t)$  - Termos residuais das soluções obtidas para o sistema (5.7)

Tem-se que, aproximadamente, durante os três primeiros segundos o gráfico em vermelho (ODE15S) está abaixo do gráfico em azul (solução proposta), mas após esse momento, os papéis se invertem mantendo-se assim durante todo o resto do intervalo, mostrando a maior eficácia do método proposto. Por fim, seguem os gráficos para os fluxos rápido e térmico com a variável radial inserida.

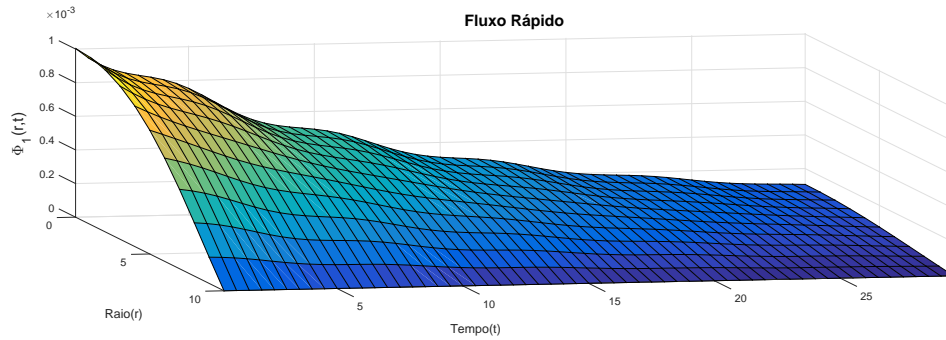


Figura 5.9:  $\Phi_1(r, t)$  - Solução Proposta na tese

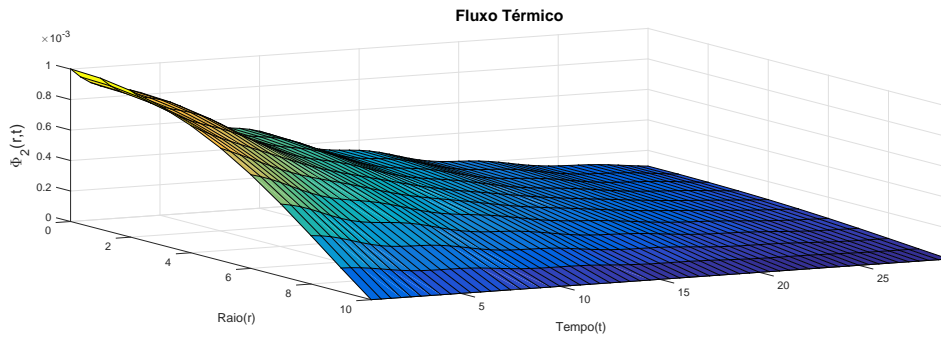


Figura 5.10:  $\Phi_2(r, t)$  - Solução Proposta na tese

Pelos gráficos (5.9) e (5.10), é possível ver que temos fluxo máximo no centro do cilindro e zero quando  $R = 10\text{cm}$ , ou seja, as condições de contorno, bem como as iniciais, são satisfeitas.

## 5.2 Seção de Choque de Fissão do tipo Degrau

No último caso analisado no trabalho, será estudado o caso em que  $\Sigma_{f2}(t) = 0,099 \cdot H(-t+10)$ . Antes da apresentação dos resultados, vale ressaltar que não constarão os gráficos para o caso da ODE15S, pois, o programa não conseguiu computar esse caso, alegando que, para obter resultados precisos, era preciso reduzir o tamanho do passo de integração permitido, que é de  $2.842171^{-14}$ . Abaixo segue o gráfico de  $\varsigma_1(t)$ .

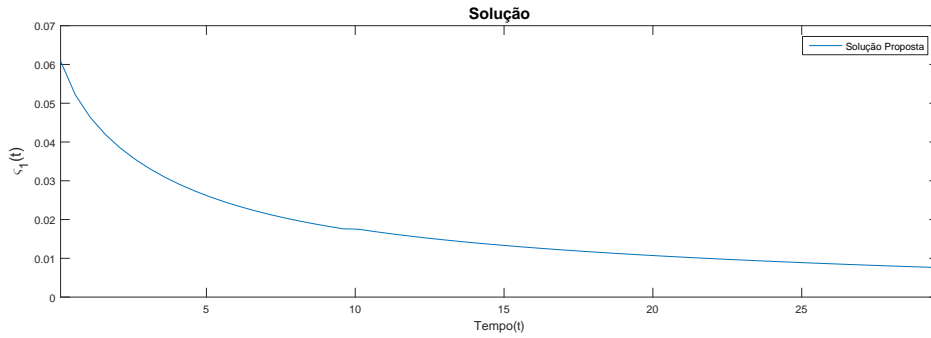


Figura 5.11:  $\varsigma_1(t)$  - Solução Proposta (J=4, N=6)

Do gráfico acima, pode-se notar um suave aumento no instante  $t = 10$ , que é o exato momento em que inserida influência da seção de choque de espalhamento. Como agora não há a solução dada pela ODE15S, avança-se direto para o estudo dos termos residuais.

