

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

REPRESENTAÇÃO ANALÍTICA DA SOLUÇÃO DO PROBLEMA DE CINÉTICA
DE DIFUSÃO DE NÊUTRONS EM GEOMETRIA CARTESIANA
UNIDIMENSIONAL LIVRE DE RIGIDEZ

por

Fernanda Tumelero

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, Julho de 2019

REPRESENTAÇÃO ANALÍTICA DA SOLUÇÃO DO PROBLEMA DE CINÉTICA
DE DIFUSÃO DE NÊUTRONS EM GEOMETRIA CARTESIANA
UNIDIMENSIONAL LIVRE DE RIGIDEZ

por

Fernanda Tumelero
Mestre em Modelagem Matemática

Tese submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Marco Tullio Menna Barreto de Vilhena
Coorientador: Prof. Dr. Celso Marcelo Franklin Lapa

Aprovada por:

Profa. Dra. Cynthia Feijó Segatto PROMEC / UFRGS

Prof. Dr. Rubem Mário Figueiró Vargas PUCRS

Prof. Dr. Antonio Carlos Marques Alvim COPPE / UFRJ

Prof. Dr. Fernando Marcelo Pereira
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 15 de Julho de 2019

"Pessoas quietas têm as mentes mais barulhentas."

Stephen Hawking

(1942 - 2018)

AGRADECIMENTOS

Agradeço:

Primeiramente a Deus;

Aos meus pais Vitorino e Mercedes, irmãos Alexandre e Bruno, pelo incentivo e amor que me deram em toda minha vida;

Ao meu companheiro Guilherme por toda compreensão e apoio para realização deste trabalho;

Aos professores Marco T. M. B. Vilhena, Bardo E. J. Bodmann e Celso M. F. Lapa pela orientação, confiança e amizade;

À banca, por ter contribuído e colaborado na conclusão desta tese;

À Comissão Nacional de Energia Nuclear (CNEN) pelo suporte financeiro para a elaboração deste trabalho;

Ao PROMEC / UFRGS pela oportunidade;

Aos meus amigos, colegas e a todos que de alguma forma contribuíram para a realização deste trabalho.

RESUMO

Neste trabalho, resolve-se a Equação de Cinética Espacial da teoria de Difusão de Nêutrons em geometria cartesiana unidimensional, domínio homogêneo e heterogêneo, com dois grupos de energia e seis grupos de precursores de nêutrons atrasados. A metodologia proposta consiste em expandir os fluxos escalares de nêutrons (rápido e térmico) e as concentrações de precursores de nêutrons atrasados em séries de Taylor para a variável espacial, trazendo a dependência temporal para os coeficientes dessas séries. Truncando as séries de Taylor na ordem quadrática, obtém-se um conjunto de sistemas recursivos de equações diferenciais ordinárias, onde aplica-se o Método da Decomposição modificado, dividindo a matriz dos coeficientes em duas, uma diagonal constante e outra, inserida no termo fonte, com os termos restantes e a dependência temporal. Através desse procedimento, elimina-se o caráter *stiff* das equações e dispensa-se a utilização da continuação analítica, ou seja, a solução é calculada para qualquer instante de tempo sem a necessidade de determinar os instantes anteriores. O trabalho tem por objetivo obter uma solução com representação analítica livre de rigidez, com controle de erro, análise de estabilidade e convergência. O estudo da convergência e cálculo dos resíduos são realizados utilizando a própria equação diferencial como estimativa. São apresentados gráficos e tabelas para ilustração e comparação dos resultados obtidos com os presentes na literatura.

Palavras-chave: Cinética Espacial; Equação de Difusão de Nêutrons; Séries de Taylor; Método da Decomposição de Adomian modificado; Representação analítica.

ABSTRACT

In this work we solve the Space Kinetic Equations of the Neutron Diffusion theory in one-dimensional cartesian geometry, homogeneous and heterogeneous domain, for two energy groups and six groups of delayed neutron precursors. The proposed methodology consists in expanding the scalar neutron fluxes (fast and thermal) and the concentrations of delayed neutron precursors in a Taylor series in the spatial variable, assigning the time dependence to the coefficients of these series. By truncating the Taylor series in quadratic order, one obtains a set of recursive systems of ordinary differential equations, where a modified Decomposition method is applied, splitting the coefficient matrix into two, one constant diagonal matrix and another, inserted in the source term, with the remaining terms and the time dependence. Through this procedure, the stiff character of the equations is eliminated and the analytical continuation is dispensed, that is, the solution is calculated for any instant of time without the necessity to determine the previous ones. This work aims to obtain a solution with analytical representation free of stiffness with error control, stability and convergence analysis. The study of convergence and residues calculation are performed using the differential equation itself as an estimate. Graphs and tables are presented for illustration and comparison of obtained results with those found in the literature.

Keywords: Spatial Kinetics; Neutron Diffusion Equation; Taylor series; Modified Adomian Decomposition Method; Analytical representation.

SOMMARIO

In questo studio, si risolve l'Equazione della Cinetica Spaziale della teoria della Diffusione dei Neutroni in geometria cartesiana unidimensionale, dominio omogeneo ed eterogeneo, con due gruppi di energia e sei gruppi di precursori di neutroni ritardati. La metodologia proposta consiste nell'espandere i flussi scalari di neutroni (veloce e termico) e le concentrazioni dei precursori di neutroni ritardati in serie di Taylor per la variabile spaziale, portando la dipendenza temporale per i coefficienti di queste serie. Troncando la serie di Taylor nell'ordine quadratico, si ottiene un set di sistemi ricorsivi di equazioni differenziali ordinarie, dove viene applicato il Metodo della Decomposizione modificato, dividendo la matrice dei coefficienti in due, una diagonale costante e un'altra, inserita nel termine fonte, con i termini rimanenti e la dipendenza temporale. Attraverso questa procedura, si elimina il carattere *stiff* delle equazioni e non si usa la continuazione analitica, cioè, la soluzione viene calcolata per ogni istante di tempo senza la necessità di determinare gli istanti precedenti. L'obiettivo di questo lavoro è quello di ottenere una soluzione con rappresentazione analitica libera di rigidità, con controllo di errore, analisi di stabilità e convergenza. Lo studio della convergenza e calcolo dei rifiuti vengono eseguiti utilizzando l'equazione differenziale stessa come una stima. Grafici e tabelle sono presentati per illustrazione e confronto dei risultati ottenuti con i trovati in letteratura.

Keywords: Cinetica Spaziale; Equazione della Diffusione dei Neutroni; Serie di Taylor; Metodo della Decomposizione di Adomian modificata; Rappresentazione analitica.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
2	EQUAÇÃO DE DIFUSÃO DE NÊUTRONS	10
2.1	Equação de Difusão de Nêutrons com energia na forma contínua	10
2.2	Discretização da energia: Equações de Difusão de Nêutrons Multigrupos	20
2.2.1	Equações de Difusão de Nêutrons Multigrupos na criticalidade	24
2.3	Equação de Difusão de Nêutrons Monoenergéticos	26
2.3.1	Equação de Difusão de Nêutrons Monoenergéticos na criticalidade	27
2.4	Equações de Difusão de Nêutrons com dois grupos de energia	32
2.4.1	Equações de Difusão de Nêutrons com dois grupos de energia na criticalidade	35
2.5	Cinética Espacial de Difusão de Nêutrons	37
2.6	Condições de contorno clássicas de Difusão de Nêutrons	41
3	SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DE CINÉTICA ESPACIAL DE NÊUTRONS UNIDIMENSIONAIS EM UM DOMÍ- NIO HOMOGÊNEO	43
3.1	Aplicação da Metodologia	43
3.1.1	Estimativa do erro e análise de convergência e estabilidade	58
3.2	Resultados Numéricos para o Problema 1	60
3.3	Resultados Numéricos para o Problema 2	73
4	SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DE CINÉTICA ESPACIAL DE NÊUTRONS UNIDIMENSIONAIS EM UM DOMÍ- NIO HETEROGÊNEO	84
4.1	Apresentação do problema	84
4.2	Cuidados computacionais	87
4.3	Abordagens para aplicação das condições de contorno e interface e artifícios aplicados para obtenção da solução	89

4.3.1	Multiplicadores de Lagrange	91
4.3.2	Método de Wiener-Hopf	96
4.3.3	Sistema linear com as condições de contorno e interface	104
4.4	Análise de sensibilidade de convergência da metodologia: Perturbação dos parâmetros nucleares	110
4.5	Considerações sobre os testes	118
5	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS	119
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	122
	APÊNDICE A Técnicas aplicadas para induzir a convergência da solução	129

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1	Espectro de fissão do U-235.	16
Figura 2.2	Seções de choque de fissão e captura do U-235 e U-238 em função da energia. [Adaptado de Garland, 2014]	17
Figura 2.3	Esquema do ciclo de nêutrons em um reator térmico.	18
Figura 2.4	Discretização do domínio energético e grupos de energias dos nêutrons.	21
Figura 2.5	Representação de um reator infinito do tipo placa plana.	31
Figura 2.6	Fluxo de nêutrons para $n=1, 2$ e 3	31
Figura 2.7	Divisão da energia dos nêutrons em dois grupos de energia para um reator térmico.	32
Figura 2.8	Comportamento do fluxo e do espectro de fissão para o modelo a dois grupos. [Adaptado de Garland, 2014]	33
Figura 3.1	Resumo da metodologia proposta.	44
Figura 3.2	Segmentação do domínio espacial.	45
Figura 3.3	Geometria do Problema 1.	61
Figura 3.4	Condições iniciais normalizadas para o fluxo rápido e térmico para o Problema 1.	61
Figura 3.5	Fluxo rápido para o Problema 1.	63
Figura 3.6	Fluxo térmico para o Problema 1.	63
Figura 3.7	Fluxo rápido para o Problema 1 em vários instantes de tempo. . .	64
Figura 3.8	Fluxo térmico para o Problema 1 em vários instantes de tempo. . .	64
Figura 3.9	Contribuição de cada recursão do Método da Decomposição modificado para os coeficientes da expansão em séries de Tay- lor dependentes do tempo do Problema 1.	67
Figura 3.10	Termos residuais dos fluxos rápido e térmico no instante $t = 5$ s para o Problema 1.	69
Figura 3.11	Termo residual do fluxo rápido para o Problema 1 em vários instantes de tempo.	70
Figura 3.12	Termo residual do fluxo térmico para o Problema 1 em vários instantes de tempo.	70

Figura 3.13	Termos residuais dos fluxos inserindo perturbações nos coeficientes constantes, lineares e quadráticos para o Problema 1, em $t = 5$ s e na posição $x = X/2$.	72
Figura 3.14	Condições iniciais normalizadas para o fluxo rápido e térmico para o Problema 2.	73
Figura 3.15	Fluxo rápido para o Problema 2.	74
Figura 3.16	Fluxo térmico para o Problema 2.	75
Figura 3.17	Fluxo rápido para o Problema 2 em vários instantes de tempo.	75
Figura 3.18	Fluxo térmico para o Problema 2 em vários instantes de tempo.	76
Figura 3.19	Contribuição de cada recursão do Método da Decomposição modificado para os coeficientes da expansão em séries de Taylor dependentes do tempo do Problema 2.	78
Figura 3.20	Termos residuais dos fluxos rápido e térmico no instante $t = 5$ s para o Problema 2.	79
Figura 3.21	Termo residual do fluxo rápido para o Problema 2 em vários instantes de tempo.	80
Figura 3.22	Termo residual do fluxo térmico para o Problema 2 em vários instantes de tempo.	81
Figura 3.23	Termos residuais dos fluxos inserindo perturbações nos coeficientes constantes, lineares e quadráticos para o Problema 2, $t = 5$ s e na posição $x = 4$ cm.	83
Figura 4.1	Interface entre os meios Ω_1 e Ω_2 .	84
Figura 4.2	Geometria do problema heterogêneo.	85
Figura 4.3	Condições iniciais normalizadas para o fluxo rápido e térmico para o problema heterogêneo.	86
Figura 4.4	Exponencial da matriz \mathbf{W}_0 na região 1 através do comando “expm” do SciLab.	87
Figura 4.5	Exponencial da matriz \mathbf{W}_0 na região 1 através do comando “expm” do SciLab utilizando escala e quadratura.	88
Figura 4.6	Ilustração dos domínios nas metades superior (+) e inferior (-) do plano complexo e a região de analiticidade entre eles.	97
Figura 4.7	Ponto de ramificação.	103

Figura 4.8	Função Exponencial Integral $Ei(x)$	104
Figura 4.9	Comportamento do fluxo rápido com a solução da Equação 4.48 para o instante $t = 4$ s e com $J = 100$ termos.	106
Figura 4.10	Contribuição de cada recursão do Método da Decomposição modificado para os coeficientes constante, linear e quadrático do fluxo rápido com a solução da Equação 4.48, para o instante $t = 4$ s e na posição $x = 1$ cm.	107
Figura 4.11	Contribuições das recursões do coeficiente constante do fluxo rápido, variando a seção de choque de remoção do grupo rápido.	113
Figura 4.12	Contribuições das recursões do coeficiente constante do fluxo rápido, variando a seção de choque de remoção do grupo térmico.	114
Figura 4.13	Contribuições das recursões do coeficiente constante do fluxo rápido, variando a seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo térmico.	115
Figura 4.14	Contribuições das recursões do coeficiente constante do fluxo rápido, variando o termo de fissão do grupo rápido.	116
Figura 4.15	Contribuições das recursões do coeficiente constante do fluxo rápido, variando o termo de fissão do grupo térmico.	117
Figura A.1	Comportamento do fluxo rápido com a configuração definida nas Equações A.1 e A.2 com $J = 100$ recursões, para $t = 4$ s.	130
Figura A.2	Contribuição dos coeficientes constante, linear e quadrático do fluxo rápido, respectivamente, com a configuração definida nas Equações A.1 e A.2, para $t = 4$ s e na posição $x = 1$ cm.	131
Figura A.3	Solução para o fluxo rápido com o relaxamento da matriz \mathbf{W}_0 , para $t = 4$ s com $J = 10$ recursões.	134
Figura A.4	Contribuição de 10 recursões para os coeficientes constante, linear e quadrático do fluxo rápido, respectivamente, com relaxamento da matriz \mathbf{W}_0 , para $t = 4$ s na posição $x = 1$ cm.	135
Figura A.5	Solução para o fluxo térmico com parcelamento da fonte, para o instante $t = 4$ s, com $J = 50$ termos e PF=1,2,4,6, e 10.	137
Figura A.6	Fronteiras L_4, L_3, L_2 e L_1 referentes à função Heaviside.	139

Figura A.7	Comportamento do fluxo rápido com a solução reduzida à um problema homogêneo, corrigido recursivamente para um heterogêneo, para o instante $t = 4$ s e com $J = 100$ e $J = 200$ termos.	140
Figura A.8	Contribuição de cada recursão do Método da Decomposição modificado para os coeficientes do fluxo rápido com a solução reduzida à um problema homogêneo, corrigido recursivamente para um heterogêneo, para o instante $t = 4$ s, com $J = 200$ termos e na posição $x = 1$ cm.	140
Figura A.9	Solução para o fluxo rápido utilizando aproximação cúbica para a série de Taylor com $J = 100$ recursões, para $t = 4$ s.	142
Figura A.10	Solução para os coeficientes constante, linear, quadrático e cúbico, respectivamente, do fluxo rápido utilizando aproximação cúbica para a série de Taylor, para $t = 4$ s e na posição $x = 1$ cm.	143
Figura A.11	Solução para o fluxo rápido com a configuração definida na Equação A.12 com $J = 100$ recursões, para $t = 4$ s.	145
Figura A.12	Contribuição dos coeficientes constante, linear e quadrático, respectivamente, para o fluxo rápido com a configuração definida na Equação A.12, para $t = 4$ s na posição $x = 1$ cm.	145
Figura A.13	Comportamento do fluxo térmico com a solução das Equações A.52 e A.55, para o instante $t = 4$ s e $J = 10$ recursões.	154
Figura A.14	Contribuição de 10 recursões para os coeficientes constante, linear e quadrático, respectivamente, do fluxo térmico com a solução das Equações A.52 e A.55, para o instante $t = 4$ s e na posição $x = 1$ cm.	154

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1	Parâmetros cinéticos para o U-235. [Fonte: Adaptada de Garland, 2014]	38
Tabela 3.1	Parâmetros nucleares para o Problema 1. [Fonte: Adaptada de Nagaya e Kobayashi, 1995]	62
Tabela 3.2	Parâmetros referentes aos nêutrons atrasados para o Problema 1. [Fonte: Adaptada de Nagaya e Kobayashi, 1995]	62
Tabela 3.3	Valores dos fluxos rápido e térmico no instante $t = 5$ s para o Problema 1.	65
Tabela 3.4	Valores para o fluxo rápido na posição $x = X/2$ e no instante $t = 1$ s, aumentando o número de termos do Método da Decomposição modificado para o Problema 1.	66
Tabela 3.5	Valores para o fluxo térmico na posição $x = X/2$ e no instante $t = 1$ s, aumentando o número de termos do Método da Decomposição modificado para o Problema 1.	66
Tabela 3.6	Termos residuais dos fluxos rápido e térmico no instante $t = 5$ s para o Problema 1.	69
Tabela 3.7	Parâmetros referentes aos nêutrons atrasados para o Problema 2.	74
Tabela 3.8	Valores dos fluxos rápido e térmico no instante $t = 5$ s para o Problema 2.	76
Tabela 3.9	Valores para o fluxo rápido aumentando o número de termos do Método da Decomposição modificado na posição $x = 4$ cm e no instante $t = 1$ s para o Problema 2.	77
Tabela 3.10	Valores para o fluxo térmico aumentando o número de termos do Método da Decomposição modificado na posição $x = 4$ cm e no instante $t = 1$ s para o Problema 2.	77
Tabela 3.11	Termos residuais dos fluxos rápido e térmico no instante $t = 5$ s para o Problema 2.	80
Tabela 4.1	Parâmetros nucleares para o problema heterogêneo.	85

Tabela A.1 Distribuição das J=4 recursões da Decomposição com parcelamento da fonte.	136
----------------------------------------------------------------------------------------------	-----

LISTA DE SIGLAS E ABREVIATURAS

ADSs	<i>Accelerator-driven systems</i>
ECEDN	Equações de Cinética Espacial de Difusão de Nêutrons
EDO	Equação Diferencial Ordinária
EFG	<i>Element-free Galerkin</i>
ENDF	<i>Evaluated Nuclear Data File</i>
GITT	<i>Generalized Integral Transform Technique</i>
GPs	<i>Gaussian Processes</i>
IQS	<i>Improved Quasi-Static Method</i>
LM	Levenberg-Marquardt
ML	Multiplicadores Lagrangeanos
MLS	<i>Moving Least Square</i>
PF	Parcelamento da Fonte
PROMEC	Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica
TF	Transformada de Fourier
TSM	<i>Temporal Subdomain Method</i>
UFRGS	Universidade Federal do Rio Grande do Sul
WH	Wiener-Hopf