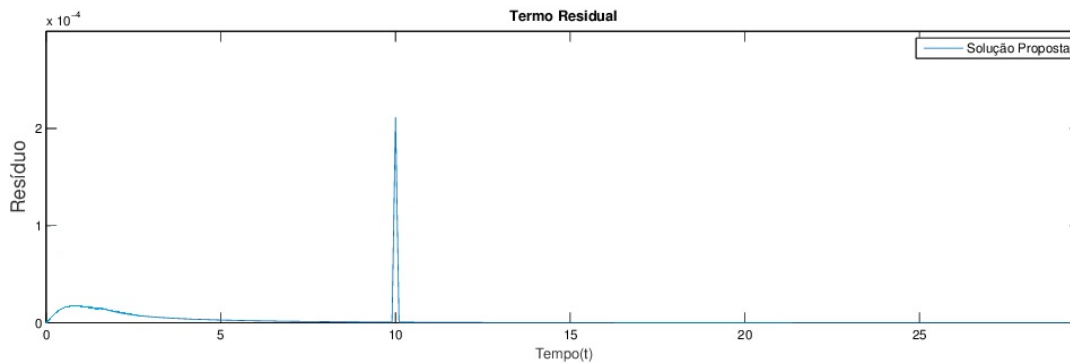


Figura 5.12:  $R_1(t)$  - Termos residuais para o sistema (5.7)

Inicialmente, é possível dizer que o resultado obtido para aproximar o sistema (5.7) é satisfatório ao longo de todo o intervalo. Somente no tempo  $t = 10$  segundos há um pequeno aumento no resíduo, o qual já é imediatamente diminuído no instante seguinte. Para finalizar, seguem os gráficos tridimensionais dos fluxos rápidos e térmicos, respectivamente.

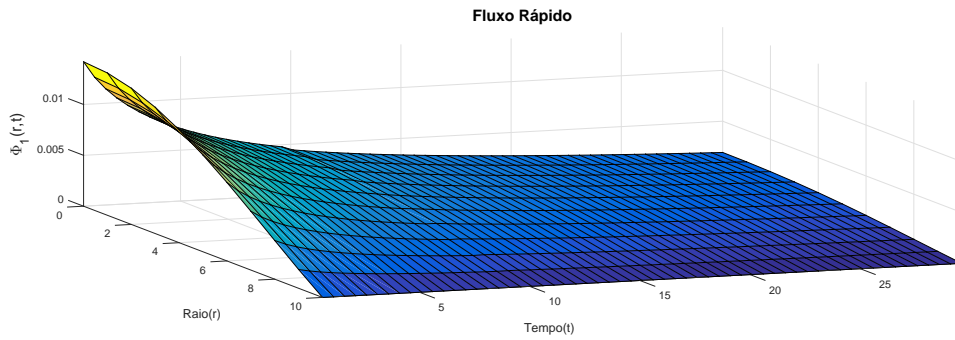


Figura 5.13:  $\Phi_1(r, t)$  - Solução Proposta na tese

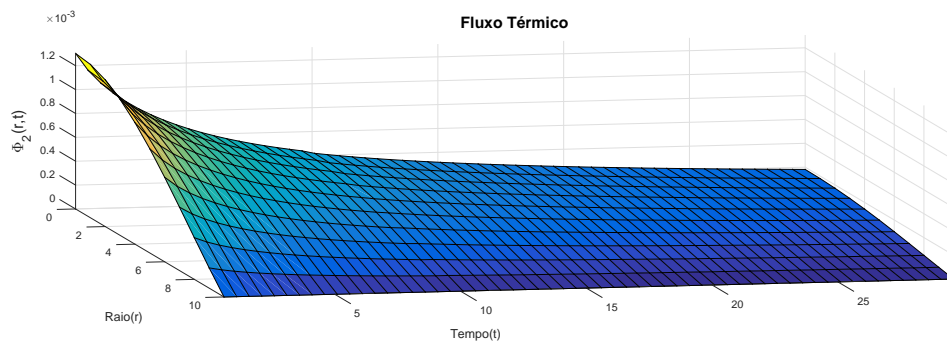


Figura 5.14:  $\Phi_2(r, t)$  - Solução Proposta na tese

Em ambas figuras há o cumprimento das condições de contorno e iniciais. No gráfico (5.13), nota-se um leve aumento no fluxo no instante  $t = 10$  segundos, enquanto que em (5.14) o fluxo decresce quase de maneira linear.