LISTA DE SÍMBOLOS

Símbolos Latinos

a	Constante da equação para o espectro de fissão
A_1	Constante um advinda da separação de variáveis para a solução do fluxo de nêutrons
A_2	Constante dois advinda da separação de variáveis para a solução do fluxo de nêutrons
$A_n(t)$	Coefficiente de expansão da série de Taylor para o fluxo rápido
$A_{n,j}(t)$	Coefficiente de expansão da série de Taylor e método da Decomposição de Adomian modificado para o fluxo rápido
b	Constante da equação para o espectro de fissão
B_G	Buckling geométrico do reator, cm^{-2}
B_M	Buckling material do reator, cm^{-2}
$B_n(t)$	Coefficiente de expansão da série de Taylor para o fluxo térmico
$B_{n,j}(t)$	Coefficiente de expansão da série de Taylor e método da Decomposição de Adomian modificado para o fluxo térmico
$\mathbf{B}_{0,j}$	Vetor que contém os coeficientes da série de Taylor para o fluxo rápido e térmico
c_1	Constante arbitrária
c_2	Constante arbitrária
c_3	Constante arbitrária
c_4	Constante arbitrária
c_5	Constante arbitrária
c_6	Constante arbitrária
$C_i(\mathbf{r}, t)$	Concentração de precursores de nêutrons atrasados para o grupo i , cm^{-3}
$C_{i,n}(t)$	Coefficiente de expansão da série de Taylor para a concentração de precursores de nêutrons atrasados para o grupo i
$C_{i,n,j}(t)$	Coefficiente de expansão da série de Taylor e método da Decomposição de Adomian modificado para a concentração de precursores de nêutrons atrasados para o grupo i

$D(\mathbf{r}, E, t)$	Coeficiente de Difusão, cm
E	Energia dos nêutrons, MeV
E'	Energia dos nêutrons fora do intervalo de interesse, MeV
$E(s)$	Função analítica sobre os domínios complexos positivo e negativo do método de WH
f	Função a ser otimizada pelos ML
\mathcal{F}	Função não linear
$F(\mathbf{r}, E, t)$	Densidade da taxa de interação
$\mathbf{F}(s)$	Transformada de Fourier complexa na variável temporal
\mathbf{F}^-	Transformada de Fourier complexa na variável temporal no plano complexo negativo
\mathbf{F}^+	Transformada de Fourier complexa na variável temporal no plano complexo positivo
f_{aprox}	Solução aproximada da equação
f_{exata}	Solução exata da equação
$f_i(E)$	Probabilidade de um nêutron atrasado apresentar energia entre E e $E + dE$ como resultado do decaimento do i -ésimo emissor
$\mathbf{f}(t)$	Função da Transformada inversa de Fourier
$\mathbf{FW}_1(s)$	Transformada de Fourier complexa da matriz \mathbf{W}_1
g	Grupo de energia
G	Número total de grupos de energia
\mathbf{G}	Matriz diagonal dos coeficientes dos fluxos
$g_{n,sr}$	Restrição do problema
H	Constante da equação para o espectro de fissão
\mathbf{H}_0	Vetor com a atualização dos parâmetros heterogêneos
Ha_0	Atualização dos parâmetros heterogêneos para o fluxo rápido
Hb_0	Atualização dos parâmetros heterogêneos para o fluxo térmico
$Hc_{i,0}$	Atualização dos parâmetros heterogêneos para as concentrações de precursores
i	Grupo de precursor de nêutrons atrasados
\mathbf{I}	Matriz identidade
j	Termo da expansão do método da Decomposição modificado

J	Ordem de truncamento do método da Decomposição modificado
\mathbf{J}_{ac}	Matriz Jacobiana
\mathbf{J}_A	Densidade de corrente de nêutrons na região A, $cm^{-2}s^{-1}$
\mathbf{J}_B	Densidade de corrente de nêutrons na região B, $cm^{-2}s^{-1}$
$\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)$	Densidade de corrente de nêutrons, $cm^{-2}s^{-1}$
k	Fator de multiplicação de nêutrons
\mathbf{K}	Matriz de coeficientes dos elementos fora da diagonal dos fluxos
k_{eff}	Fator de multiplicação efetivo de nêutrons
k_∞	Fator de multiplicação infinito de nêutrons
$K(s)$	Kernel do problema do método de WH
l	Célula espacial, cm
L	Última célula espacial, cm
L_d	Comprimento de difusão de nêutrons, cm
L_1	Fronteira 1 do problema heterogêneo
L_2	Fronteira 2 do problema heterogêneo
L_3	Fronteira 3 do problema heterogêneo
L_4	Fronteira 4 do problema heterogêneo
\mathcal{L}	Função Lagrangeana
l_{ex}	Distância extrapolada, cm
m	Constante usada na escala e quadratura
$\mathbf{M}_{1,n}(t)$	Matriz genérica dos coeficientes das EDO's com os ML
$\mathbf{M}_{2,n}$	Matriz genérica dos coeficientes das EDOs com os ML
$\mathbf{N}_{1,n}(t)$	Matriz genérica dos coeficientes das EDO's com os ML
$\mathbf{N}_{2,n}$	Matriz genérica dos coeficientes das EDO's com os ML
n	Número de termos da série de Taylor
$n(\mathbf{r}, E, t)$	Densidade de nêutrons, cm^{-3}
\mathbf{O}	Matriz dos coeficientes das equações dos fluxos que atualiza as concentrações de precursores
$P(s)$	Função da Equação de WH
p_1	Coefficiente do polinômio do numerador do aproximante de Padé
\mathbf{P}_L	Numerador do aproximante de Padé
\mathbf{q}_m	Coefficiente do polinômio do denominador do aproximante de Padé

Q_M	Denominador do aproximante de Padé
$Q(t)$	Vetor fonte
$Q(\mathbf{r}, E, t)$	Fonte de nêutrons, $cm^{-3}s^{-1}$
$Q^{ext}(\mathbf{r}, E, t)$	Fonte externa de nêutrons, $cm^{-3}s^{-1}$
\mathbf{r}	Vetor posição espacial, cm
r	Região
R	Função resultante da aplicação do método de WH
R_1	Região 1
R_2	Região 2
R_3	Região 3
R_m	Região com os parâmetros médios ponderados
\mathbf{R}	Expansão em série de Taylor relacionada com os aproximantes de Padé
s	Variável transformada (de Fourier)
s_1	Variável transformada (de Fourier) no plano real
s_2	Variável transformada (de Fourier) no plano complexo
S	Área de superfície do volume V , cm^2
$S_{f1}(\mathbf{r}, t)$	Fonte de nêutrons rápidos provenientes da fissão, $cm^{-3}s^{-1}$
$S_{f2}(\mathbf{r}, t)$	Fonte de nêutrons térmicos provenientes da fissão, $cm^{-3}s^{-1}$
sr	Sub-região ou subdomínio
SR	Número total de sub-regiões para cada região
$\mathbf{S}(t)$	Vetor fonte da EDO quando $n = 0$
t	Variável temporal, s
T_{RE}	Termo residual do erro
T_{RP}	Termo residual da perturbação
$U^+(s)$	Função desconhecida da Equação de WH definida no plano complexo superior
$v(E)$	Velocidade do nêutron, cm/s
v_1	Velocidade do nêutron para o grupo rápido, cm/s
v_2	Velocidade do nêutron para o grupo térmico, cm/s
V	Volume arbitrário, cm^3
$\mathbf{V}_{0,j-1}$	Matriz com os elementos fora da diagonal dos coeficientes dos fluxos mais a atualização dos precursores

$V^-(s)$	Função desconhecida da Equação de WH definida no plano complexo inferior
\mathbf{W}_0	Matriz diagonal dos elementos constantes de $\mathbf{W}(t)$
$\mathbf{W}_{0\text{new}}$	Matriz \mathbf{W}_0 sem o termo de fissão do grupo rápido
$\mathbf{W}_{0\text{relax}}$	Matriz \mathbf{W}_0 com relaxamento
$\mathbf{W}_1(t)$	Matriz dos elementos fora da diagonal de $\mathbf{W}(t)$ mais os dependentes do tempo
$\mathbf{W}_{1\text{new}}$	Matriz \mathbf{W}_1 com o termo de fissão do grupo rápido
$\mathbf{W}_{1\text{relax}}$	Matriz \mathbf{W}_1 com relaxamento
$\mathbf{W}(t)$	Matriz dos coeficientes do sistema de EDO's
x_0	Centro do intervalo espacial, <i>cm</i>
X	Comprimento total da placa, <i>cm</i>
$\mathbf{X}(0)$	Condições iniciais do problema
$\mathbf{X}_n(t)$	Vetor solução dos coeficientes da série de Taylor na forma genérica
$\mathbf{X}_{n,j}(t)$	Vetor solução dos coeficientes da série de Taylor e método da Decomposição na forma genérica
$\mathbf{X}(t)$	Vetor solução genérico dos coeficientes da série de Taylor e método da Decomposição de Adomian modificado
$\mathbf{Y}(t)$	Vetor solução genérico das EDO's com os ML
$\hat{\mathbf{Y}}$	Estimativa inicial
$\hat{\mathbf{Y}}_r$	Solução melhorada iterativamente no método de Newton

Símbolos Gregos

β	Fração de nêutrons atrasados
β_i	Fração de nêutrons atrasados para o grupo i de precursores
γ	Multiplicador de Lagrange
Γ	Condição de interface
Γ_1	Caminho de integração
Γ_2	Caminho de integração
Δ	Vetor com uma pequena variação da estimativa inicial
Δx	Incremento no espaço, <i>cm</i>
ζ	Autovalor do modelo monoenergético na criticalidade
η	Domínio no plano complexo onde as funções de analiticidade

	sobrepoem-se
λ	Constante de decaimento, s^{-1}
λ_i	Constante de decaimento para o grupo i de precursores, s^{-1}
λ_{tr}	Livre caminho médio de transporte, cm
κ	Escala que relaciona os coeficientes linear e quadrático da série de Taylor
$\bar{\mu}$	Cosseno do ângulo médio de espalhamento
ν	Número médio de nêutrons produzidos na fissão
$\Sigma(\mathbf{r}, E, t)$	Seção de choque macroscópica, cm^{-1}
Σ_a	Seção de choque macroscópica de absorção, cm^{-1}
Σ_{a2}	Seção de choque macroscópica de absorção do grupo térmico, cm^{-1}
$\Sigma_{a2,0}$	Parte constante da seção de choque macroscópica de absorção do grupo térmico, cm^{-1}
$\Sigma_{a2,1}(t)$	Parte dependente do tempo da seção de choque macroscópica de absorção do grupo térmico, cm^{-1}
$\Sigma_f(\mathbf{r}, E', t)$	Seção de choque macroscópica de fissão, cm^{-1}
Σ_{f1}	Seção de choque macroscópica de fissão para o grupo rápido, cm^{-1}
Σ_{f2}	Seção de choque macroscópica de fissão para o grupo térmico, cm^{-1}
$\Sigma_r(\mathbf{r})$	Seção de choque macroscópica de remoção, cm^{-1}
$\Sigma_{r1}(\mathbf{r})$	Seção de choque macroscópica de remoção do grupo rápido, cm^{-1}
$\Sigma_{r2}(\mathbf{r})$	Seção de choque macroscópica de remoção do grupo térmico, cm^{-1}
$\Sigma_s(\mathbf{r}, E, t)$	Seção de choque macroscópica de espalhamento, cm^{-1}
$\Sigma_{s2}(\mathbf{r})$	Seção de choque macroscópica de espalhamento para o grupo térmico, cm^{-1}
$\Sigma_{s12}(\mathbf{r})$	Seção de choque macroscópica de espalhamento do grupo rápido para o grupo térmico, cm^{-1}
$\Sigma_{s21}(\mathbf{r})$	Seção de choque macroscópica de espalhamento do grupo térmico para o grupo rápido, cm^{-1}
$\Sigma_{s22}(\mathbf{r})$	Seção de choque macroscópica de espalhamento do grupo térmico para o mesmo grupo, cm^{-1}
$\Sigma_T(\mathbf{r}, E, t)$	Seção de choque macroscópica total, cm^{-1}
$\Sigma_{T2}(\mathbf{r})$	Seção de choque macroscópica total do grupo térmico, cm^{-1}
$\Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E, t)$	Seção de choque macroscópica de transporte, cm^{-1}

Φ_A	Fluxo de nêutrons na região A, $cm^{-2}s^{-1}$
Φ_B	Fluxo de nêutrons na região B, $cm^{-2}s^{-1}$
$\phi(\mathbf{r})$	Fluxo de nêutrons independente dos grupos de energia, $cm^{-2}s^{-1}$
$\Phi(\mathbf{r}, E, t)$	Fluxo escalar de nêutrons, $cm^{-2}s^{-1}$
Φ_1	Fluxo escalar de nêutrons do grupo rápido, $cm^{-2}s^{-1}$
Φ_2	Fluxo escalar de nêutrons do grupo térmico, $cm^{-2}s^{-1}$
$\chi(E)$	Espectro de fissão
χ_1	Espectro de fissão para o grupo rápido
χ_2	Espectro de fissão para o grupo térmico
Ψ	Conjunto de ML para cada equação e região da placa
Ω	Equação diferencial parcial
Ω_1	Meio (região com determinado tipo de material) um
Ω_2	Meio (região com determinado tipo de material) dois
τ	Variável auxiliar de integração no tempo, s
Υ	Função a ser minimizada
ξ	Parâmetro para acelerar a convergência do método de Newton

1 INTRODUÇÃO

A população mundial começou uma transformação socioeconômica vigorosa após a industrialização pós-guerra, proporcionando melhores condições de vida e saúde. Diante desta contínua transformação, a energia garante o funcionamento e desenvolvimento das cidades, novas tecnologias, comércio, indústria, comunicação, saúde, serviços públicos, produção de alimentos, transportes e assim por diante, bem como da própria população. Inevitavelmente, para que todos os setores que compõem uma sociedade moderna prosperem, foi preciso e ainda é um desafio, promover e dispor de energia elétrica.

Com essa demanda global crescente e contínua por energia, existem vários fatores a serem satisfeitos: produção de forma confiável e segura, preço adequado, preservação do meio ambiente e preocupações com a mudança climática. A energia nuclear é uma alternativa apropriada para solucionar os aspectos levantados. Segura, econômica e com praticamente insignificantes impactos ambientais, a sua utilização pode diversificar e reforçar as matrizes energéticas mundiais e do Brasil.

Como mencionado, uma das questões imprescindíveis para operação de uma usina nuclear é garantir a segurança para a produção de eletricidade e de forma econômica, ou seja, usufruindo de sua eficiência com confiabilidade. Além disso, o projeto de construção de um reator nuclear deve analisar a geometria, composição do sistema e termo-hidráulica. Para tanto, é necessário estudar todos os processos e simular previamente seu comportamento de forma suficientemente precisa através de modelos matemáticos que descrevam todas as variáveis relevantes. Um dos principais focos é analisar o comportamento da população de nêutrons perante criticalidade e variações no reator, pois acidentes podem ocorrer quando existir uma discrepância entre a produção e as perdas de nêutrons. Cabe ressaltar que usinas nucleares são constituídas por vários sistemas de segurança que garantem que um possível superaquecimento seja evitado e solucionado, como por exemplo, a torre de refrigeração, estrutura de contenção, etc. O modelo físico-matemático que governa o comportamento previamente citado é conhecido como a Equação de Transporte de Nêutrons. Quando dependente do tempo e considerando os nêutrons atrasados, determina de forma completa a população de nêutrons [Duderstadt e Hamilton, 1976]. Porém, o fato de possuir sete variáveis (três espaciais, duas angulares, uma energética e outra temporal) a torna uma equação de difícil solução, tanto numericamente como analiticamente. Im-

pondo hipóteses físicas apropriadas, pode-se simplificar essa equação obtendo-se modelos mais simples.

Uma das aproximações comumente utilizada é tratar a Equação de Transporte como um processo difusivo, conhecida como Equação de Difusão de Nêutrons [Lamarsh, 1966]. Essa teoria é largamente utilizada no estudo de criticalidade de reatores (problema de autovalor), cuja solução determina o fator de multiplicação efetivo e a distribuição da potência no núcleo do reator nuclear, imprescindível para obter a taxa na qual as várias reações existentes ocorrem. Ela consiste em uma equação de derivadas parciais que descreve o balanço entre a produção e perdas, determinando a variação da população de nêutrons. As Equações de Difusão de Nêutrons, objeto de estudo deste trabalho, são geralmente utilizadas nos códigos de usinas nucleares brasileiras e internacionais [Soares, 2014]. Esses códigos devem incluir cálculos para licenciamento, análises requeridas para suporte, avaliação de acidentes, entre outros. Devido a este fato, muitas vezes é preferível analisar o comportamento dos nêutrons através da Teoria de Difusão, que apresenta um formalismo mais apropriado e simples para situações reais. Além disso, a maioria dos estudos tratam o movimento dos nêutrons como um processo difusivo, onde admite-se que os nêutrons tendem a se difundir de regiões de alta densidade para regiões de baixa densidade [Lamarsh, 1966].

A Equação de Difusão de Nêutrons, para muitos ou poucos grupos de energia, utiliza seções de choque previamente calculadas e é adequada quando ocorrem mudanças espaciais e temporais na distribuição de nêutrons. A dependência temporal ocorre quando acontecer alguma mudança no regime de funcionamento do reator, que acarreta um desvio na condição de equilíbrio (perdas e ganhos), alterando a sua potência. Esse comportamento é descrito pelas Equações de Cinética na Teoria de Difusão, que se dividem em Equação de Cinética Pontual e Espacial. Considerando os nêutrons atrasados nesses modelos implica trabalhar com a característica chamada rigidez (ou *stiffness* em inglês), pois esses são gerados através do decaimento dos produtos de fissão com grandezas temporais na ordem de 10^{-1} segundos a minutos (reatores térmicos), enquanto que os nêutrons prontos, gerados imediatamente após a fissão, possuem escalas temporais na ordem de 10^{-4} a 10^{-5} segundos. Os nêutrons atrasados devem ser contabilizados mesmo representando menos de 1% da população de nêutrons no reator, pois garantem a segurança de sua operação através do controle de reações em cadeia, na medida em que atrasam a

resposta do reator. Essa particularidade exige empregar incrementos na variável temporal bastante pequenos, gerando um aumento no tempo computacional do algoritmo numérico para se obter uma solução que primeiramente convirja e, segundo, que seja suficientemente precisa. Diante disso, as soluções analíticas, semi-analíticas ou com representação analítica, destacam-se por eliminar, ou pelo menos minimizar, a característica de rigidez do problema.

As Equações de Cinética Pontual são modelos mais simples, que consideram apenas a amplitude do fluxo variando com o tempo, assumindo total separabilidade do espaço e tempo, com a função forma espacial do fluxo conhecida [Petersen, 2011; Keepin, 1965]. Esses modelos são empregados na física de reatores para uma previsão em tempo real de situações dinâmicas do funcionamento de um reator. Seus parâmetros cinéticos demonstram, de forma sucinta e clara, características relevantes da operação de um reator nuclear como, por exemplo, a fissão. Através de abordagens analíticas, numéricas e híbridas, essas equações têm abundantes métodos de solução [Aboanber e Nahla, 2002a,b; Nahla, 2008, 2011; Nahla e Zayed, 2010; Petersen et al., 2011b; Ganapol, 2013; Da Silva, 2013; Tumelero et al., 2016].

As Equações de Cinética Espacial de Difusão podem ser consideradas modelos mais apropriados para previsão do comportamento da população de nêutrons [Yasinsky e Henry, 1965]. Conforme objetivos de estudo, empregam-se um, dois ou muitos grupos de energia nas equações, que também podem ser uni, bi ou tridimensionais. Dentre as pesquisas numéricas, analíticas e híbridas sobre as Equações de Cinética Espacial de Difusão de Nêutrons, destacam-se os trabalhos abaixo apresentados, juntamente com uma breve descrição, já que essas equações serão objeto de pesquisa nesta tese e o acima apresentado demonstra a importância de seu estudo.

Iniciando a revisão por literaturas mais antigas, Kaplan, 1962 aplicou um princípio variacional para construir soluções aproximadas para o modelo de Difusão tridimensional, usando soluções dos modelos uni e bidimensionais.

Yasinsky e Henry, 1965 realizaram comparações numéricas entre soluções exatas e aproximadas para a Equação de Difusão Espacial dependente do tempo, para dois grupos de energia. Geraram resultados utilizando as Equações de Cinética Pontual, aproximação adiabática, método de síntese espaço-tempo e também analisaram dois métodos nodais.

Ott e Madell, 1966; Ott e Meneley, 1969 abordaram a dinâmica espacial utilizando

uma abordagem quase-estática, com uma sequência de métodos que fatorizam o fluxo em uma função forma e amplitude.

Shober et al., 1977 desenvolveram dois métodos para as Equações de Difusão transiente, composta por grandes regiões nodais homogêneas; o primeiro método consiste em acoplar as constantes nodais em um esquema analítico e no segundo através de uma expansão polinomial do fluxo.

No trabalho de Lawrence e Dorning, 1980, apresentou-se um método nodal para a equação na forma multidimensional baseado na forma linear da equação de balanço nodal, escrita em termos da média das correntes parciais que atravessam as superfícies do nó; utilizam-se as funções de Green para gerar um conjunto acoplado de equações integrais unidimensionais, que representam uma solução local exata encontrada por um procedimento residual ponderado dentro de cada nó, juntamente com a forma linear da equação nodal de balanço.

Utku e Christenson, 1994 apresentaram o método de subdomínio temporal (TSM) para a solução da Equação de Difusão multigrupo dependente do espaço e tempo. A parte espacial foi formulada como um conjunto de elementos finitos, usando um sistema de duas dimensões retangulares, subdividida em elementos triangulares contíguos. Também utilizando formulações de elementos finitos, Jagannathan, 1985 realiza a integração numérica, reduzindo o acoplamento dos nós desconhecidos, para resolver a Equação de Difusão multidimensional dependente do tempo.

Koclas, 1998 realizou uma revisão da derivação do Método Nodal Analítico e aplicou para diferentes aproximações, com o objetivo de obter uma aproximação de diferenças finitas com malha centrada.

Dahmani et al., 2001 melhoram o método quase estático (IQS) e utilizam um esquema semi-implícito para resolver as equações dos precursores.

Barros et al., 2003 descrevem avanços nos métodos nodais aplicados a ordenadas discretas (S_N) e problemas de Difusão em geometria cartesiana para sistemas multiplicativos de nêutrons. Além disso, mostram a aplicação dos métodos nodais espectrais na difusão dependentes do tempo em cálculos de cinética de reatores.

Lemos et al., 2002, 2003; Lemos, 2005 resolveram de forma analítica o problema de autovalor para o fluxo de nêutrons, aplicando Transformada de Laplace no conjunto de Equações de Difusão em uma placa plana em um meio heterogêneo, considerando um

modelo de multigrupo de energia, com a inversão realizada pela Transformada Inversa de Laplace (utilizando a técnica da expansão de Heaviside). Além disso, resolveram de forma analítica o problema de fonte fixa e, aplicando um esquema iterativo, o problema de função auxiliar para uma placa plana heterogênea, considerando um modelo de duas regiões e dois grupos de energia.

Dentre os trabalhos que empregam o método de Runge-Kutta, um dos mais recentes foi elaborado por Aboanber e Hamada, 2007 com o objetivo de desenvolver um método numérico computacionalmente eficiente. Nele, utiliza-se o método de quarta ordem com uma solução de terceira ordem incorporada para o cálculo da estimativa do erro de truncamento e controle do passo de tempo.

Corno et al., 2008 desenvolveram um método analítico para a solução da Equação Cinética Espacial de Difusão para sistemas não homogêneos através da Transformada de Laplace, utilizando recursos matemáticos para os autovalores e ortogonalidade das autofunções.

Vilhena et al., 2008 apresentaram soluções analíticas para o problema de autovvalor do fluxo de nêutrons em um retângulo com geometria de duas dimensões, com um procedimento de dois passos por Transformadas Integrais (Transformada de Laplace e método GITT). Em Ceolin, 2010 obtém-se uma solução analítica para o problema unidimensional em geometria cartesiana, monoenergético e com multigrupos, aplicando uma expansão espectral e solucionando o problema matricial resultante por Transformada de Laplace. Ainda no mesmo contexto, Ceolin et al., 2011 apresentam uma solução analítica para a Equação Cinética de Difusão de Nêutrons multirregião utilizando o método GITT (*Generalized Integral Transform Technique*) e o Método da Decomposição de Adomian modificado, reduzindo o problema heterogêneo a um conjunto de problemas recursivos com parâmetros constantes. Petersen et al., 2011a também aborda soluções analíticas para o modelo de Cinética Espacial em um paralelepípedo homogêneo, considerando dois grupos de energia e seis de precursores de nêutrons atrasados, através da aplicação do método GITT na direção vertical e o Método da Decomposição de Adomian modificado, onde os termos com dependência do tempo são inseridos na fonte e corrigidos recursivamente.

Nahla et al., 2012 utilizam o método de diferenças finitas para reduzir as Equações de Difusão de Nêutrons dependentes do espaço e tempo, com multigrupos e precursores de nêutrons atrasados, em equações diferenciais ordinárias, na qual aplicam técnicas

numéricas para as funções exponenciais da matriz dos coeficientes.

Picca e Furfaro, 2012 aplicaram os Processos Gaussianos (GPs), que consistem em um novo problema reverso para Cinética Espacial e Pontual de Nêutrons, aplicados a sistemas ADSs (*Accelerator-driven systems*).

Rokrok et al., 2012 realizam um tratamento numérico com técnicas de discretização EFG (*Element-free Galerkin*) em geometria X-Y. Utiliza-se o MLS (*Moving Least Square*) para construir as funções forma, fornecendo resultados mais estáveis para a variação do tamanho do domínio de apoio e arranjos nodais distorcidos.

Oliveira, 2013 apresenta uma solução analítica por meio do método espectral para Cinética de Difusão Espacial unidimensional, em geometria cartesiana e cilíndrica, para meios homogêneos multiplicativos subcríticos com fonte externa; considerou-se um e G grupos de energia com e sem precursores de nêutrons atrasados, para diferentes tipos de transientes. A ideia básica é a expansão da solução em séries de autofunções (seno para cartesiana e Bessel para cilíndrica), que substituídas nas equações de cinética obtém-se uma equação diferencial matricial linear de primeira ordem de solução conhecida.

Guyot e Gubernatis, 2015 utilizam um modelo de cinética espaço-tempo tridimensional acoplado com fenômenos termo-hidráulicos, aplicado para resolver efeitos espaciais durante um transiente de um acidente severo.

Ceolin et al., 2013, 2014, 2015a,b apresentam soluções com expressões analíticas através da série de Taylor, onde os coeficientes são encontrados usando a equação diferencial e as condições de contorno e interface, para o problema estacionário unidimensional e bidimensional e modelo de Cinética de Difusão unidimensional multigrupo e multirregião. A ideia básica desse método consiste em: expansão do fluxo de nêutrons e concentração de precursores de nêutrons atrasados em série dupla de Taylor na variável espacial e temporal; substituição dessas expansões na equação de cinética e construção de um sistema algébrico linear que permite calcular os coeficientes da expansão em série pela aplicação das condições de contorno e continuidade de fluxo e corrente de nêutrons nas interfaces da malha. Cabe mencionar, que foi considerada como condição inicial desse problema a solução encontrada por essa metodologia para o respectivo problema estacionário [Ceolin et al., 2013, 2014]. Neste mesmo contexto, Schramm, 2016 resolve a Equação Cinética de Difusão multigrupos bidimensional de nêutrons com uma aproximação polinomial em um domínio homogêneo retangular, com condições de contorno não homogêneas. A relevante

característica dessa solução com representação analítica encontrada, reside no fato de que é exata para o conjunto finito e discreto de pontos do domínio, caracterizados pelos nós da malha.

Zanette, 2017 apresenta uma solução para as equações multigrupo, multirregião, estacionária e em geometria cartesiana pelo método da potência via fronteiras fictícias. Nesse contexto, Tavares, 2018 soluciona as equações de cinética espacial multigrupo em geometria cartesiana, utilizando um método iterativo de fonte baseado no método da potência.

Diante da literatura existente, uma preocupação eminente nesta tese é a busca por soluções analíticas ou com representação analítica, a fim de descrever o comportamento da população neutrônica com precisão satisfatória e confiabilidade, buscando estudar a convergência e controle de erro além de simples critérios de parada no algoritmo. Por se tratarem de equações diferenciais parciais acopladas, a dificuldade de resolução se torna evidente. Porém, como mencionado anteriormente, existe a necessidade de se desenvolver estudos com esses tipos de soluções para prever o comportamento e segurança de reatores nucleares.

Deste modo, o objetivo deste trabalho é apresentar uma solução com representação analítica livre de rigidez para a Equação de Cinética de Difusão de Nêutrons considerando, sem perda de generalidade, dois grupos de energia, seis grupos de precursores de nêutrons atrasados, em domínio cartesiano unidimensional homogêneo e heterogêneo (constituído de multiplacas), incluindo análise de convergência e controle de erro da solução.

A contribuição desse trabalho, em relação ao de Ceolin et al., 2014, consiste na determinação da solução com representação analítica da Equação de Cinética de Difusão de Nêutrons com dois grupos de energia, seis grupos de precursores de nêutrons atrasados, em geometria cartesiana unidimensional e bidimensional, domínio homogêneo e heterogêneo, contornando o problema de rigidez através da aplicação do Método da Decomposição de Adomian modificado [Adomian, 1988, 1994; Adominan e Rach, 1996; Petersen, 2011; Da Silva et al., 2014] para solucionar a variável temporal. Além disso, ressalta-se que a dependência temporal é incluída nos coeficientes da série de Taylor, diferentemente dos trabalhos citados anteriormente, o que propicia a utilização da expansão em séries de Taylor das variáveis com o Método da Decomposição modificado. Diferentemente de métodos A-estáveis para problemas rígidos que são lançados em um sistema de equações

linear, o método relatado neste trabalho consiste primeiramente em um desacoplamento das equações com diferentes escalas de tempo características, que são então subsequentemente corrigidas por um esquema recursivo com os termos fonte. A inicialização das recursões é definida pela parte desacoplada do sistema de equações, enquanto as etapas consecutivas das recursões usam os termos cruzados como termos da fonte. Mais especificamente, cada etapa de recursão corrige a solução para cada respectiva escala de tempo separadamente, contornando assim a rigidez desde o início, uma clara vantagem diante dos métodos presentes na literatura.

Em resumo, a metodologia consiste em expandir os fluxos escalares de nêutrons e as concentrações de precursores de nêutrons atrasados em séries de Taylor nas variáveis espaciais (aplicando a metodologia discutida por Ceolin et al., 2014) carregando a dependência temporal nos coeficientes dessas séries, encontrando-se um sistema recursivo de equações diferenciais ordinárias dependentes do tempo. Contorna-se o caráter de rigidez desse sistema recursivo de EDO's utilizando a ideia de Da Silva et al., 2014 (aplicada na solução do problema de cinética pontual de nêutrons), transformando o problema em um sistema recursivo através do método da Decomposição, permitindo calcular a dependência do tempo dos coeficientes dessas séries e, obtendo assim, a solução pela aplicação das condições de contorno e de continuidade de fluxo e corrente de nêutrons nas interfaces entre os subdomínios. Formalmente, a matriz dos coeficientes da equação diferencial ordinária obtida é dividida em uma matriz constante e diagonal, já a segunda é composta dos termos restantes fora da diagonal e os com a dependência temporal. Assim, a segunda matriz é colocada na fonte do sistema. Com a solução das EDO's conhecidas, a inicialização das recursões recebe a condição inicial advinda do problema estacionário [Ceolin et al., 2014] e todas subsequentes possuem condição inicial nula e utilizam a solução da recursão anterior. O fato de cada recursão atualizar a dependência do tempo para todos os momentos permite calcular a solução para qualquer valor sem a necessidade da integração sucessiva no tempo, conhecida como continuação analítica, presentes nas abordagens progressivas no tempo nos métodos acima citados. Cabe ressaltar que com a não utilização da integração sucessiva no tempo, espera-se a geração de resultados com reduzido tempo computacional por não precisar calcular todos os instantes de tempo anteriores. Além disso, a representação em série de Taylor da dependência espacial em cada subdomínio descreve continuamente a solução, enquanto as representações numéri-

cas comumente empregadas, como esquemas de elementos finitos, possuem um domínio de malha discreta. Completa-se a análise matemática realizando o estudo de convergência da solução encontrada para os problemas estudados, bem como o controle do erro, através da utilização da própria equação diferencial usando a norma máxima. Ademais, também comparam-se as soluções encontradas com resultados presentes na literatura.

Face a robustez do método proposto sob o ponto de vista matemático para a solução do problema de Cinética Espacial de Difusão de Nêutrons, considerando geometria cartesiana com uma dimensão, domínio homogêneo e heterogêneo, com dois grupos de energia e seis grupos de precursores de nêutrons atrasados, fica ressaltada sua importância dando continuidade aos estudos e trabalhos da literatura apresentados, em vista de analisar e prever o comportamento de nêutrons em tempo real e suficientemente preciso na operação do núcleo de um reator nuclear.

A presente tese encontra-se organizada da seguinte forma: no capítulo 2, apresentam-se conceitos de física de reatores nucleares, juntamente com a derivação da Equação de Difusão de Nêutrons, abordando os seguintes aspectos: energia contínua, multigrupos, dois grupos e um grupo de energia; criticalidade; cinética; condições de contorno e interface. No capítulo 3, desenvolve-se a metodologia aplicada para as equações de cinética espacial de difusão unidimensional em geometria cartesiana, domínio homogêneo, com dois grupos de energia e seis grupos de precursores de nêutrons atrasados. Além disso, mostram-se os resultados numéricos obtidos comparando-se com os presentes na literatura, estudo de convergência da solução encontrada, bem como a estimativa do controle do erro. No capítulo 4, relatam-se os procedimentos aplicados para o problema heterogêneo unidimensional, uma análise de sensibilidade de convergência perturbando os parâmetros nucleares e as considerações sobre os testes realizados, onde detalhes sobre cada estratégia e gráficos são apresentados no **APÊNDICE A**. No capítulo 5, dissertam-se as conclusões e perspectivas futuras do trabalho.

2 EQUAÇÃO DE DIFUSÃO DE NÊUTRONS

Na teoria de reatores nucleares, estuda-se a distribuição de nêutrons no núcleo do reator através do transporte ou difusão de nêutrons. A Equação de Transporte de Nêutrons, considerando a dependência espacial, angular, temporal e energética, sem simplificações, não possui solução analítica e as numéricas são de difícil implementação. Devido a este fato, muitas vezes é preferível analisar o comportamento dos nêutrons através da Teoria de Difusão, que apresenta um formalismo mais apropriado e simples para situações reais. Além disso, a maioria dos estudos tratam o movimento dos nêutrons como um processo difusivo, onde admite-se que os nêutrons tendem a se difundir de regiões de alta densidade para regiões de baixa densidade [Lamarsh, 1966].

Diante disso, este capítulo trata-se de uma análise detalhada sobre a distribuição de nêutrons no reator, identificando como as várias reações nucleares acontecem através da difusão de nêutrons. Para isso, será deduzida a Equação de Difusão de Nêutrons com tratamento contínuo da energia, multigrupos, monoenergéticos e com dois grupos. Além disso, estuda-se essas equações na criticalidade e também a Cinética de Difusão, onde são incluídos os nêutrons atrasados.

2.1 Equação de Difusão de Nêutrons com energia na forma contínua

Os nêutrons podem penetrar/interagir em qualquer núcleo por serem eletricamente neutros, sofrendo vários tipos de reações dentro do reator nuclear, que envolvem perdas e produções, compondo um balanço. Desta maneira, nesta seção é construída a equação de balanço de nêutrons, considerando efeitos de fuga e isótopos fissionáveis, com a finalidade de descrever fenômenos de criticalidade em sistemas multiplicativos de dimensões finitas [Lewis, 2008], admitindo a energia na forma contínua.

Para iniciar a construção da equação de balanço de nêutrons, primeiramente considera-se um volume arbitrário V de área de superfície S localizado no interior de um reator, o qual deve-se examinar minuciosamente para determinar como a população de nêutrons varia. Para tanto, é necessário conhecer a velocidade com que os nêutrons se movem e suas interações com núcleos presentes no reator. Sabe-se que a probabilidade de uma reação ocorrer entre os nêutrons e núcleos é proporcional à massa dos núcleos e à velocidade em que os nêutrons estão se deslocando dentro do reator. Desta maneira, utilizando a teoria

estatística na qual a média dos valores são calculados, define-se a densidade de nêutrons para descrever a distribuição dos nêutrons no reator:

$$\left[\begin{array}{l} \text{Número esperado de nêutrons} \\ \text{em } d^3\mathbf{r} \text{ na posição } \mathbf{r}, \text{ em } dE \\ \text{com energia } E \text{ e no instante } t \end{array} \right] = n(\mathbf{r}, E, t)d^3\mathbf{r}. \quad (2.1)$$

A representação estatística completa da densidade de nêutrons exige sete variáveis, três para as coordenadas espaciais (vetor \mathbf{r} que indica a posição), duas angulares (direção do movimento), uma para a energia cinética (E que é proporcional à velocidade) e uma temporal (t , o instante de observação). Porém, na maioria dos cálculos de física de reatores, os detalhes da dependência angular não são necessários.