## 6 CONSIDERAÇÕES FINAIS E PERSPECTIVAS

Neste trabalho, é apresentada uma representação analítica da solução para as equações de cinética espacial de nêutrons em geometria cilíndrica pela ideia de decomposição, tomando uma base adequada de autofunções. Os casos contemplados foram o de um grupo de energia com um grupo de precursor de nêutrons atrasados e o de dois grupos de energia com seis grupos de precursores de nêutrons atrasados.

Uma das grandes dificuldades enfrentadas no estudo dessas equações é o seu caráter ”*stiff*” decorrente das significativas diferenças de escalas de tempo entre os nêutrons prontos e atrasados. Sabe-se que os procedimentos numéricos que analisam tais problemas necessitam de ”time-step”, o qual deve ser pequeno para que não ocorra propagação de erro. Entretanto, se o problema requerer um passo de tempo muito pequeno, a fim de manter a precisão exigida, o tempo computacional será bastante elevado. É exatamente nesse ponto que a proposta do trabalho apresenta sua originalidade e mostra-se mais eficiente do que a abordagem numérica, já que devido a sua natureza analítica a solução é construída de maneira que as correções feitas a cada recursão valem para qualquer valor de  $t$ . Outra peculiaridade da produção é a utilização de variáveis simbólicas para o cálculo das recursões. Dessa maneira, não foi necessário empregar técnicas de aproximação para computar as integrais constantes em (3.27), (4.26) e (5.13). A fim de ilustrar o que fora apontado acima, destaca-se a incapacidade do método numérico ODE15S em computar a solução no caso em que a seção de choque de fissão é do tipo Heaviside, uma vez que foi extrapolado o tamanho do passo de integração.

Nos casos analisados em que a seção de choque de absorção, bem como a seção de choque de fissão dependem do tempo, obteve-se sucesso na busca de

uma representação analítica da solução. Os resultados obtidos, juntamente com a análise do termos residuais para cada caso, mostram a solidez dessa metodologia, uma vez que a existência e a unicidade da solução é assegurada (Teorema de Cauchy-Kowalevskaya). Dada a natureza matricial da solução proposta, cabe observar que a generalização para problemas de cinética espacial, os quais requerem um maior número de grupos de energia, grupos de precursores de nêutrons atrasados, bem como número de regiões, é imediata. Nota-se também a importância dessa produção no sentido de que, além da simplicidade da solução, essa é bastante geral, pois é válida para qualquer seção de choque que possui como representação uma função arbitrária do tempo.

Ante ao que foi exposto, como trabalho futuro, sugere-se a generalização desse tipo de solução para problemas tridimensionais e/ou heterogêneos nos modelos analisados. Sendo assim foi possível desenvolver um algoritmo computacional capaz de produzir resultados que auxilie em testes de códigos numéricos que possam vir a ser utilizados em simulações de física de reatores.

## Referências Bibliográficas

- [1] J. R. Lamarsh. *Introduction to Nuclear Engineering*. Addison-Wesley Publishing Company, 1983.
- [2] J. J. Duderstadt and L. J. Hamilton. *Nuclear Reactor Analysis*. John Wiley and Sons, New York, 1976.
- [3] P. Reuss. *Neutron Physics*. EDP Sciences, 2008.
- [4] Schramm M. Vilhena M. T. Ceolin, C. and B. E. J. Bodmann. On the neutron multi-group kinetic diffusion equation in a heterogeneous slab: An exact solution on a finite set of discrete points. *Annals of Nuclear Energy*, 76:271–282, 2015.
- [5] Bodmann B. E. J. Vilhena M. T. Petersen, C. Z. and R. C. Barros. Recursive solutions for multi-group neutron kinetics diffusion equations in homogeneous three-dimensional rectangular domains with time dependent perturbations. *Kerntechnik*, 79:494–499, 2014.
- [6] J. C. L. Fernandes, M. T. Vilhena, and B. E. J. Bodmann. On a comparative analysis of the solutions of the kinetic neutron diffusion equation by the hankel transform formalism and the spectral method. *Progress in Nuclear Energy (New Series)*, 69:71–76, 2013.
- [7] Vilhena M. T. Bodmann B. E. J. Fernandes, J. C. L. and V. Borges. On the build-up factor from the multi-group neutron diffusion equation with cylindrical symmetry. *World Journal of Nuclear Science and Technology*, 3:1–5, 2013.
- [8] F. R. Oliveira. *Solução da Equação de Cinética de Difusão de Nêutrons em Geometria Cilíndrica Tridimensional*. Tese (doutorado em matemática aplicada), PPGMAp da UFRGS, Porto Alegre, 2015.