Para determinar a probabilidade na qual um nêutron vai atingir um núcleo e causar uma reação nuclear, utiliza-se o conceito de seção de choque macroscópica Σ (área alvo total disponível de todos os núcleos contidos em uma unidade de volume) e a velocidade de nêutrons (v), ou seja:

$$\left[\begin{array}{l} \text{Frequência} \\ \text{da interação} \end{array} \right] = v(E)\Sigma(\mathbf{r}, E, t). \quad (2.2)$$

Cabe destacar que as seções de choque são definidas para cada tipo de reação. A reação está diretamente relacionada com a quantidade de energia do nêutron incidente e o tipo de núcleo alvo. Como os nêutrons possuem um amplo espectro de energia, vários tipos de reações podem acontecer. Essas reações são discutidas a seguir.

Multiplicando a frequência da interação pela densidade de nêutrons, pode-se definir a densidade da taxa de interação como:

$$\left[\begin{array}{l} \text{Densidade da} \\ \text{taxa de interação} \end{array} \right] = F(\mathbf{r}, E, t)d^3\mathbf{r}dE = v(E)\Sigma(\mathbf{r}, E, t)n(\mathbf{r}, E, t)d^3\mathbf{r}dE. \quad (2.3)$$

Na Teoria de Difusão, outra grandeza importante é o fluxo escalar, que é obtido pela multiplicação da densidade de nêutrons pela sua velocidade, presente na equação anterior. Então:

$$\left[\begin{array}{l} \text{Fluxo escalar} \\ \text{de nêutrons} \end{array} \right] = \Phi(\mathbf{r}, E, t) = v(E)n(\mathbf{r}, E, t). \quad (2.4)$$

Por estimar a taxa na qual vários tipos de reações ocorrem entre nêutrons e núcleos por

unidade de volume, através da multiplicação do fluxo pela seção de choque macroscópica correspondente, é mais adequado utilizar o fluxo de nêutrons ($\Phi(\mathbf{r}, E, t)$). Vale destacar que o fluxo escalar de nêutrons leva em consideração nêutrons em todas as direções. Portanto, levando em consideração a Equação 2.4, pode-se reescrever a Equação 2.3 como:

$$F(\mathbf{r}, E, t)d^3\mathbf{r}dE = \Sigma(\mathbf{r}, E, t)\Phi(\mathbf{r}, E, t)d^3\mathbf{r}dE. \quad (2.5)$$

Diante disso, constrói-se uma equação para o fluxo de nêutrons utilizando a ideia de que a variação do número de nêutrons com o passar do tempo, no volume definido, vai ser determinada pela diferença entre a produção e a perda de nêutrons por volume unitário:

$$\begin{bmatrix} \text{Taxa de variação} \\ \text{do número de} \\ \text{nêutrons em } V \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \text{Produção} \\ \text{em } V \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \text{Perdas} \\ \text{em } V \end{bmatrix}. \quad (2.6)$$

A produção no volume V é constituída por fontes de nêutrons (por exemplo a fissão), nêutrons que entram pela superfície S do volume V e nêutrons de diferentes energias que sofrem colisões de espalhamento para dentro do intervalo de energia de interesse. Já as perdas são advindas da saída dos nêutrons através da superfície S do volume V e de colisões, que removem um nêutron através da interação de absorção e através do espalhamento de nêutrons com energia E para outras energias. A contribuição sobre toda a superfície S comumente é tratada em apenas um termo, denotado perda por fuga, no qual são computados os nêutrons saindo, subtraindo os que estão entrando pela superfície [Duderstadt e Hamilton, 1976].

Diante desses conceitos, a equação de balanço de nêutrons deve ter a forma:

$$\begin{bmatrix} \text{Taxa de variação} \\ \text{do número de} \\ \text{nêutrons em } V \end{bmatrix} = - \begin{bmatrix} \text{Perda por} \\ \text{fuga} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} \text{Perda por} \\ \text{absorção} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \text{Fonte de} \\ \text{nêutrons} \end{bmatrix} \\ - \begin{bmatrix} \text{Espalhamento de} \\ \text{nêutrons para} \\ \text{fora do intervalo} \\ \text{de energia} \\ E \text{ e } E + dE \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \text{Espalhamento de} \\ \text{nêutrons para} \\ \text{dentro do intervalo} \\ \text{de energia} \\ E \text{ e } E + dE \end{bmatrix}. \quad (2.7)$$

Portanto, a taxa de variação do número de nêutrons em V deve representar o número de nêutrons na posição \mathbf{r} , no instante t e com energia no intervalo E e $E + dE$. Essa variação é nula no caso estacionário (sistema crítico), o qual mais detalhes serão vistos adiante. Assim, integrando essa quantidade no volume definido, obtém-se:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Taxa de variação} \\ \text{do número de} \\ \text{nêutrons em } V \end{array} \right] = \frac{\partial}{\partial t} \left[\int_V n(\mathbf{r}, E, t) d^3\mathbf{r} \right] dE. \quad (2.8)$$

Utilizando a Equação 2.4, pode-se reescrever a taxa de variação do número de nêutrons em V como:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \left[\int_V n(\mathbf{r}, E, t) d^3\mathbf{r} \right] dE &= \frac{\partial}{\partial t} \left[\int_V \frac{1}{v(E)} \Phi(\mathbf{r}, E, t) d^3\mathbf{r} \right] dE = \\ &= \left[\int_V \frac{1}{v(E)} \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, E, t)}{\partial t} d^3\mathbf{r} \right] dE. \end{aligned} \quad (2.9)$$

A fuga, como mencionado anteriormente, representa a taxa de nêutrons difundindo, ou seja, entrando ou saindo de um pequeno volume arbitrário sem a ocorrência de interações, na posição \mathbf{r} , no instante t e energia no intervalo E e $E + dE$. Sendo $\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)$ a densidade de corrente de nêutrons, que está relacionada a um elemento de superfície, logo $\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)$ relaciona-se ao seu volume, ou seja, para obter todos os termos da equação de balanço integradas sobre o volume V utiliza-se o Teorema de Gauss, obtendo-se:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Perda por} \\ \text{fuga} \end{array} \right] = \left[\int_S \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) dS \right] dE = \left[\int_V \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) d^3\mathbf{r} \right] dE. \quad (2.10)$$

Para relacionar a densidade de corrente (grandeza vetorial) com o gradiente espacial do fluxo escalar de nêutrons (grandeza escalar), emprega-se a aproximação estabelecida pela Lei de Fick com a finalidade de que a equação dependa somente de uma incógnita. Apesar dessa teoria se tratar de uma aproximação, apresenta resultados satisfatórios em cálculos globais em física de reatores. Sua origem, na realidade, se deu para solucionar o problema de difusão química, onde mostra-se que um soluto sofre difusão de uma região de maior concentração para uma região de menor concentração. Pode-se dizer também, que a taxa do fluxo do soluto é proporcional ao gradiente da concentração em sentido oposto [Lamarsh, 1966]. Desta maneira, assume-se que os nêutrons têm um comportamento similar: se o fluxo de nêutrons é maior em uma parte do reator nuclear, ocorre difusão para uma região de menor densidade. Isso se deve ao fato de que ocorrem maiores densidades

de colisão em posições de maiores densidades de nêutrons.

Para relacionar o fluxo escalar com a corrente de nêutrons utilizando a Lei de Fick, faz-se as seguintes suposições [Schramm, 2013]:

- O fluxo angular deve ter dependência linearmente anisotrópica;
- As fontes externas necessitam ser isotrópicas;
- A densidade de corrente altera-se lentamente comparando com a escala de tempo médio de colisão;
- A probabilidade de absorção precisa ser consideravelmente menor que a de espalhamento;
- A variação espacial de nêutrons é linear.

Reforça-se que uma das aproximações feitas para se chegar ao Modelo de Difusão é considerar a taxa de variação da densidade de corrente muito mais lenta que a frequência de colisão, ou seja:

$$\frac{1}{|\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)|} \left| \frac{d\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t)}{dt} \right| \ll v(E)\Sigma_T(\mathbf{r}, E, t), \quad (2.11)$$

onde $\Sigma_T(\mathbf{r}, E, t)$ é a seção de choque macroscópica total.

Então, considerando a Lei de Fick:

$$\mathbf{J}(\mathbf{r}, E, t) = -D(\mathbf{r}, E, t)\nabla\Phi(\mathbf{r}, E, t), \quad (2.12)$$

onde $D(\mathbf{r}, E, t)$ é o coeficiente de Difusão, que pode ser representado pela seguinte relação:

$$D(\mathbf{r}, E, t) = \frac{1}{3\Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E, t)}, \quad (2.13)$$

onde $\Sigma_{tr}(\mathbf{r}, E, t)$ é a seção de choque macroscópica de transporte. A seção de choque macroscópica de transporte pode ser definida como:

$$\Sigma_{tr} = \Sigma_T - \bar{\mu}\Sigma_s, \quad (2.14)$$

onde $\bar{\mu}$ é o cosseno do ângulo médio de espalhamento e Σ_s é a seção de choque macroscópica de espalhamento. Então, a seção de choque macroscópica de transporte se reduz à seção de choque macroscópica total, pois para espalhamento isotrópico $\bar{\mu} = 0$. Diante dessas

considerações, obtém-se o termo das perdas por fuga:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Perda por} \\ \text{fuga} \end{array} \right] = - \left[\int_V \nabla \cdot D(\mathbf{r}, E, t) \nabla \Phi(\mathbf{r}, E, t) d^3\mathbf{r} \right] dE. \quad (2.15)$$

Contudo, enfatiza-se que a aproximação pela Lei de Fick é limitada em meios fortemente absorvedores de nêutrons, em regiões próximas à fonte ou às fronteiras, e também quando o espalhamento é vigorosamente anisotrópico, impondo uma limitação à Equação de Difusão.

Já a absorção é definida como a taxa de nêutrons absorvidos pelos núcleos na posição \mathbf{r} , tempo t e energia entre E e $E + dE$ em um elemento de volume V :

$$\left[\begin{array}{c} \text{Perda por} \\ \text{absorção} \end{array} \right] = \left[\int_V \Sigma_a(\mathbf{r}, E, t) \Phi(\mathbf{r}, E, t) d^3\mathbf{r} \right] dE, \quad (2.16)$$

onde $\Sigma_a(\mathbf{r}, E, t)$ é a seção de choque macroscópica de absorção, que representa a probabilidade por unidade de percurso para um nêutron sofrer a reação de absorção.

Define-se a fonte de nêutrons como a taxa de nêutrons produzidos na posição \mathbf{r} , tempo t e energia entre E e $E + dE$:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Fonte de} \\ \text{nêutrons} \end{array} \right] = \left[\int_V Q(\mathbf{r}, E, t) d^3\mathbf{r} \right] dE. \quad (2.17)$$

A fonte de nêutrons também pode ser escrita separando-se em dois termos, um que representa as fissões e outro, uma fonte externa:

$$Q(\mathbf{r}, E, t) = \chi(E) \int \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' + Q^{ext}(\mathbf{r}, E, t), \quad (2.18)$$

onde $\nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \Phi(\mathbf{r}, E', t)$ é a taxa de produção de nêutrons por fissão, $\chi(E)$ é o espectro de fissão, que representa a probabilidade que um nêutron pronto (emitido imediatamente após a fissão) apresente energia entre E e $E + dE$ como resultado de uma fissão, $\nu(E')$ é o número médio de nêutrons produzidos por fissão, $\Sigma_f(\mathbf{r}, E', t)$ é a seção de choque macroscópica de fissão e $Q^{ext}(\mathbf{r}, E, t)$ é a fonte externa. Segundo Watt, 1952, a probabilidade do nêutron pronto estar na energia de interesse como resultado da fissão, presente na equação anterior, pode ser aproximada pela seguinte equação:

$$\chi(E) = H \exp(-aE) \sinh(\sqrt{bE}), \quad (2.19)$$

onde a e b são constantes que dependem do isótopo que vai sofrer fissão e da energia do nêutron incidente. Sua normalização é definida da seguinte maneira:

$$\int_0^{\infty} \chi(E) dE = 1, \quad (2.20)$$

e H (outra constante) é dada por:

$$H = \frac{2a^{2/3} \exp(-b/4a)}{\sqrt{(\pi b)}}. \quad (2.21)$$

Para ilustração e completo entendimento, o espectro de fissão ($\chi(E)$) para o U-235 é apresentado na Figura 2.1.

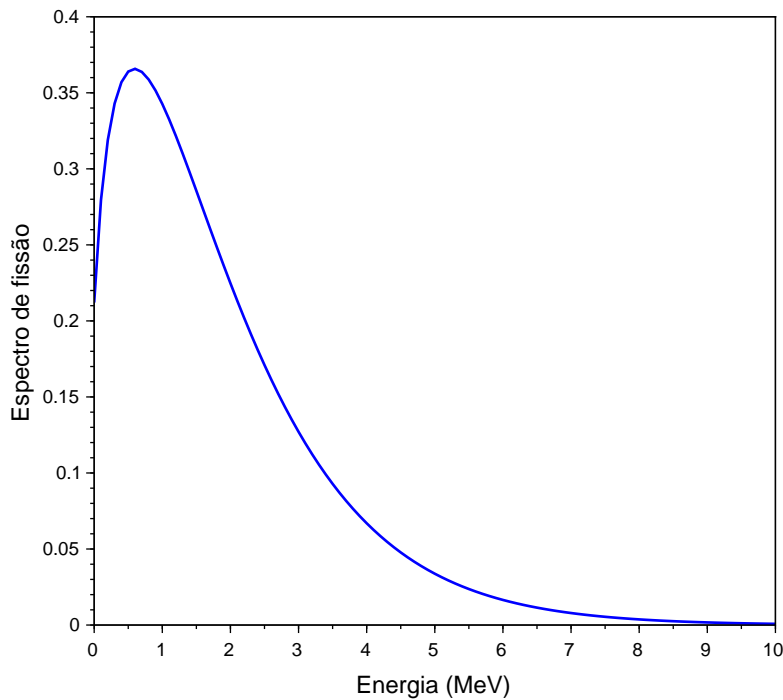


Figura 2.1 – Espectro de fissão do U-235.

Pode-se perceber analisando a Figura 2.1, que a maioria dos nêutrons são gerados com energia maior que 1 MeV, em média com 2 MeV de energia. Porém, pela Figura 2.2 apresentada a seguir, a seção de choque de fissão para essa energia é baixa, ou seja, fissões nessa faixa de energia são pouco possíveis. Cabe ressaltar, que quando os nêutrons são produzidos, possuem energia cinética elevada (aproximadamente 1 até 10 MeV) e, devido a esse fato, são definidos como nêutrons rápidos. Através do processo de modera-

ção, no qual cedem energia ao meio devido as colisões, atingem energias intermediárias (em torno de 1 até 1000 keV), passando a serem chamados de nêutrons intermediários. Quando alcançam energias baixas, próximas a energia térmica (aproximadamente 0,025 eV), denominam-se nêutrons térmicos [Duderstadt e Hamilton, 1976]. Contudo, em reatores térmicos, em torno de 85% a 90% dos nêutrons produzidos são moderados até atingirem energia térmica. Também vale destacar que a probabilidade de um nêutron induzir uma reação de fissão com um núcleo físsil¹, como por exemplo com o U-235, é ordens de magnitude maior para nêutrons térmicos ($\sim 97\%$) do que para nêutrons rápidos ($\sim 3\%$). É por esta razão, que utilizam-se moderadores de nêutrons nesse tipo de reatores. As poucas reações de fissão que os nêutrons rápidos induzem acontecem com materiais não físeis, como o U-238. Isto pode ser observado na Figura 2.2, onde são ilustradas as seções de choque de fissão e captura (absorção de nêutrons seguida de emissão de um fóton) para o U-235 e U-238. Já a Figura 2.3 mostra o esquema do ciclo de nêutrons em um reator térmico, a qual resume o que foi anteriormente discutido.

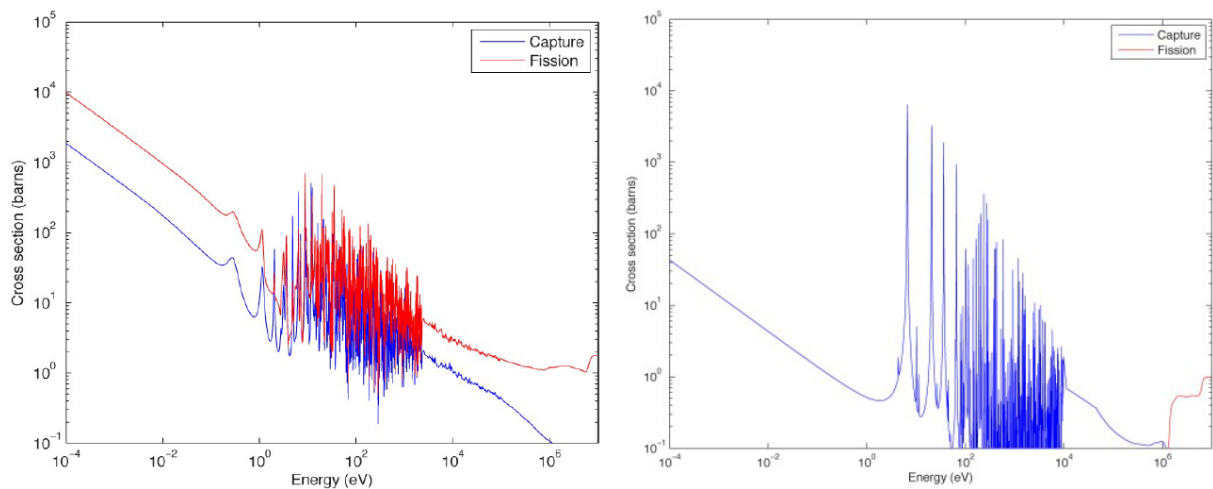


Figura 2.2 – Seções de choque de fissão e captura do U-235 e U-238 em função da energia. [Adaptado de Garland, 2014]

A fissão nuclear ocorre sempre em átomos pesados, dividindo-os em dois (produtos de fissão) e liberando em torno de 200 MeV de energia para o U-235. A maior parte dessa energia (~ 187 MeV) é liberada instantaneamente, sendo aproximadamente 167 MeV em energia cinética dos produtos de fissão, 5 MeV de energia cinética dos nêutrons liberados, 5 MeV de energia instantânea dos raios γ e 10 MeV de energia de captura dos raios γ . Uma

¹Material capaz de sustentar uma reação em cadeia, sendo fissionado por nêutrons térmicos.

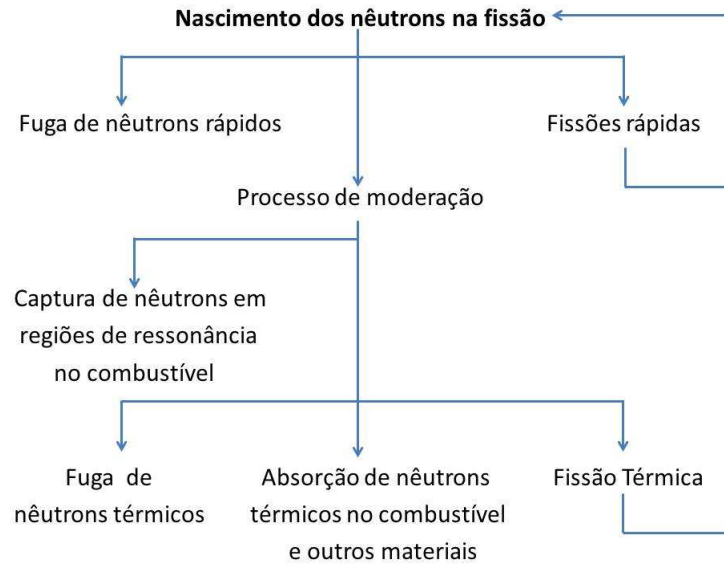


Figura 2.3 – Esquema do ciclo de nêutrons em um reator térmico.

pequena parte dos 200 MeV (~ 23 MeV) é de energia atrasada, sendo aproximadamente 7 MeV das partículas β emitidas pelos produtos de fissão, 6 MeV dos raios γ emitidos pelos produtos de fissão e mais 10 MeV de energia dos neutrinos. Porém, a energia dos neutrinos não é somada a energia total, pois não são absorvidos pelo reator [Heinen, 2009].

Quando a fissão ocorre, os produtos de fissão se aproximam mais da região de estabilidade quando além da fragmentação também nêutrons são emitidos (ν). Em um reator nuclear, onde a reação em cadeia é controlada, apenas um nêutron dos produzidos na fissão causa outras fissões. Os nêutrons restantes desaparecem pelos tipos de eventos citados anteriormente. Depois da reação de fissão, os produtos de fissão ainda podem possuir muitos nêutrons, deixando-os em estado instável. Esses núclídeos podem decair emitindo partículas β ou emitir mais nêutrons. Para diferenciar os nêutrons emitidos imediatamente após a fissão dos emitidos depois, denomina-se respectivamente de nêutrons prontos (na ordem de 10^{-4} a 10^{-5} segundos¹) e nêutrons atrasados (na ordem de 10^{-1} segundos a minutos). Esse assunto será discutido na seção de Cinética de Difusão de Nêutrons.

Prosseguindo com a construção da equação de balanço, os termos seguintes são os de espalhamento. Assim, como o espalhamento é uma colisão mecânica do nêutron com o núcleo, sua energia pode mudar, ou seja, o nêutron pode ser removido do seu intervalo de

¹Escalas de tempo para um reator térmico.

energia, ou ainda, espalhado para o mesmo intervalo [Lamarsh, 1966]. Então, representa-se o espalhamento de nêutrons para fora do intervalo de energia E e $E + dE$ como a taxa de nêutrons espalhados para energias diferentes da quantidade E e $E + dE$ na posição \mathbf{r} , instante t e energia entre E e $E + dE$:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Espalhamento de} \\ \text{nêutrons para} \\ \text{fora do intervalo} \\ \text{de energia} \\ E \text{ e } E + dE \end{array} \right] = \left[\int_V \Sigma_s(\mathbf{r}, E, t) \Phi(\mathbf{r}, E, t) d^3\mathbf{r} \right] dE, \quad (2.22)$$

onde $\Sigma_s(\mathbf{r}, E, t)$ é a seção de choque macroscópica de espalhamento, que representa a probabilidade por unidade de percurso para um nêutron sofrer espalhamento para energias diferentes do intervalo E e $E + dE$.

Em seguida, estabelece-se o espalhamento de nêutrons para dentro da energia E e $E + dE$ como a taxa de nêutrons espalhados para o intervalo E e $E + dE$ na posição \mathbf{r} , instante t e energia entre E' e $E' + dE'$. Em outras palavras, são os nêutrons que estavam em outros intervalos de energia e entraram dentro do intervalo de interesse devido a reação de espalhamento:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Espalhamento de} \\ \text{nêutrons para} \\ \text{dentro do intervalo} \\ \text{de energia} \\ E \text{ e } E + dE \end{array} \right] = \left[\int_V \int \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' d^3\mathbf{r} \right] dE. \quad (2.23)$$

Substituindo as Equações 2.9, 2.15, 2.16, 2.18, 2.22 e 2.23 na Equação de balanço 2.7, obtém-se:

$$\int_V d^3\mathbf{r} \left[\frac{1}{v(E)} \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, E, t)}{\partial t} - \nabla \cdot D(\mathbf{r}, E, t) \nabla \Phi(\mathbf{r}, E, t) + \Sigma_T(\mathbf{r}, E, t) \Phi(\mathbf{r}, E, t) - \int \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' - \chi(E) \int \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' + Q^{ext}(\mathbf{r}, E, t) \right] dE = 0, \quad (2.24)$$

onde:

$$\Sigma_T(\mathbf{r}, E, t) = \Sigma_a(\mathbf{r}, E, t) + \Sigma_s(\mathbf{r}, E, t), \quad (2.25)$$

que representa a seção de choque macroscópica total.

Portanto, o integrando é nulo pois o volume V foi escolhido arbitrariamente. Assim, a Equação de Difusão dependente do tempo pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v(E)} \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, E, t)}{\partial t} = \nabla \cdot D(\mathbf{r}, E, t) \nabla \Phi(\mathbf{r}, E, t) - \Sigma_T(\mathbf{r}, E, t) \Phi(\mathbf{r}, E, t) + \\ \int \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' + \chi(E) \int \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' \\ + Q^{ext}(\mathbf{r}, E, t). \end{aligned} \quad (2.26)$$

Cabe destacar que o primeiro termo do lado direito da igualdade, que representa a fuga de nêutrons, tem sinal positivo mas representa perda de nêutrons. O sinal positivo surge como resultado do sinal negativo presente na Equação 2.12 entre a corrente de nêutrons e gradiente do fluxo.

2.2 Discretização da energia: Equações de Difusão de Nêutrons Multigrupos

Até o presente momento, tratou-se a energia dos nêutrons (E) como uma variável contínua. No entanto, na maioria dos casos, não se utiliza a energia nessa forma para resolução das equações. Pela Figura 2.2 é possível perceber que existem regiões de ressonâncias (normalmente para nêutrons com energia entre 0,1 a 1000 eV) que apresentam comportamento complexo, onde há forte absorção de nêutrons por núcleos pesados. A maioria dos isótopos apresentam esse comportamento, embora os picos na região de ressonância geralmente aparecerem mais numerosamente em elementos com maior massa atômica.

A forma mais conveniente e usual é reescrever a Equação 2.26 em multigrupos, dividindo o domínio energético em um determinado número G de divisões. Cada uma dessas divisões são denominadas grupos de energia (g), começando no grupo 1 (intervalo com maior energia) até o grupo G (intervalo com menor energia). A expressão a seguir mostra a discretização do domínio energético:

$$E_0 > E_1 > \dots E_{G-1} > E_G. \quad (2.27)$$

A ordem decrescente dos grupos se deve ao fato de que os nêutrons surgem com altas energias e, geralmente, assume-se que somente cedem energia ao meio ao colidir com núcleos. A discretização da energia e os grupos podem ser vistos na Figura 2.4.

A precisão da solução do Modelo Multigrupos depende do número de grupos es-

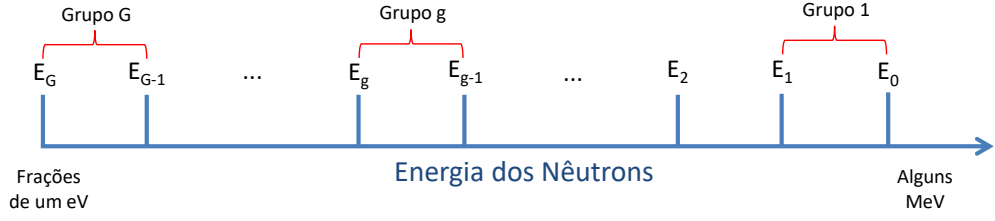


Figura 2.4 – Discretização do domínio energético e grupos de energias dos nêutrons.

colhidos. Admite-se que as seções de choque macroscópicas e demais parâmetros são calculadas apropriadamente a partir de suas médias sobre os correspondentes intervalos de energia. Bibliotecas de dados sobre as seções de choque estão disponíveis para consulta em domínio público, como por exemplo a base de dados *Evaluated Nuclear Data File* (ENDF) [Garland, 2014]. Assim sendo, pode-se reescrever as seções de choque macroscópicas, espectro de fissão e coeficiente de difusão para cada grupo g como:

$$\begin{aligned}
 Q^{ext}(\mathbf{r}, E, t) &= Q_g^{ext}(\mathbf{r}, t), \\
 \chi(E) &= \chi_g, \\
 \nu(E')\Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) &= \nu_{g'}\Sigma_{f,g'}(\mathbf{r}, t), \\
 \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) &= \Sigma_{sg'g}(\mathbf{r}, t), \\
 \Sigma_T(\mathbf{r}, E, t) &= \Sigma_{Tg}(\mathbf{r}, t), \\
 D(\mathbf{r}, E, t) &= D_g(\mathbf{r}, t),
 \end{aligned} \tag{2.28}$$

onde, para todos parâmetros e variáveis acima e a seguir, os índices g , g' , $g'g$, gg' e gg representam, respectivamente, grupo g , grupo g' , saindo do grupo g' para o g , retirando-se do grupo g para o g' e conduzindo-se do grupo g para o mesmo grupo.

Partindo da Equação de Difusão de Nêutrons com energia contínua, definida na Equação 2.26, com o intuito de obtê-la na forma discretizada em multigrupos de energia, e aplicando o conceito de balanço de nêutrons para um dado grupo de energia, o qual nêutrons podem entrar ou sair deste grupo, define-se o fluxo de nêutrons no grupo g como:

$$\Phi_g(\mathbf{r}, t) \equiv \int_{E_g}^{E_{g-1}} \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE, \tag{2.29}$$

onde:

$$\Phi_g(\mathbf{r}, t) \text{ para } E \in (E_g, E_{g-1}) \text{ onde } E_g < E < E_{g-1}. \tag{2.30}$$

Do mesmo modo, aplicando a mesma integral para o termo do lado esquerdo da

Equação 2.26 tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v(E)} \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, E, t)}{\partial t} &= \frac{\partial}{\partial t} \left(\int_{E_g}^{E_{g-1}} \frac{1}{v(E)} \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE \right) \\ &\equiv \frac{\partial}{\partial t} \left(\frac{\Phi_g(\mathbf{r}, t)}{v_g} \right) = \frac{1}{v_g} \frac{\partial \Phi_g(\mathbf{r}, t)}{\partial t}, \end{aligned} \quad (2.31)$$

onde:

$$\frac{1}{v_g} = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \frac{1}{v(E)} \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE}, \quad (2.32)$$

ou seja, o coeficiente $1/v_g$, assim determinado, representa a integral ponderada do fluxo sobre o intervalo de energia do grupo pertencente.

Para o termo com o coeficiente de difusão, obtém-se a seguinte expressão:

$$\begin{aligned} \nabla \cdot D(\mathbf{r}, E, t) \nabla \Phi(\mathbf{r}, E, t) &= \nabla \cdot \left(\int_{E_g}^{E_{g-1}} D(\mathbf{r}, E, t) \nabla \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE \right) \\ &\equiv \nabla \cdot D_g(\mathbf{r}, t) \nabla \Phi_g(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (2.33)$$

onde:

$$D_g(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} D(\mathbf{r}, E, t) \nabla \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \nabla \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE}. \quad (2.34)$$

No termo difusivo, o coeficiente de difusão é ponderado por $\nabla \Phi$, o fator de fluxo do termo citado.

Lembrando da Equação 2.25, o termo de absorção mais o espalhamento para fora do grupo g são representados da seguinte maneira:

$$\Sigma_T(\mathbf{r}, E, t) \Phi(\mathbf{r}, E, t) \equiv \int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma_T(\mathbf{r}, E, t) \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE \equiv \Sigma_{T,g}(\mathbf{r}, t) \Phi_g(\mathbf{r}, t), \quad (2.35)$$

onde:

$$\Sigma_{T,g}(\mathbf{r}, t) \equiv \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma_T(\mathbf{r}, E, t) \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE}. \quad (2.36)$$

Já para o espalhamento para dentro do grupo g , que representa os nêutrons que são espalhados dentro do grupo g oriundos de todos os grupos de energia, tem-se:

$$\begin{aligned} &\int_0^\infty \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' \\ &= \int_{E_g}^{E_{g-1}} \left(\sum_{g'=1}^G \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' \right) dE \\ &= \sum_{g'=1}^G \int_{E_g}^{E_{g-1}} \left(\int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' \right) dE \\ &\equiv \sum_{g'=1}^G \Sigma_{sg'g}(\mathbf{r}, t) \Phi_{g'}(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (2.37)$$

onde:

$$\Sigma_{sg'g}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\Phi_{g'}(\mathbf{r}, t)} \int_{E_g}^{E_{g-1}} \left(\int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' \right) dE. \quad (2.38)$$

Para finalizar, o último termo que representa a fissão é definido como:

$$\begin{aligned} & \chi(E) \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' \\ &= \int_{E_g}^{E_{g-1}} \chi(E) \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' dE \\ &= \int_{E_g}^{E_{g-1}} \chi(E) dE \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE'. \end{aligned} \quad (2.39)$$

Lembrando da Equação 2.28, pode-se escrever:

$$\begin{aligned} & \int_{E_g}^{E_{g-1}} \chi(E) dE \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' \\ &= \chi_g \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' \\ &= \chi_g \sum_{g'=1}^G \int_{E_g}^{E_{g-1}} \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' \equiv \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'}(\mathbf{r}, t) \Phi_{g'}(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (2.40)$$

onde,

$$\nu_{g'} \Sigma_{fg'}(\mathbf{r}, t) = \frac{1}{\Phi_{g'}(\mathbf{r}, t)} \int_{E_g}^{E_{g-1}} \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE'. \quad (2.41)$$

Reescrevendo todos os termos, chega-se à Equação de Difusão de Nêutrons Multi-grupos de Energia:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \Phi_g(\mathbf{r}, t) &= \nabla \cdot D_g(\mathbf{r}, t) \nabla \Phi_g(\mathbf{r}, t) - \Sigma_{Tg}(\mathbf{r}, t) \Phi_g(\mathbf{r}, t) + \sum_{g'=1}^G \Sigma_{sg'g}(\mathbf{r}, t) \Phi_{g'}(\mathbf{r}, t) \\ &+ \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'}(\mathbf{r}, t) \Phi_{g'}(\mathbf{r}, t) + Q_g^{ext}(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (2.42)$$

Sem perda de generalidade, é usual trabalhar com as seções de choque macroscópicas e coeficiente de difusão sem dependência da variável temporal:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \Phi_g(\mathbf{r}, t) &= \nabla \cdot D_g(\mathbf{r}) \nabla \Phi_g(\mathbf{r}, t) - \Sigma_{Tg}(\mathbf{r}) \Phi_g(\mathbf{r}, t) + \sum_{g'=1}^G \Sigma_{sg'g}(\mathbf{r}) \Phi_{g'}(\mathbf{r}, t) \\ &+ \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'}(\mathbf{r}) \Phi_{g'}(\mathbf{r}, t) + Q_g^{ext}(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (2.43)$$

Na prática, quando um reator está em operação, a energia dos nêutrons viajando pelo núcleo do reator predominantemente é maior do que a energia do meio ao qual está colidindo. Por essa razão, admite-se que os nêutrons não ganham energia com a reação de espalhamento, ou seja, não há *upscattering*. Os nêutrons rápidos são moderados, ou

seja, perdem energia através das colisões até atingirem o estado térmico. Portanto:

$$\Sigma_{sg'g} = 0, \text{ para } g' > g. \quad (2.44)$$

Como consequência da hipótese acima afirmada, pode-se simplificar o termo que representa o espalhamento para dentro do grupo g , pois o grupo térmico, que possui energia menor que 1 eV, não espalhará para grupos de energias maiores. Diante disso, obtém-se:

$$\sum_{g'=1}^G \Sigma_{sg'g}(\mathbf{r})\Phi_{g'}(\mathbf{r}, t) - \Sigma_{sgg}(\mathbf{r})\Phi_g(\mathbf{r}, t) = \sum_{g'=1}^{g-1} \Sigma_{sg'g}(\mathbf{r})\Phi_{g'}(\mathbf{r}, t), \quad (2.45)$$

onde $\Sigma_{sgg}(\mathbf{r})$ é a seção de choque macroscópica de espalhamento intragrupo, que representa a probabilidade de um nêutron espalhar e perder uma quantidade pequena de energia, tal que permaneça no mesmo grupo [Duderstadt e Hamilton, 1976]. Quando admitida essa simplificação, pode-se unir o termo de espalhamento intragrupo com os termos de absorção e espalhamento para fora do grupo g de energia ($\Sigma_{Tg}(\mathbf{r})\Phi_g(\mathbf{r}, t)$), resultando em:

$$\Sigma_{rg}(\mathbf{r}) = \Sigma_{Tg}(\mathbf{r}) - \Sigma_{sgg}(\mathbf{r}), \quad (2.46)$$

onde $\Sigma_{rg}(\mathbf{r})$ é a seção de choque macroscópica de remoção, que representa a probabilidade de um nêutron ser removido do grupo g de energia devido uma interação. Definidas as simplificações, a Equação 2.43 torna-se:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \Phi_g(\mathbf{r}, t) = & \nabla \cdot D_g(\mathbf{r}) \nabla \Phi_g(\mathbf{r}, t) - \Sigma_{rg}(\mathbf{r}) \Phi_g(\mathbf{r}, t) + \sum_{g'=1}^{g-1} \Sigma_{sg'g}(\mathbf{r}) \Phi_{g'}(\mathbf{r}, t) \\ & + \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'}(\mathbf{r}) \Phi_{g'}(\mathbf{r}, t) + Q_g^{ext}(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (2.47)$$