- [9] W. M. Stacey. *Modal Approximations: Theory and an Application to Reactor Physics*. M.I.T Press, 1967.
- [10] F. R. Oliveira. Solução analítica da equação de multigrupo de cinética de nêutrons em geometria cartesiana e cilíndrica unidimensionais. Dissertação (mestrado em matemática aplicada), PPGMAp da UFRGS, Porto Alegre, 2013.
- [11] R. W. Klopfenstein. Numerical differentiation formulas for stiff systems of ordinary differential equations. *RCA Review*, 32:447–462, 1971.
- [12] T. Reiher. *Stabilitätsuntersuchungen bei rückwärtigen Differentiationsformeln in Abhängigkeit von einem Parameter*. Tech. Report #11, Humboldt-Universität zu Berlin, 1978.
- [13] C. W. Gear. *Numerical Initial Value Problems in Ordinary Differential Equations*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, automatic computation edition, 1971.
- [14] Moler C. Kahaner, D. and S. Nash. *Numerical Methods and Software*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1989.
- [15] A. C. Hindmarsh. Lsode and lsodi, two new initial value ordinary differential equation solvers. *ACM SIGNUM Newsletter*, 15:10–11, 1980.
- [16] Byrne G. D. Brown, P. N. and A. C. Hindmarsh. Vode: a variable-coefficient ode solver. *SIAM J.Sci,Comput.*, 10:1038–1051, 1989.
- [17] A. R. Curtis. *Computational Techniques for Ordinary Differential Equations*, chapter The FACSIMILE numerical integrator for stiff initial value problems, pages 47–82. Academic, London, 1980.

# Apêndice A    UMA COMPARAÇÃO COM UM MÉTODO NUMÉRICO DO MATLAB

Nesse capítulo, serão apresentados os detalhes numéricos do programa utilizado no trabalho. Como é preciso resolver  $N$  sistemas de equações diferenciais ordinárias com coeficientes não constantes, dadas por (4.20), usou-se o comando ODE15s do MATLAB o qual é um método de passo múltiplo de ordem variável baseado em fórmulas de diferenciação numérica (NDFs - Numerical Differentiation Formulas) e também são usadas fórmulas de diferenciação atrasadas (BDFs - Backward Differentiation Formulas), as quais são geralmente menos eficiente. A escolha desse comando também deveu-se ao fato do problema ser *Stiff* (em português, rígido). Enquanto que o seu significado é bastante intuitivo, há muita controvérsia em relação a sua correta definição. A mais pragmática opinião é historicamente a primeira (Curtiss e Hirschfelder 1952): "equações stiff são aquelas em que certos métodos implícitos, em particular BDF, são melhores, geralmente muito melhores, que os explícitos". J. D. Lambert define o fenômeno da seguinte maneira: "Se um método numérico com uma região finita de estabilidade absoluta, aplicado a um sistema com qualquer condição inicial, é forçado a usar num determinado intervalo de integração um passo de tamanho que é excessivamente menor em relação a suavidade da solução nesse intervalo, então o sistema é dito stiff naquele intervalo".

Existem outras características que aparecem em muitos problemas stiff, mas que para cada uma delas há contra-exemplos. Assim, tais aspectos não constituem boas definições. No entanto, definições baseadas nessas características são geralmente utilizadas por alguns autores e são boas pistas para detectar se um problema é ou não stiff. Lambert se refere a esses atributos como "declarações" ao invés de definições, pelos motivos citados acima. Algumas delas são:

- Um problema é stiff quando requerimentos de estabilidade, e não de precisão, restringem o comprimento do passo.
- Quando alguns componentes da solução decaem muito mais rápido que outros.

No problema estudado há uma grande discrepância nas escalas dos parâmetros nucleares, isso justifica a escolha do programa ODE15s. No que segue, é descrito esquema numérico utilizado.