2.2.1 Equações de Difusão de Nêutrons Multigrupos na criticalidade

A criticalidade ocorre quando deseja-se manter a produção de nêutrons sem a presença de fontes externas e, portanto, na dependência somente de fontes fissionáveis. Para que isso aconteça é necessário que permaneça uma reação em cadeia sustentável, caso contrário o reator nuclear se desligará. Isso significa que deve existir um nêutron dos ν nêutrons produzidos pelo processo de fissão após ocorrerem todas reações possíveis de perda (desaparecimento no contorno do reator, absorção no meio material e por captura no próprio combustível). Desta forma, a Equação de Difusão de Nêutrons Multigrupos na criticalidade, assumindo que não há *upscattering*, ignorando a dependência temporal

e a presença de fonte externa, é definida como:

$$-\nabla \cdot D_g(\mathbf{r})\nabla\Phi_g(\mathbf{r}) + \Sigma_{rg}(\mathbf{r})\Phi_g(\mathbf{r}) = \sum_{g'=1}^{g-1} \Sigma_{sg'g}(\mathbf{r})\Phi_{g'}(\mathbf{r}) + \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu_{g'}\Sigma_{fg'}(\mathbf{r})\Phi_{g'}(\mathbf{r}). \quad (2.48)$$

Porém, a Equação 2.48 apresenta somente como solução a trivial, a menos que a composição e geometria do reator esteja combinada de forma exata, o que fisicamente pode-se admitir como impossível. Para introduzir sentido físico na equação, introduz-se um parâmetro arbitrário k que se define como fator de multiplicação de nêutrons. Esse parâmetro pode ser entendido como a razão entre o número de nêutrons em uma geração pelo número de nêutrons da geração anterior. Em outras palavras, se em cada grupo de energia onde ocorre fissão forem produzidos um determinado número médio de nêutrons $\nu'_g = \nu_g/k_{eff}$, então a equação apresenta um balanço perfeito de nêutrons em relação a geometria, dimensão e composição do sistema multiplicativo para a Equação de Difusão de Nêutrons Multigrupos [Petersen, 2011]. Se o reator for considerado de dimensão infinita, não ocorrerão fugas de nêutrons e denomina-se fator de multiplicação infinito (k_∞). No entanto, se o reator for admitido com dimensões finitas, contabilizam-se as fugas e intitula-se como fator de multiplicação efetivo (k_{eff}). Incluindo esse parâmetro, obtém-se a Equação Estacionária Multigrupo de Difusão de Nêutrons:

$$\begin{aligned} -\nabla \cdot D_g(\mathbf{r})\nabla\Phi_g(\mathbf{r}) + \Sigma_{rg}(\mathbf{r})\Phi_g(\mathbf{r}) &= \sum_{g'=1}^{g-1} \Sigma_{sg'g}(\mathbf{r})\Phi_{g'}(\mathbf{r}) \\ &+ \frac{1}{k_{eff}}\chi_g \sum_{g'=1}^G \nu_{g'}\Sigma_{fg'}(\mathbf{r})\Phi_{g'}(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.49)$$

A Equação 2.49 forma um sistema de G equações diferenciais parciais em que a solução $\Phi_g(\mathbf{r})$ é o fluxo escalar de nêutrons do grupo g de energia. Pode-se perceber, que a equação conterà um conjunto de autovalores dos quais apenas o maior deles, o dominante, equivale a uma autofunção $\Phi_g(\mathbf{r})$ não negativa e fisicamente relevante. Detalhes sobre o conjunto de autovalores e autovetores serão discutidos mais adiante. O valor do k_{eff} aponta o estado em que se encontra o reator, se $k_{eff} < 1$ o sistema está em estado subcrítico (população de nêutrons sendo reduzida de geração para geração), se $k_{eff} = 1$ está crítico (população de nêutrons estável de geração para geração) e se $k_{eff} > 1$ está supercrítico (população de nêutrons sendo aumentada de geração para geração).

Para compreender o significado físico do fator de multiplicação efetivo cita-se o seguinte exemplo: Suponha que o valor encontrado para k_{eff} para um determinado caso

particular é 1, 1. Isso indica que o termo fonte (fissão) é grande o suficiente para tornar o reator supercrítico. Com o intuito de tornar o sistema crítico, deve-se reduzir em 10% a fonte. Deste modo, a produção e as perdas equilibram-se. Isso pode ser realizado de inúmeras maneiras, como ajustando a absorção ou mudando o tamanho do reator. Tipicamente, já tem-se a dimensão do reator definida, então é mais apropriado controlar a criticalidade através do termo de absorção [Garland, 2014], por exemplo, movimentando as barras de controle no núcleo do reator.

2.3 Equação de Difusão de Nêutrons Monoenergéticos

Nesta seção, apresenta-se a Equação de Difusão de Nêutrons Monoenergéticos partindo do Modelo Multigrupos. A utilização desse modelo, embora simplificado, se justifica devido à sua importância na física de reatores, já que é consideravelmente fácil gerar soluções detalhadas e suficientemente realísticas. Cabe ressaltar que são obtidas quantidades não exatas para a distribuição de nêutrons, afinal o modelo contempla toda faixa de energia em um único grupo, além disso a difusão já é uma aproximação do Modelo de Transporte de Nêutrons. De fato, sabe-se que a energia dos nêutrons no reator pode variar entre $10^{-3}eV$ a 10^7eV e que as seções de choque dos nêutrons dependem sensivelmente de energias nesse intervalo [Heinen, 2009]. Contudo, para que não se perca tantas informações do Modelo Monoenergético, as seções de choque são calculadas corretamente. Esses cálculos são realizados numericamente utilizando uma estrutura refinada para o domínio energético multigrupos (100 grupos ou mais). A solução encontrada pode ser utilizada para determinar seções de choque ponderadas para a aplicação em modelos com poucos grupos de energia.

Partindo da Equação 2.47, pode-se obter a Equação de Difusão de Nêutrons Monoenergéticos admitindo as definições que seguem. Primeiramente, para o fluxo de nêutrons, tem-se que:

$$\Phi_g(\mathbf{r}, t) \equiv \int_{E_g}^{E_{g-1}} \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE \Rightarrow \Phi(\mathbf{r}, t) \equiv \int_0^{\infty} \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE. \quad (2.50)$$

Para o termo $1/v_g$, obtém-se:

$$\frac{1}{v_g} \equiv \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \frac{1}{v(E)} \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE} \Rightarrow \frac{1}{v} \equiv \frac{\int_0^{\infty} \frac{1}{v(E)} \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE}{\int_0^{\infty} \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE}. \quad (2.51)$$

Em seguida, define-se o termo difusivo como:

$$D_g(\mathbf{r}) \equiv \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} D(\mathbf{r}, E) \nabla \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \nabla \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE} \Rightarrow D(\mathbf{r}) \equiv \frac{\int_0^\infty D(\mathbf{r}, E) \nabla \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE}{\int_0^\infty \nabla \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE}. \quad (2.52)$$

Relembrando das Equações 2.25, 2.45 e 2.46, a absorção é dada por:

$$\Sigma_{ag}(\mathbf{r}) \equiv \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma_a(\mathbf{r}, E) \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE} \Rightarrow \Sigma_a(\mathbf{r}) \equiv \frac{\int_0^\infty \Sigma_a(\mathbf{r}, E) \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE}{\int_0^\infty \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE}, \quad (2.53)$$

e os termos de espalhamento, considerando apenas um grupo, simplificam-se desta maneira:

$$-\Sigma_{sg}(\mathbf{r}) \Phi_g(\mathbf{r}, t) + \sum_{g'=1}^{g-1} \Sigma_{sg'g}(\mathbf{r}) \Phi_{g'}(\mathbf{r}, t) \rightarrow -\Sigma_s(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}, t) + \Sigma_s(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (2.54)$$

Em outras palavras, considera-se no Modelo Monoenergético que não há perda nem ganhos de nêutrons pelo processo de espalhamento, pois assume-se que quando essa reação ocorre, o nêutron simplesmente volta para o grupo de energia único.

Para o espectro de fissão, tem-se:

$$\chi_g \equiv \int_{E_g}^{E_{g-1}} \chi(E) dE \Rightarrow \chi \equiv \int_0^\infty \chi(E) dE = 1, \quad (2.55)$$

e o termo de fissão:

$$\sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'}(\mathbf{r}) \Phi_{g'}(\mathbf{r}, t) \Rightarrow \nu \Sigma_f(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}, t). \quad (2.56)$$

Finalmente, a fonte externa torna-se:

$$Q_g^{ext}(\mathbf{r}, t) \Rightarrow Q^{ext}(\mathbf{r}, t). \quad (2.57)$$

Reunindo todas as definições anteriormente citadas, encontra-se a Equação de Difusão de Nêutrons Monoenergéticos:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \Phi(\mathbf{r}, t) = \nabla \cdot D(\mathbf{r}) \nabla \Phi(\mathbf{r}, t) - \Sigma_a(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}, t) + \nu \Sigma_f(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}, t) + Q^{ext}(\mathbf{r}, t). \quad (2.58)$$

2.3.1 Equação de Difusão de Nêutrons Monoenergéticos na criticalidade

Nesta seção, apresenta-se uma análise para o Modelo Monoenergético de Difusão de Nêutrons na criticalidade, ou seja, sem a variação temporal e sem fonte externa e, portanto, os nêutrons produzidos são oriundos somente da fissão nuclear. Então, a Equação

2.58 é escrita como:

$$-\nabla \cdot D(\mathbf{r})\nabla\Phi(\mathbf{r}) + \Sigma_a(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r}) = \nu\Sigma_f(\mathbf{r})\Phi(\mathbf{r}). \quad (2.59)$$

Vale destacar que se as propriedades $(\nu, \Sigma_f, \Sigma_a, D)$ forem consideradas constantes e independentes do fluxo, a Equação 2.59 torna-se uma equação linear homogênea. Deste modo, quando encontrada uma solução, uma combinação linear também é uma solução para a equação. Primeiramente, assume-se que o reator tem dimensões infinitas, fazendo com que todos pontos no espaço se tornem “equivalentes”, ou seja, o fluxo também vai ser constante ao longo do espaço. Além disso, o termo de fuga é desconsiderado. Portanto, a Equação Monoenergética em um meio infinito uniforme é dada por:

$$\nu\Sigma_f\Phi - \Sigma_a\Phi = 0, \quad (2.60)$$

em que a única solução é a trivial, a menos que:

$$\nu\Sigma_f = \Sigma_a, \quad (2.61)$$

ou seja, a composição e forma do reator sejam exatamente satisfeitas. A Equação 2.61 é denominada condição de criticalidade para um reator infinito uniforme.

Se a condição de criticalidade (Equação 2.61) não for satisfeita, não existirá uma solução não trivial. Para torná-la fisicamente relevante, introduz-se um fator (k_∞) que modifica a equação, como no caso multigrupos, obtendo-se:

$$\frac{\nu\Sigma_f}{k_\infty}\Phi - \Sigma_a\Phi = 0. \quad (2.62)$$

A Equação 2.62 tem solução não trivial garantida por:

$$k_\infty = \frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_a}. \quad (2.63)$$

Assim, o valor de k_∞ deve ser igual à unidade e qualquer desvio desse valor indica quanto o reator, em relação a composição original, está distante da criticalidade.

Posteriormente, analisa-se um reator de dimensões finitas uniforme. Desconsiderando a variação temporal da Equação 2.58 e a variação espacial dos parâmetros, exceto para o fluxo de nêutrons, que altera-se perto dos contornos, tem-se:

$$-D\nabla^2\Phi(\mathbf{r}) + \Sigma_a\Phi(\mathbf{r}) = \nu\Sigma_f\Phi(\mathbf{r}), \quad (2.64)$$

ou ainda:

$$-\nabla^2\Phi(\mathbf{r}) = B_G^2\Phi(\mathbf{r}), \quad (2.65)$$

onde:

$$B_G^2 = \frac{\nu\Sigma_f - \Sigma_a}{D}, \quad (2.66)$$

em que B_G^2 representa o *buckling* geométrico do reator [Garland, 2014]. Seu significado físico pode ser entendido reescrevendo a Equação 2.66 como:

$$B_G^2 = -\frac{\nabla^2\Phi(\mathbf{r})}{\Phi(\mathbf{r})}, \quad (2.67)$$

ou seja, o *buckling* geométrico fornece a informação relativa ao perfil da curva do fluxo de nêutrons ao longo das direções ortogonais do núcleo do reator, ou ainda, o perfil da fuga de nêutrons do sistema. Se o reator considerado é finito e homogêneo, a curvatura relativa é uniforme e negativa, caso contrário, como em reatores reais, as curvaturas relativas do fluxo e do *buckling* podem também ser positivas.

Usando a definição de B_G^2 , pode-se reescrever a Equação 2.64 como:

$$DB_G^2\Phi(\mathbf{r}) + \Sigma_a\Phi(\mathbf{r}) = \nu\Sigma_f\Phi(\mathbf{r}). \quad (2.68)$$

A Equação 2.68 tem as mesmas características da Equação 2.60, e sua única solução é a trivial, a menos que:

$$DB_G^2 + \Sigma_a = \nu\Sigma_f. \quad (2.69)$$

Então, do mesmo modo como citado anteriormente, isso significa que a composição e geometria do reator deve estar exatamente em equilíbrio. Logo, esta é a condição de criticalidade para um reator finito uniforme. Se essa condição não for satisfeita, não existirá solução não trivial. Assim como foi realizado para o meio infinito, pode-se garantir a existência de soluções não triviais introduzindo um parâmetro:

$$DB_G^2\Phi(\mathbf{r}) + \Sigma_a\Phi(\mathbf{r}) = \frac{\nu\Sigma_f}{k_{eff}}\Phi(\mathbf{r}), \quad (2.70)$$

em que a solução não trivial sempre é encontrada selecionando um valor para k_{eff} do tipo:

$$k_{eff} = \frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_a + DB_G^2}, \quad (2.71)$$

ou:

$$B_G^2 = \frac{\frac{\nu\Sigma_f}{k_{eff}} - \Sigma_a}{D}. \quad (2.72)$$

Deste modo, a equação da criticalidade monoenergética em meio finito pode operar em estado crítico com um fluxo não nulo. É fácil observar o sentido físico do fator de multiplicação efetivo na Equação 2.71, que é a razão da taxa de produção pela taxa de perdas (absorção e fugas). O valor da Expressão 2.71 deve ser igual à unidade no estado crítico. Assim sendo, pode-se escrever:

$$B_G^2 = \frac{\nu\Sigma_f - \Sigma_a}{D} = \frac{\frac{\nu\Sigma_f}{\Sigma_a} - 1}{\frac{D}{\Sigma_a}} = \frac{k_\infty - 1}{L_d^2}, \quad (2.73)$$

onde $L_d^2 = D/\Sigma_a$ representa o comprimento de difusão de nêutrons. No lado esquerdo da Equação 2.73, B_G^2 é uma quantidade geométrica, como explicado anteriormente. Já no lado direito da equação, tem-se uma função somente de propriedades nucleares, não dependendo de quantidades geométricas. Esta expressão, denominada *buckling* material (B_M^2), é definida por:

$$B_M^2 = \frac{k_\infty - 1}{L_d^2}. \quad (2.74)$$

Portanto, $B_G^2 = B_M^2$ que representa a condição de criticalidade.

Para concluir, considerando-se a Equação 2.70 linear com condições de contorno (fluxo zero na distância extrapolada), que serão detalhadas mais adiante, tem-se um problema de autovalor. Para melhor visualização, pode-se reescrevê-la como:

$$(\Sigma_a + DB_G^2)\Phi(\mathbf{r}) = \zeta\nu\Sigma_f\Phi(\mathbf{r}), \quad (2.75)$$

onde:

$$\zeta \equiv \frac{1}{k_{eff}}, \quad (2.76)$$

que representa o conjunto de autovalores do modelo. Como mencionado anteriormente, o mesmo vale para o caso monoenergético: há um conjunto de autovalores e autovetores distintos, onde o maior deles é o utilizado. Para compreender a razão de empregar o autovalor dominante, apresenta-se um exemplo considerando um reator na forma de uma placa de comprimento l na direção x e comprimento infinito nas direções y e z (unidimensional) [Garland, 2014]. A Figura 2.5 ilustra o esquema do reator.

Para esse caso específico, a Equação de Difusão pode ser escrita da seguinte maneira:

$$\frac{d^2\Phi(x)}{dx^2} + B_G^2\Phi(x) = 0. \quad (2.77)$$

A solução da Equação 2.77 pode ser facilmente encontrada como sendo $\Phi(x) =$

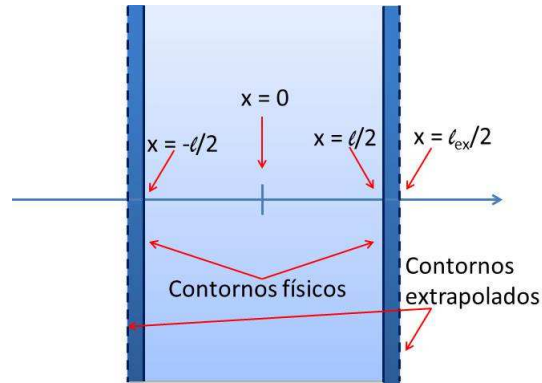


Figura 2.5 – Representação de um reator infinito do tipo placa plana.

$c_1 \text{sen}(B_G x) + c_2 \text{cos}(B_G x)$. Como o fluxo não deve ser negativo (da condição que o fluxo é finito $0 \leq \Phi(x) < \infty$), $\text{sen}(B_G x)$ não é uma solução fisicamente aceitável. Logo, a solução tem a forma $\Phi(x) = c_2 \text{cos}(B_G x)$, onde c_2 é uma constante. Diante disso, a condição de contorno do problema $\Phi(l_{ex}/2) = 0$ (onde l_{ex} é a distância extrapolada) deve ser satisfeita $\Phi(l_{ex}/2) = c_2 \text{cos}(B_G \cdot l_{ex}/2)$, resultando que os valores de B_G são limitados por $B_G = (n\pi)/l_{ex}$. A Figura 2.6 mostra os resultados para $n = 1, 2$ e 3 para o fluxo de nêutrons.

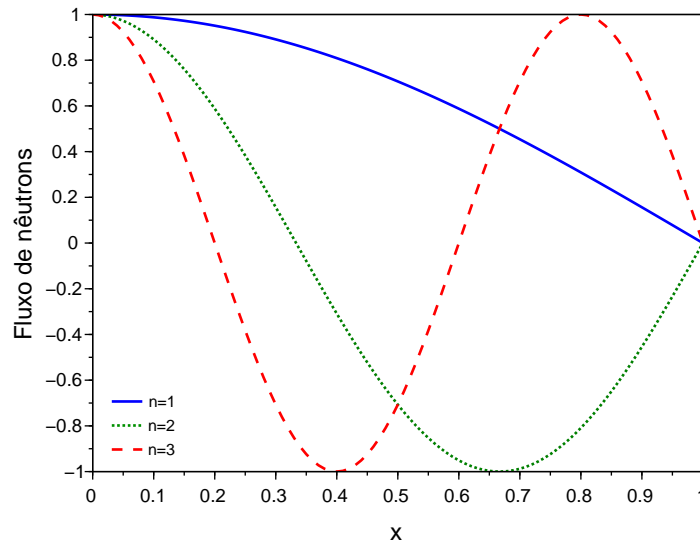


Figura 2.6 – Fluxo de nêutrons para $n=1, 2$ e 3 .