O principal problema é analisar métodos que podem ser utilizados para resolver problemas de valor inicial

$$y' = F(t, y)$$

num intervalo  $[t_0, t_f]$ , com  $y(t_0) = y_0$ . Os métodos para problemas stiff permitem a forma mais geral

$$M(t)y' = f(t, y)$$

com  $M(Y)$  sendo uma matriz não-singular e (muitas vezes) esparsa. Como em muitos problemas, o problema típico em MATLAB é resolvido interativamente e os resultados gerados graficamente.

Uma nova família de fórmulas para resolver problemas stiff, chamados fórmulas de diferenciação numérica, NDF's, será estudada. Essas são mais eficientes que as fórmulas de diferenciação atrasadas, BDF's, embora algumas das fórmulas de ordem superior são menos estáveis, porém, são de fácil implementação. Uma maneira de mudar o tamanho do passo nessa representação é desenvolvida em MATLAB, de maneira a ser compacta e eficiente.

## A.1 Fórmulas Implícitas para Sistemas Stiff

Os BDF's consistem em métodos bastante utilizados para resolver problemas stiff. Quando o tamanho do passo é uma constante  $h$  e diferenças para trás são usadas, a fórmula de ordem  $k$ , BDF $k$ , para um passo de  $(t_n, y_n)$  a  $(t_{n+1}, y_{n+1})$  é

$$\sum_{m=1}^k \frac{1}{m} \nabla^m y_{n+1} - hF(t_{n+1}, y_{n+1}) = 0. \quad (\text{A.1})$$

A equação algébrica para  $y_{n+1}$  é resolvida com uma simplificada iteração de Newton. A iteração inicia com valor pré-dito

$$y_{(0)}^{n+1} = \sum_{m=0}^k \nabla^m y_n. \quad (\text{A.2})$$

O termo líder do erro de truncamento BDF $k$  pode ser aproximado por

$$\frac{1}{k+1} h^{k+1} y^{(k+1)} \approx \frac{1}{k+1} \nabla^{k+1} y_{n+1}. \quad (\text{A.3})$$

A típica implementação de um código BDF mais geral tem um passo de tamanho quase constante. Isso quer dizer que as fórmulas utilizadas são aquelas para um tamanho de passo constante, e esse tamanho mantém-se o mesmo durante uma integração, a menos que haja uma boa razão para que isso se altere (depende do problema analisado). Em geral, esses códigos podem variar sua ordem durante uma integração.

### A.1.1 Fórmulas de Diferenciação Numérica

Notando que o valor pré-dito em (A.2) possui uma memória maior que (A.1), Klopfenstein [11] e Reiher [12] investigaram como obter uma melhor estabilidade. Klopfenstein estudou métodos da forma

$$\sum_{m=1}^k \frac{1}{m} \nabla^m y_{n+1} - hF(t_{n+1}, y_{n+1}) - \kappa \gamma_k (y_{n+1} - y_{n+1}^{(0)}) = 0 \quad (\text{A.4})$$

a qual denominou fórmulas de diferenciação numérica, NDF's. Aqui,  $\kappa$  é um parâmetro escalar e os coeficientes  $\gamma_k$  são dados pela igualdade  $\gamma_k = \sum_{j=1}^k \frac{1}{j}$ . O papel do termo adicionado ao BDFk é dado pela identidade

$$y_{n+1} - y_{n+1}^{(0)} = \nabla^{k+1} y_{n+1}$$

e a aproximação dada em (A.3) é o erro de truncamento do BDFk. Segue que para qualquer valor do parâmetro  $\kappa$ , o método é de ordem (pelo menos)  $k$  e o termo líder do seu erro de truncamento é

$$\left( \kappa \gamma_k + \frac{1}{k+1} \right) h^{k+1} y^{(k+1)}.$$

Para ordens 3 – 6, Klopfenstein e Reiher acharam numericamente que o  $\kappa$  que maximiza o ângulo de  $A(\alpha)$ -estabilidade. Como BDF2 já é A-estável, Klopfenstein considerou como escolher  $\kappa$  de maneira a reduzir o erro de truncamento o máximo possível, mas, ainda, mantendo a A-estabilidade. A escolha ótima foi  $\kappa = -1/9$ , produzindo, assim, um coeficiente de erro de truncamento metade da BDF2. Isso implica que, para tamanhos de passos suficientemente pequenos, NDF2 pode atingir a mesma precisão que a BDF2 com um passo cerca de 26% maior.