Observando os resultados apresentados na Figura 2.6, é possível perceber que a única solução aceitável é para $n = 1$, pois em todas as outras as funções assumem valores

negativos. Deste modo, o valor do *buckling* o qual fornece sentido físico é o menor dos matematicamente possíveis ($B_G^2 = (\pi/l_{ex})^2$), e o correspondente valor para k_{eff} é o maior deles (ver Equação 2.71).

2.4 Equações de Difusão de Nêutrons com dois grupos de energia

Na seção 2.1, apresentou-se a Equação de Difusão de Nêutrons Monoenergéticos e salientou-se que esse modelo apresenta limitações quanto à precisão, pois o intervalo de energia dos nêutrons pode variar de oito a nove ordens de magnitude (aproximadamente 0,01 eV até 10 MeV). Regiões de baixa energia ($< 0,1$ eV), onde a seção de choque de absorção decresce acentuadamente com o aumento da energia dos nêutrons (ver Figura 2.2), a seção de choque é inversamente proporcional à velocidade do nêutron. Já para regiões com energia entre 0,1 a 1000 eV, a seção de choque de absorção cresce muito rapidamente para certas energias e então cai novamente. Em outras palavras, pode-se interpretar esse comportamento analisando a quantidade de tempo que o nêutron permanece na “vizinhança” do núcleo: quanto maior a velocidade do nêutron, mais rapidamente ele se retira dessa “vizinhança” e menor a chance de ser absorvido e causar uma fissão. Então, como a maioria das fissões acontecem no grupo térmico, gerando nêutrons com energias elevadas, é comum utilizar dois grupos de energia. Desta maneira, denominam-se nêutrons térmicos os nêutrons com energias menores que 1 eV e nêutrons rápidos os nêutrons com energia entre 1 eV e 10 MeV. A Figura 2.7 mostra a divisão da energia dos nêutrons em dois grupos de energia para um reator térmico. Em vista disso, com dois grupos de energia e utilizando parâmetros ponderados através de muitos grupos com a Teoria de Transporte, a solução se torna suficientemente precisa para cálculos em difusão.

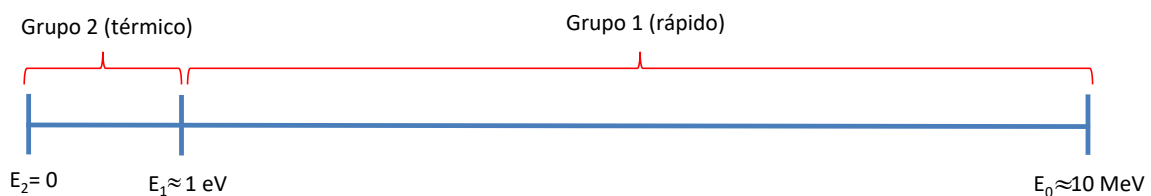


Figura 2.7 – Divisão da energia dos nêutrons em dois grupos de energia para um reator térmico.

Utilizando-se dois grupos de energia, por consequência, deve-se ter dois fluxos (Φ_1 e Φ_2), onde o primeiro representa o grupo rápido e o segundo, o grupo térmico. Também precisam-se de duas seções de choque macroscópicas de remoção (Σ_{r1} e Σ_{r2}), duas seções de choque macroscópicas de fissão (Σ_{f1} e Σ_{f2}), seus respectivos números de nêutrons produzidos na fissão (ν_1 e ν_2) e dois coeficientes de difusão (D_1 e D_2).

Diante disso, pode-se definir inicialmente:

$$\begin{bmatrix} \text{Fluxo} \\ \text{Rápido} \end{bmatrix} = \Phi_1(\mathbf{r}, t) = \int_{E_1}^{E_0} \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE, \quad (2.78)$$

e:

$$\begin{bmatrix} \text{Fluxo} \\ \text{Térmico} \end{bmatrix} = \Phi_2(\mathbf{r}, t) = \int_{E_2}^{E_1} \Phi(\mathbf{r}, E, t) dE. \quad (2.79)$$

Nesse caso, com dois grupos de energia, as fissões ocorrem no grupo térmico, em que os nêutrons possuem energia apropriada para causar esse tipo de reação. Os nêutrons gerados aparecem no grupo rápido, pois possuem grandes energias. Esse fato pode ser observado na Figura 2.8, que exhibe o comportamento do fluxo e do espectro de fissão para o modelo a dois grupos. Assim, para o espectro de fissão pode-se assumir que:

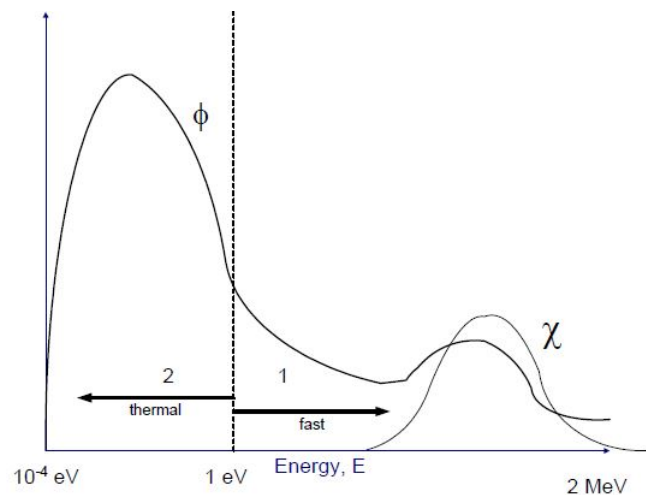


Figura 2.8 – Comportamento do fluxo e do espectro de fissão para o modelo a dois grupos. [Adaptado de Garland, 2014]

$$\chi_1 = \int_{E_1}^{E_0} \chi(E) dE = 1, \quad (2.80)$$

e:

$$\chi_2 = \int_{E_2}^{E_1} \chi(E) dE = 0. \quad (2.81)$$

Deste modo, a fonte de nêutrons rápidos ($S_{f1}(\mathbf{r}, t)$) provenientes da fissão nuclear é dada por:

$$S_{f1}(\mathbf{r}, t) = \nu_1 \Sigma_{f1}(\mathbf{r}) \Phi_1(\mathbf{r}, t) + \nu_2 \Sigma_{f2}(\mathbf{r}) \Phi_2(\mathbf{r}, t), \quad (2.82)$$

enquanto que, para a fonte de nêutrons térmicos ($S_{f2}(\mathbf{r}, t)$), tem-se:

$$S_{f2}(\mathbf{r}, t) = 0. \quad (2.83)$$

Admitindo que não ocorrem espalhamentos com *upscattering*, ou seja, os nêutrons do grupo térmico não espalham para o grupo rápido, então $\Sigma_{s21}(\mathbf{r}) = 0$. Portanto, a seção de choque macroscópica de espalhamento do grupo térmico pode ser escrita como:

$$\Sigma_{s2}(\mathbf{r}) = \Sigma_{s21}(\mathbf{r}) + \Sigma_{s22}(\mathbf{r}) \Rightarrow \Sigma_{s2}(\mathbf{r}) = \Sigma_{s22}(\mathbf{r}), \quad (2.84)$$

e por consequência, a seção de choque macroscópica de remoção para o grupo térmico torna-se:

$$\Sigma_{r2}(\mathbf{r}) = \Sigma_{T2}(\mathbf{r}) - \Sigma_{s22}(\mathbf{r}) = \Sigma_{a2}(\mathbf{r}). \quad (2.85)$$

Diante desses conceitos e simplificações, a Equação de Difusão de Nêutrons com dois grupos de energia é definida como:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_1} \frac{\partial \Phi_1(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \nabla \cdot D_1(\mathbf{r}) \nabla \Phi_1(\mathbf{r}, t) - \Sigma_{r1}(\mathbf{r}) \Phi_1(\mathbf{r}, t) + \nu_1 \Sigma_{f1}(\mathbf{r}) \Phi_1(\mathbf{r}, t) \\ &\quad + \nu_2 \Sigma_{f2}(\mathbf{r}) \Phi_2(\mathbf{r}, t), \\ \frac{1}{v_2} \frac{\partial \Phi_2(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \nabla \cdot D_2(\mathbf{r}) \nabla \Phi_2(\mathbf{r}, t) - \Sigma_{a2}(\mathbf{r}) \Phi_2(\mathbf{r}, t) + \Sigma_{s12}(\mathbf{r}) \Phi_1(\mathbf{r}, t). \end{aligned} \quad (2.86)$$

Observando as Equações 2.86, pode-se perceber que o fluxo rápido é o termo fonte para os nêutrons térmicos através da reação de espalhamento do grupo 1 para o 2, enquanto que o fluxo térmico é a fonte para o grupo rápido através da reação de fissão. Devido a esse fato, nêutrons térmicos e rápidos tem uma distribuição espacial diferente, além da energética, que já foi citada anteriormente. Isso se justifica pela razão de que a região dos moderadores tem a probabilidade maior de “desacelerar” os nêutrons rápidos e a região do combustível de causar fissões com os nêutrons térmicos, gerando nêutrons rápidos.

2.4.1 Equações de Difusão de Nêutrons com dois grupos de energia na criticalidade

Assim como procedeu-se para o caso monoenergético, primeiramente assume-se um reator de dimensões infinitas e uniforme. Então, todos pontos no espaço são “equivalentes”, ou seja, o fluxo de nêutrons e as propriedades são constantes no espaço. Além disso, o termo de fuga pode ser desconsiderado. Logo, pode-se escrever as Equações 2.86 como:

$$\begin{aligned}\Sigma_{r1}\Phi_1 &= \nu_1\Sigma_{f1}\Phi_1 + \nu_2\Sigma_{f2}\Phi_2, \\ \Sigma_{a2}\Phi_2 &= \Sigma_{s12}\Phi_1,\end{aligned}\tag{2.87}$$

as quais podem ser escritas mais claramente como um sistema linear homogêneo de duas equações da seguinte forma [Garland, 2014]:

$$\begin{aligned}(\Sigma_{r1} - \nu_1\Sigma_{f1})\Phi_1 - (\nu_2\Sigma_{f2})\Phi_2 &= 0, \\ (-\Sigma_{s12})\Phi_1 + (\Sigma_{a2})\Phi_2 &= 0.\end{aligned}\tag{2.88}$$

A Equação 2.88 tem solução não trivial somente se o seu determinante for igual a zero, ou seja:

$$(\Sigma_{r1} - \nu_1\Sigma_{f1})(\Sigma_{a2}) - (\nu_2\Sigma_{f2})(\Sigma_{s12}) = 0.\tag{2.89}$$

Assim como nos casos multigrupos e monoenergético, se esse balanço não for exatamente satisfeito, então não existe solução não trivial para o sistema. Portanto, novamente inclui-se o parâmetro k_∞ para proporcionar sentido físico ao sistema:

$$\begin{aligned}\left(\Sigma_{r1} - \frac{\nu_1\Sigma_{f1}}{k_\infty}\right)\Phi_1 - \left(\frac{\nu_2\Sigma_{f2}}{k_\infty}\right)\Phi_2 &= 0, \\ (-\Sigma_{s12})\Phi_1 + (\Sigma_{a2})\Phi_2 &= 0,\end{aligned}\tag{2.90}$$

e sua devida condição de criticalidade é:

$$\left(\Sigma_{r1} - \frac{\nu_1\Sigma_{f1}}{k_\infty}\right)(\Sigma_{a2}) - \left(\frac{\nu_2\Sigma_{f2}}{k_\infty}\right)(\Sigma_{s12}) = 0.\tag{2.91}$$

A partir da condição de criticalidade dada pela Equação 2.91, obtém-se o valor do fator de multiplicação infinito:

$$k_\infty = \frac{\nu_1\Sigma_{f1}\Sigma_{a2} + \nu_2\Sigma_{f2}\Sigma_{s12}}{\Sigma_{r1}\Sigma_{a2}}.\tag{2.92}$$

Posteriormente, realiza-se a mesma análise para um reator finito uniforme. Assim,

as Equações 2.86 tornam-se:

$$\begin{aligned} -D_1 \nabla^2 \Phi_1(\mathbf{r}) + \Sigma_{r1} \Phi_1(\mathbf{r}) &= \nu_1 \Sigma_{f1} \Phi_1(\mathbf{r}) + \nu_2 \Sigma_{f2} \Phi_2(\mathbf{r}), \\ -D_2 \nabla^2 \Phi_2(\mathbf{r}) + \Sigma_{a2} \Phi_2(\mathbf{r}) &= \Sigma_{s12} \Phi_1(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (2.93)$$

Pode-se buscar uma solução para o fluxo de nêutrons da seguinte forma [Garland, 2014]:

$$\begin{pmatrix} \Phi_1(\mathbf{r}) \\ \Phi_2(\mathbf{r}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A_1 \phi(\mathbf{r}) \\ A_2 \phi(\mathbf{r}) \end{pmatrix}, \quad (2.94)$$

ou seja, reescrevem-se os fluxos de maneira que se obtenha a amplitude dependente dos grupos vezes o fluxo independente dos grupos. Substituindo essa Equação 2.94 dentro da segunda Equação do sistema 2.93, obtém-se:

$$-D_2 A_2 \nabla^2 \phi(\mathbf{r}) + A_2 \Sigma_{a2} \phi(\mathbf{r}) = A_1 \Sigma_{s12} \phi(\mathbf{r}), \quad (2.95)$$

ou reescrevendo de outra forma:

$$\frac{\nabla^2 \phi(\mathbf{r})}{\phi(\mathbf{r})} = -\frac{A_1 \Sigma_{s12} - A_2 \Sigma_{a2}}{D_2 A_2}. \quad (2.96)$$

Assim como no caso monoenergético, analogamente à Equação 2.66, do lado direito da equação tem-se uma quantidade independente do espaço. Diante disso, pode-se escrever:

$$\nabla^2 \Phi_g(\mathbf{r}) = -B_G^2 \Phi_g(\mathbf{r}), \text{ para } g = 1, 2. \quad (2.97)$$

Retornando para a análise das Equações 2.93, pode-se reescrevê-las na forma de um sistema linear homogêneo, substituindo a definição de B_G^2 , obtendo-se:

$$\begin{aligned} (D_1 B_G^2 + \Sigma_{r1} - \nu_1 \Sigma_{f1}) \Phi_1(\mathbf{r}) - (\nu_2 \Sigma_{f2}) \Phi_2(\mathbf{r}) &= 0, \\ (-\Sigma_{s12}) \Phi_1(\mathbf{r}) + (D_2 B_G^2 + \Sigma_{a2}) \Phi_2(\mathbf{r}) &= 0, \end{aligned} \quad (2.98)$$

em que a única solução não trivial existirá se o determinante da Equação 2.98 for igual a zero, ou seja:

$$(D_1 B_G^2 + \Sigma_{r1} - \nu_1 \Sigma_{f1})(D_2 B_G^2 + \Sigma_{a2}) - (\Sigma_{s12})(\nu_2 \Sigma_{f2}) = 0. \quad (2.99)$$

Se essa condição não for satisfeita, então a solução trivial é a única solução do sistema.

Incluindo o fator de multiplicação efetivo a fim de obter soluções não triviais, obtêm-se:

$$\begin{aligned} \left(D_1 B_G^2 + \Sigma_{r1} - \frac{\nu_1 \Sigma_{f1}}{k_{eff}}\right) \Phi_1(\mathbf{r}) - \left(\frac{\nu_2 \Sigma_{f2}}{k_{eff}}\right) \Phi_2(\mathbf{r}) &= 0, \\ (-\Sigma_{s12}) \Phi_1(\mathbf{r}) + (D_2 B_G^2 + \Sigma_{a2}) \Phi_2(\mathbf{r}) &= 0, \end{aligned} \quad (2.100)$$

onde seu determinante, que proporciona a condição de criticalidade, é dado por:

$$\left(D_1 B_G^2 + \Sigma_{r1} - \frac{\nu_1 \Sigma_{f1}}{k_{eff}}\right) (D_2 B_G^2 + \Sigma_{a2}) - (\Sigma_{s12}) \left(\frac{\nu_2 \Sigma_{f2}}{k_{eff}}\right) = 0. \quad (2.101)$$

Logo:

$$k_{eff} = \frac{(\nu_1 \Sigma_{f1})(D_2 B_G^2 + \Sigma_{a2}) + (\Sigma_{s12})(\nu_2 \Sigma_{f2})}{(D_1 B_G^2 + \Sigma_{r1})(D_2 B_G^2 + \Sigma_{a2})}. \quad (2.102)$$

2.5 Cinética Espacial de Difusão de Nêutrons

Os modelos propostos nas seções anteriores ainda não mostram explicitamente a contribuição dos nêutrons atrasados para a geração de nêutrons no reator nuclear. Desta forma, essa seção tem a finalidade de apresentar os modelos matemáticos do comportamento transiente do fluxo de nêutrons incluindo explicitamente a contribuição dos mesmos.

Nem todos nêutrons são gerados simultaneamente com a fissão, há os nêutrons atrasados que surgem após a fissão nuclear, quando há a origem de fragmentos instáveis que decaem e os emitem. Esses núclídeos que sofrem decaimento são chamados precursores de nêutrons atrasados. Quando esses nêutrons surgem, possuem energia baixa (aproximadamente 0,5 MeV enquanto que os nêutrons prontos gerados na fissão possuem aproximadamente 2 MeV) e percorrem uma distância mais curta comparados aos nêutrons rápidos, o que gera uma menor probabilidade de fuga do núcleo do reator. Apesar de representarem menos que 1% da população total de nêutrons no reator, eles exercem um papel muito importante no controle do núcleo, pois mudam drasticamente o comportamento do sistema. Outro fator importante a ser destacado, é que possuem uma probabilidade menor de provocar fissões rápidas do que os nêutrons rápidos por sua energia estar abaixo do mínimo necessário para essa reação. Vale destacar que a fissão por bombardeamento com nêutrons acontece se um desses nêutrons for absorvido pelo núcleo e a soma da energia cinética do nêutron com a energia de ligação do núcleo for maior que o limiar de energia para a fissão.