As fórmulas derivadas por Klopfenstein e Reiher para ordens maiores que 2 não são tão eficientes devido ao preço pago para se obter estabilidade, reduzindo, assim, sua eficiência. Em contrapartida, foram encontrados valores de  $\kappa$  que tornaram os NDF's mais precisos que os BDF's e não muito menos estáveis. O termo líder de erro de truncamento não pode ser tomado muito pequeno, se não ele dominaria, e a fórmula não se comportaria como o esperado em tamanhos de passos realísticos. Devido ao fato que a fórmula de segunda ordem de Klopfensteins melhora de maneira ótima a precisão ainda mantendo a L-estabilidade, isso serve como um método de ordem 2 para família NDF em questão. Correspondentemente, era de se esperar a mesma melhora na eficiência (26%) para ordens 3-5. Isso vem ao preço de estabilidade reduzida e não pretende-se reduzir o ângulo de estabilidade para mais de 10%. A procura foi feita numericamente. Os resultados são apresentados na tabela A.1.



Ordem k	Coef. NDF $\kappa$	% da taxa do passo	Âng. de estab. BDF	Âng. de estab. NDF	% de mudança no âng. de estb.
1	-0.1850	26%	90°	90°	0%
2	-1/9	26%	90°	90°	0%
3	-0.0823	26%	86°	80°	-7%
4	-0.0415	12%	73°	66°	-10%

Tabela A.1: As NDF's de Klopfenstein-Shampine - Eficiência e  $A(\alpha)$ -estabilidade em relação às BDF's

A fórmula de primeira ordem NDF1 tem a forma

$$y_{n+1} - y_n - \kappa(y_{n+1} - 2y_n + y_{n-1}) = hF(t_{n+1}, y_{n+1}).$$

A fronteira da região de estabilidade de um método linear de passo múltiplo consiste nos pontos  $z$  na qual a equação característica  $\rho(\theta) - z\sigma(\theta) = 0$  tem uma raiz  $\theta$  de magnitude 1. O método de localizar raízes encontra a fronteira sendo um subconjunto de  $z = \rho(\theta)/\sigma(\theta)$  com  $\theta = \exp(i\psi)$  atingindo todos números de magnitude 1. Para NDF1, tem-se

$$Re(z) = 1 - (1 - 2\kappa) \cos(\psi) - 2\kappa \cos^2(\psi)$$

e uma condição suficiente para a fórmula ser A-estável é  $1 - 2\kappa \geq 0$ . Como em outras ordens, temos uma melhora na eficiência de 26% com  $\kappa = -0.1850$ .

### A.1.2 Mudando o Tamanho do Passo

Diferenças para trás são muito adequadas para implementar as NDF's em MATLAB, uma vez que seu algoritmo básico pode ser feito de maneira compacta e eficiente. Será apresentada agora uma forma de mudar o tamanho do passo, o qual também é facilmente adaptado à linguagem.

Quando a integração alcança o ponto  $t_n$ , há valores de solução disponíveis  $y(t_{n-j})$  em  $t_{n-j} = t_n - jh$  para  $j = 0, 1, \dots, k$ . O polinômio interpolador é

$$P(t) = y(t_n) + \sum_{j=1}^k \nabla^j y(t_n) \frac{1}{j!h^j} \prod_{m=0}^{j-1} (t - t_{n-m}).$$

Por definição  $\nabla^j P(t_n) = \nabla^j y(t_n)$ . Nessa representação, a solução é mantida na forma do atual valor  $y(t_n)$  e tem-se uma tabela de diferenças para trás da forma

$$D = [\nabla P(t_n), \nabla^2 P(t_n), \dots, \nabla^k P(t_n)].$$

Mudando para um novo tamanho de passo  $h^* \neq h$ , calcula-se  $P(t)$  em  $t^* = t_n - jh^*$  para  $j = 0, 1, \dots, k$  e então forma-se

$$D^* = [\nabla^* P(t_n), \nabla^{*2} P(t_n), \dots, \nabla^{*k} P(t_n)].$$

Equacionando as duas representações de  $P(t)$  chegamos à seguinte identidade

$$\sum_{j=1}^k \nabla^{*j} P(t_n) \frac{1}{j!h^{*j}} \prod_{m=0}^{j-1} (t - t_{n-m}^*) = \sum_{j=1}^k \nabla^j P(t_n) \frac{1}{j!h^j} \prod_{m=0}^{j-1} (t - t_{n-m}).$$

Calculando essa identidade em  $t = t_{n-r}^*$  para  $r = 1, \dots, k$ , chegamos ao seguinte sistema de equações

$$\sum_{j=1}^k \nabla^{*j} P(t_n) U_{jr} = \sum_{j=1}^k \nabla^j P(t_n) R_{jr}$$

o qual é em termos matriciais  $D^*U = DR$ . As entradas da matriz  $U$  de tamanho  $k \times k$  são

$$U_{jr} = \frac{1}{j!h^{*j}} \prod_{m=0}^{j-1} (t_{n-r}^* - t_{n-m}^*) = \frac{1}{j!} \prod_{m=0}^{j-1} (m - r).$$

A matriz  $U$  satisfaz a identidade  $U^2 = I$ . Isso implica que  $D^* = D(RU)$ , sendo esse o esquema usado para a mudança no tamanho do passo. As entradas de  $U$  são inteiros que não dependem de  $h$  nem de  $k$ . Em termos de  $\rho = h^*/h \neq 1$ , as entradas de matriz  $R$  de tamanho  $k \times k$  são

$$R_{jr} = \frac{1}{j!} \prod_{m=0}^{j-1} (m - r\rho).$$

A matriz  $R$  deve ser formada cada vez que o tamanho do passo é alterado. Isso é feito de maneira simples usando a função *cumprod* do MATLAB. Da mesma forma que a alteração da representação, por meio de multiplicação de matrizes, que é feita em uma única linha. Em MATLAB, essa forma de mudança no tamanho do passo é feita eficientemente.

## A.2 O Programa ODE15s

O programa ODE15s é a implementação dos NDF's com tamanho de passos quase constantes em termos de diferenças para trás. Há opções que nos permitem integrar com os BDF's com uma ordem máxima menor do que a padrão que é 5. A identidade

$$\sum_{m=1}^k \frac{1}{m} \nabla^m y_{n+1} = \gamma_k (y_{n+1} - y_{n+1}^{(0)}) + \sum_{m=1}^k \gamma_m \nabla^m y_n$$

mostra que a identidade (A.4) é equivalente a

$$(1 - \kappa) \gamma_k (y_{n+1} - y_{n+1}^{(0)}) + \sum_{m=1}^k \gamma_m \nabla^m y_n - hF(t_{n+1}, y_{n+1}) = 0.$$

Na simplificada iteração de Newton, a correção da atual iteração

$$y_{n+1}^{(i+1)} = y_{n+1}^{(i)} + \Delta^{(i)}$$

é obtida resolvendo

$$\left( I - \frac{h}{(1 - \kappa) \gamma_k} J \right) \Delta^{(i)} = \frac{h}{(1 - \kappa) \gamma_k} F(t_{n+1}, y_{n+1}^{(i)}) - \Psi - (y_{n+1}^{(i)} - y_{n+1}^{(0)}).$$

Aqui  $J$  é uma aproximação para o Jacobiano de  $F(t, y)$  e

$$\Psi = \frac{1}{(1 - \kappa) \gamma_k} \sum_{m=1}^k \gamma_m \nabla^m y_n$$

é uma quantidade que é fixa durante o cálculo de  $y_{n+1}$ . É melhor obter a quantidade  $\nabla^{k+1} y_{n+1}$  como o limite de

$$d^{(i)} = y_{n+1}^{(i)} - y_{n+1}^{(0)}$$

calculado das equações

$$\begin{aligned}d^{(i+1)} &= d^{(i)} + \Delta^{(i)} \\y_{n+1}^{(i+1)} &= y_{n+1}^{(0)} + d^{(i+1)}.\end{aligned}$$

Muitas das táticas adotadas para a formulação do método foram encontradas nos códigos DIFSUB [13], DDRIV2 [14], LSODE [15] e VODE [16]. Em particular, extrapolação local não é feita. A seleção do tamanho do passo inicial seguiu a ideia de Curtis [17] que observa que formando derivadas parciais de  $F(t, y)$  em  $t_0$ , é possível estimar o ótimo tamanho de passo inicial. Em MATLAB, é natural guardar uma cópia da matriz Jacobiana. Dos códigos citados, somente o VODE explora essa possibilidade. Também é natural monitorar a matriz de iteração a cada mudança na ordem ou no tamanho do passo. A taxa de convergência é monitorada e a iteração é terminada se pré-ditado que a convergência não foi atingida em quatro iterações. Isso deve ocorrer, mas, caso não um novo Jacobiano é formado. Caso contrário, o tamanho do passo é reduzido.

Esse esquema de reutilizar Jacobianos significa que quando o Jacobiano é constante, ODE15s irá formar um Jacobiano em toda a integração. Além disso, o código irá gerar muito poucos Jacobianos quando aplicado a problemas que não são stiff. ODE15s compete muito bem com códigos para problemas não-stiff devido a isso e à eficiente álgebra linear do MATLAB. O objetivo desse apêndice foi o de mostrar quais as ferramentas numéricas que o ODE15S utiliza para computar seus cálculos, tendo em vista que esse método é adequado para problemas *stiff*.

## Apêndice B    DEMONSTRAÇÃO DO LEMA

(3.1)

**Lema B.1.** *O conjunto  $\{J_0(\gamma_1 r), J_0(\gamma_2 r), \dots, J_0(\gamma_n r), \dots\}$  é um conjunto ortogonal com respeito à função  $z(r) = r$  em  $[0, R]$ , e*

$$\|J_0(\gamma_n r)\| = \sqrt{\int_0^R r J_0^2(\gamma_n r) dr} = \frac{R}{\sqrt{2}} J_1(\alpha_n), \quad (\text{B.1})$$

com  $\gamma_n = \frac{\alpha_n}{R}$  e  $\alpha_n > 0$  satisfazendo  $J_0(\alpha_n) = 0$ .

**Demonstração:** Supõe  $u = J_0(\gamma_n r)$  e  $w = J_0(\gamma_m r)$ , com  $n \neq m$  e  $\gamma_n, \gamma_m$  constantes. Iremos admitir que  $u$  e  $w$  satisfazem as equações:

$$ru'' + u' + (\gamma_n)^2 ru = 0 \quad (\text{B.2})$$

$$rw'' + w' + (\gamma_m)^2 rw = 0 \quad (\text{B.3})$$

Multiplicando (B.2) por  $w$ , (B.3) por  $u$ , e subtraindo-as, temos

$$\begin{aligned} r(u''w - uw'') + (u'w - uw') &= (\gamma_m^2 - \gamma_n^2)ruw \\ \frac{d}{dr} [r(u'w - uw')] &= (\gamma_m^2 - \gamma_n^2)ruw \end{aligned}$$

integrando a equação acima obtemos

$$(\gamma_m^2 - \gamma_n^2) \int ruw dr = r(u'w - uw') \quad (\text{B.4})$$

assim

$$\int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) dr = \frac{r}{\gamma_m^2 - \gamma_n^2} [\gamma_n J_0'(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) - \gamma_m J_0'(\gamma_m r) J_0(\gamma_n r)]. \quad (\text{B.5})$$

Ajustando os limites de integração em (B.5), podemos concluir que o conjunto em questão é ortogonal, isto é:

$$\int_0^R r J_0(\gamma_n r) J_0(\gamma_m r) dr = \frac{R}{\gamma_m^2 - \gamma_n^2} [\gamma_n J_0'(\gamma_n R) J_0(\gamma_m R) - \gamma_m J_0'(\gamma_m R) J_0(\gamma_n R)] = 0.$$

Agora se  $m = n$ , multiplicamos (B.2) por  $2ru'$ :

$$\begin{aligned} 2ru' \frac{d}{dr} [ru'] + 2\gamma_n^2 r^2 uu' &= 0 \\ \frac{d}{dr} [r^2(u')^2 + \gamma_n^2 r^2 u^2] - 2\gamma_n^2 r u^2 &= 0. \end{aligned}$$

Integrando a equação acima temos:

$$\begin{aligned} r^2(u')^2 + \gamma_n^2 r^2 u^2 &= 2\gamma_n^2 \int r u^2 dr \\ 2\gamma_n^2 \int r J_0^2(\gamma_n r) dr &= \gamma_n^2 r^2 J_0^2(\gamma_n) + r^2 \gamma_n^2 (J_0'(\gamma_n r))^2 \\ \int r J_0^2(\gamma_n r) dr &= \frac{r^2}{2} [J_0^2(\gamma_n r) + J_1^2(\gamma_n r)], \end{aligned} \quad (\text{B.6})$$

e pelo teorema fundamental do cálculo

$$\begin{aligned} \|J_0(\gamma_n r)\|^2 &= \int_0^R r J_0^2(\gamma_n r) dr = \left[ \frac{r^2}{2} [J_0^2(\gamma_n r) + J_1^2(\gamma_n r)] \right]_0^R \\ &= \frac{R^2}{2} [J_0^2(\alpha_n) + J_1^2(\alpha_n)] - 0 \\ &= \frac{R^2}{2} J_1^2(\alpha_n). \end{aligned}$$

Com isso, podemos dizer que o conjunto

$$\left\{ \frac{\sqrt{2}}{R J_1(\alpha_1)} J_0(\gamma_1 r), \frac{\sqrt{2}}{R J_1(\alpha_2)} J_0(\gamma_2 r), \dots, \frac{\sqrt{2}}{R J_1(\alpha_n)} J_0(\gamma_n r), \dots \right\} \quad (\text{B.7})$$

consiste de um conjunto ortogonal de funções em  $r \in [0, R]$ .