Existe um grande número de isótopos de produtos de fissão que decaem pela emissão de nêutrons, que podem ser reunidos em uma “família” de precursores de nêutrons

atrasados. Em estudos de cinética de nêutrons, é suficiente agrupar esses fragmentos instáveis em seis grupos (C_1, C_2, C_3, C_4, C_5 e C_6) de acordo com as escalas de tempo (meias-vidas), que os conferem propriedades semelhantes. Portanto, cada grupo i é caracterizado pelos seguintes parâmetros nucleares:

- β_i : fração de nêutrons atrasados no grupo i de precursores;
- λ_i : constante de decaimento radioativo do grupo i de precursores, que representa a fração do número inicial de átomos do precursor que decai em determinada unidade de tempo.

Para relacionar um e seis grupos de precursores de nêutrons atrasados, pode-se utilizar a relação de equivalência ($\frac{1}{\lambda} = \sum_{i=1}^6 \frac{1}{\lambda_i}$). Na Tabela 2.1, apresentam-se valores de coeficientes típicos utilizados para os precursores de nêutrons atrasados.

Tabela 2.1 – Parâmetros cinéticos para o U-235. [Fonte: Adaptada de Garland, 2014]

Grupo i	Meia-vida (s)	$\lambda_i(s^{-1})$	β_i
1	54,51	0,0127	0,0002641
2	21,84	0,031	0,00148035
3	6,0	0,1155	0,0013066
4	2,23	0,310	0,00282865
5	0,496	1,397	0,0008896
6	0,179	3,871	0,0001807

Conforme os valores da Tabela 2.1, pode-se perceber que $\beta = \sum_{i=1}^6 \beta_i = 0,00695$. Isso significa que os nêutrons atrasados representam 0,695% dos nêutrons produzidos pela fissão. Apesar de ser uma porcentagem relativamente pequena, em longas escalas de tempo (até um minuto) em relação às escalas de tempo da fissão, esses nêutrons podem mudar drasticamente o comportamento do reator, pois garantem a segurança de sua operação através do controle de reações em cadeia, na medida em que atrasam a resposta do reator.

Para incluí-los nas equações previamente apresentadas, primeiramente analisa-se a variação da concentração dos precursores de nêutrons atrasados no reator, após deve-se adicionar no termo que representa as fissões a contribuição desses nêutrons na Equação de Difusão Dependente do Tempo 2.26.

Define-se a concentração dos precursores de nêutrons atrasados como:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Número esperado dos } i\text{-ésimos} \\ \text{precursores em } d^3\mathbf{r} \\ \text{em torno de } \mathbf{r} \text{ que sempre} \\ \text{emitem um nêutron atrasado} \end{array} \right] = C_i(\mathbf{r}, t)d^3\mathbf{r}, \quad (2.103)$$

para $i = 1 : I$. A expressão que determina a variação da concentração de emissores de nêutrons atrasados $C_i(\mathbf{r}, t)$ em uma posição \mathbf{r} e instante t , deve incluir perda e produção:

$$\int_V \frac{\partial C_i(\mathbf{r}, t)d^3\mathbf{r}}{\partial t} = \left[\begin{array}{c} \text{Número esperado} \\ \text{de precursores} \\ \text{produzidos em } V \\ \text{no instante } t \end{array} \right] - \left[\begin{array}{c} \text{Número de} \\ \text{precursores} \\ \text{decaindo em } V \\ \text{no instante } t \end{array} \right]. \quad (2.104)$$

A produção dos precursores ocorre através da fissão, que pode ser contabilizada pela multiplicação da fração de nêutrons atrasados pela taxa de produção de nêutrons por fissão:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Número esperado} \\ \text{de precursores} \\ \text{produzidos em } V \\ \text{no instante } t \end{array} \right] = \int_V \left[\int \beta_i \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' \right] d^3\mathbf{r}. \quad (2.105)$$

Já a perda é ocasionada pelo decaimento radioativo, que pode ser determinada pela multiplicação da concentração do precursor $C_i(\mathbf{r}, t)$ e sua constante de decaimento λ_i correspondente:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Número de} \\ \text{precursores} \\ \text{decaindo em } V \\ \text{no instante } t \end{array} \right] = \int_V [C_i(\mathbf{r}, t) \lambda_i] d^3\mathbf{r}. \quad (2.106)$$

Substituindo as Equações 2.105 e 2.106 na Equação 2.104:

$$\int_V d^3\mathbf{r} \left[\frac{\partial C_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} - \int \beta_i \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' + \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) \right] = 0. \quad (2.107)$$

Deste modo, o integrando é nulo pois o volume foi escolhido arbitrariamente. Assim, a equação que expressa a variação da concentração dos precursores em um reator nuclear é

dada por:

$$\frac{\partial C_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \int \beta_i \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' - \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t), \quad (2.108)$$

para $i = 1 : I$.

Agora, acrescenta-se na Equação 2.26 a contribuição dos nêutrons atrasados. Primeiramente, o número de precursores de nêutrons atrasados que decaem e contribuem para a fissão:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Produção dos} \\ \text{nêutrons atrasados} \end{array} \right] = \sum_i f_i(E) \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t), \quad (2.109)$$

onde $f_i(E)$ representa a probabilidade de um nêutron atrasado apresentar energia entre E e $E + dE$ como resultado do decaimento do i -ésimo emissor. Vale destacar que:

$$\int f_i(E) dE = 1. \quad (2.110)$$

Em seguida, define-se o número de nêutrons produzidos pela fissão subtraído da contribuição dos nêutrons oriundos de decaimentos dos produtos de fissão, ou seja, somente os nêutrons prontos:

$$\left[\begin{array}{c} \text{Produção dos} \\ \text{nêutrons prontos} \end{array} \right] = \int (1 - \beta) \chi(E) \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE'. \quad (2.111)$$

Portanto, as Equações de Difusão Dependente do Tempo com tratamento contínuo da energia, acrescentando-se a contribuição dos nêutrons atrasados, pode ser escrita como:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v(E)} \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, E, t)}{\partial t} &= \nabla \cdot D(\mathbf{r}, E, t) \nabla \Phi(\mathbf{r}, E, t) - \Sigma_T(\mathbf{r}, E, t) \Phi(\mathbf{r}, E, t) \\ &\quad + \int (1 - \beta) \chi(E) \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' \\ &\quad + \int \Sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E, t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' + \sum_i f_i(E) \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) + Q^{ext}(\mathbf{r}, E, t), \\ \frac{\partial C_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \int \beta_i \nu(E') \Sigma_f(\mathbf{r}, E', t) \Phi(\mathbf{r}, E', t) dE' - \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (2.112)$$

para $i = 1 : I$.

Já para as Equações de Difusão de Nêutrons Multigrupos definidas em 2.47, considerando os nêutrons atrasados, são dadas por:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{\partial \Phi_g(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \nabla \cdot D_g(\mathbf{r}, t) \nabla \Phi_g(\mathbf{r}, t) - \Sigma_{rg}(\mathbf{r}, t) \Phi_g(\mathbf{r}, t) + \sum_{g'=1}^{g-1} \Sigma_{sg'g}(\mathbf{r}, t) \Phi_{g'}(\mathbf{r}, t) \\ &\quad + \chi_g(1 - \beta) \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'}(\mathbf{r}, t) \Phi_{g'}(\mathbf{r}, t) + \sum_i f_{ig} \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) + Q_g^{ext}(\mathbf{r}, t), \\ \frac{\partial C_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \sum_{g'=1}^G \beta_i \nu \Sigma_{fg'}(\mathbf{r}, t) \Phi_{g'}(\mathbf{r}, t) - \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (2.113)$$

para $i = 1 : I$.

No caso monoenergético, acrescentando a contribuição dos nêutrons atrasados na Equação 2.58, obtêm-se:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \nabla \cdot D(\mathbf{r}) \nabla \Phi(\mathbf{r}, t) - \Sigma_a(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}, t) + (1 - \beta) \nu \Sigma_f(\mathbf{r}) \Phi(\mathbf{r}, t) + \\ &\quad \sum_i \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) + Q^{ext}(\mathbf{r}, t), \\ \frac{\partial C_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \beta_i \nu \Sigma_f(\mathbf{r}, t) \Phi(\mathbf{r}, t) - \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (2.114)$$

para $i = 1 : I$.

Por fim, utilizando-se dois grupos de energia, conforme Equação 2.86, e novamente incluindo os nêutrons atrasados, chega-se em:

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_1} \frac{\partial \Phi_1(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \nabla \cdot D_1(\mathbf{r}) \nabla \Phi_1(\mathbf{r}, t) - \Sigma_{r1}(\mathbf{r}) \Phi_1(\mathbf{r}, t) + (1 - \beta) (\nu_1 \Sigma_{f1}(\mathbf{r}) \Phi_1(\mathbf{r}, t) \\ &\quad + \nu_2 \Sigma_{f2}(\mathbf{r}) \Phi_2(\mathbf{r}, t)) + \sum_i \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t), \\ \frac{1}{v_2} \frac{\partial \Phi_2(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \nabla \cdot D_2(\mathbf{r}) \nabla \Phi_2(\mathbf{r}, t) - \Sigma_{a2}(\mathbf{r}) \Phi_2(\mathbf{r}, t) + \Sigma_{s12}(\mathbf{r}) \Phi_1(\mathbf{r}, t), \\ \frac{\partial C_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} &= \beta_i (\nu_1 \Sigma_{f1}(\mathbf{r}) \Phi_1(\mathbf{r}, t) + \nu_2 \Sigma_{f2}(\mathbf{r}) \Phi_2(\mathbf{r}, t)) - \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t), \end{aligned} \quad (2.115)$$

para $i = 1 : I$.

Nas equações de criticalidade ignora-se a diferenciação de nêutrons prontos e atrasados, pois com a invariância no tempo não importa quando os nêutrons estão “nascendo”, mas sim quantos.

2.6 Condições de contorno clássicas de Difusão de Nêutrons

Definidas as Equações de Difusão de Nêutrons, é necessário especificar as condições de contorno espacial e interface em regiões nas quais o fluxo satisfaz as equações, para determinar as constantes arbitrárias.

Primeiramente, precisa-se respeitar os requisitos físicos: a solução deve ser real, não negativa, ter um único valor e o fluxo deve ser diferente de infinito, exceto para pontos singulares das distribuições da fonte.

A equação de difusão geralmente é resolvida em meios com altas densidades, como em moderadores de nêutrons (água e grafite, por exemplo) e pode ser limitado pelo ar. O livre caminho médio do nêutron no ar, por ex., é muito maior que na região do moderador, podendo assumi-lo como vácuo nos cálculos de distribuição do fluxo de nêutrons [Contributors, 2018]. Esta condição supõe que os nêutrons não podem entrar uma vez

que saíram do meio. Considerando que os nêutrons não são refletidos do vácuo para o volume, pode-se derivar da Lei de Fick a seguinte condição:

$$\frac{1}{\Phi} \frac{d\Phi}{dn} \approx -\frac{3}{2,1312\lambda_{tr}} = \frac{-1}{l_{ex}}, \quad (2.116)$$

onde l_{ex} é a distância extrapolada, $d\Phi/dn$ é derivada normal da superfície e:

$$l_{ex} = 0,7104\lambda_{tr}, \quad (2.117)$$

onde λ_{tr} é o livre caminho médio do meio obtido da Teoria de Transporte. A interpretação geométrica da Equação 2.116 é que o fluxo de nêutrons relativo perto do contorno tem um declive de $-1/l_{ex}$, ou seja, o fluxo extrapola linearmente para 0 a uma distância l_{ex} além do contorno ($d\Phi/dx = 0$ em $x = l_{ex}$). Considerando que o fluxo é nulo ($\Phi = 0$) na distância extrapolada, e que l_{ex} é muito menor que as dimensões do sistema, então o fluxo de nêutrons obtido pelas Equações de Difusão desaparece em uma pequena distância extrapolada a partir do contorno. Desta maneira, lembrando da Equação 2.13, que pode ser escrita como $D = \lambda_{tr}/3$, e assumindo que $D \sim 1cm$, obtém-se:

$$l_{ex} = 0,7104\lambda_{tr} \sim 0,7104 \times 3 \sim 2cm, \quad (2.118)$$

que é muito menor que a dimensão do reator. Portanto, assume-se que $\Phi(\text{superfície}) \approx 0$, ou seja, desaparece no contorno do sistema.

Outras condições necessárias são as que especificam as condições na interface entre dois meios diferentes. Sabendo que o núcleo do reator é heterogêneo, ou seja, apresenta regiões distintas (combustível, barras de controle, refrigerante, entre outros) e que não ocorre acumulação de nêutrons nas interfaces (desde que não haja uma fonte), é preciso impor uma condição de continuidade entre as interfaces para o fluxo e para a corrente de nêutrons. Logo:

$$\begin{aligned} \Phi_A &= \Phi_B, \\ (\mathbf{J}_A)_n &= (\mathbf{J}_B)_n, \end{aligned} \quad (2.119)$$

onde Φ_A e Φ_B são os fluxos de nêutrons nas regiões A e B, respectivamente, e $(\mathbf{J}_A)_n$ e $(\mathbf{J}_B)_n$ são as componentes normais da corrente de nêutrons nas regiões A e B, respectivamente. Mais detalhes sobre as condições de interface serão abordados no capítulo da construção da solução do problema heterogêneo.

3 SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DE CINÉTICA ESPACIAL DE NÊUTRONS UNIDIMENSIONAIS EM UM DOMÍNIO HOMOGÊNEO

3.1 Aplicação da Metodologia

A metodologia, apresentada nesta seção, consiste na determinação da solução com representação analítica da Equação de Cinética Espacial de Difusão de Nêutrons, com dois grupos de energia, seis grupos de precursores de nêutrons atrasados, em geometria cartesiana unidimensional e domínio homogêneo. A ideia resume-se em: expandir o fluxo escalar de nêutrons e as concentrações de precursores de nêutrons atrasados em séries de Taylor na variável espacial, utilizando a metodologia discutida por Ceolin, 2014; Ceolin et al., 2015a; Schramm, 2016, mas deixando a dependência temporal nos coeficientes dessas séries (diferente dos métodos citados); substituir essas expansões nas Equações de Cinética Espacial de Difusão de Nêutrons, encontrando-se um conjunto de EDO's recursivo, onde aplica-se o Método da Decomposição de Adomian modificado na variável temporal [Adomian, 1988, 1994; Adominan e Rach, 1996; Petersen, 2011; Da Silva et al., 2014] com desacoplamento das equações com diferentes escalas de tempo características, que são então subsequentemente corrigidas por um esquema recursivo com os termos fonte. Assim, é possível calcular a solução para qualquer instante sem a necessidade da integração sucessiva no tempo, encontrando-se a solução desejada e superando por esse procedimento o caráter de rigidez da solução. A Figura 3.1 apresenta o resumo da aplicação da metodologia proposta com os passos a serem desenvolvidos nesta seção.

Iniciando a metodologia, parte-se da Equação 2.115 admitindo-se que alguns parâmetros nucleares são constantes devido o domínio ser homogêneo, obtendo-se:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{v_1} \frac{\partial \Phi_1(x,t)}{\partial t} &= D_1 \nabla^2 \Phi_1(x,t) - \Sigma_{r1} \Phi_1(x,t) + (1 - \beta)(\nu_1 \Sigma_{f1} \Phi_1(x,t) + \nu_2 \Sigma_{f2} \Phi_2(x,t)) \\
 &\quad + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i(x,t), \\
 \frac{1}{v_2} \frac{\partial \Phi_2(x,t)}{\partial t} &= D_2 \nabla^2 \Phi_2(x,t) - \Sigma_{a2}(t) \Phi_2(x,t) + \Sigma_{s12} \Phi_1(x,t), \\
 \frac{\partial C_i(x,t)}{\partial t} &= \beta_i (\nu_1 \Sigma_{f1} \Phi_1(x,t) + \nu_2 \Sigma_{f2} \Phi_2(x,t)) - \lambda_i C_i(x,t),
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

onde $i = 1 : 6$. O termo $\Sigma_{a2}(t)$ na segunda Equação do sistema 3.1 foi escrito com a dependência temporal, pois a maioria dos casos transientes na literatura consideram a variação nesse parâmetro. No entanto, é possível aplicar a metodologia com a variação temporal em qualquer outro parâmetro, ou mesmo, considerá-lo constante. As condições

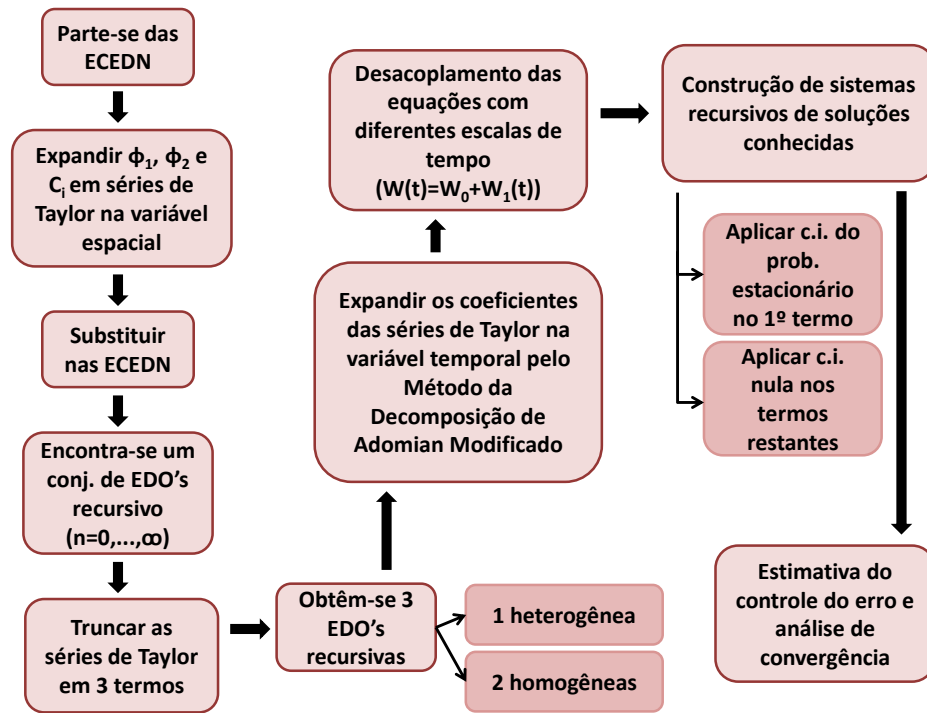


Figura 3.1 – Resumo da metodologia proposta.

iniciais do problema são dadas por:

$$\begin{aligned}
 \Phi_1(x, 0) &= \Phi_{1,0}(x), \\
 \Phi_2(x, 0) &= \Phi_{2,0}(x), \\
 C_i(x, 0) &= \frac{\beta_i}{\lambda_i} [\nu_1 \Sigma_{f1} \Phi_{1,0}(x) + \nu_2 \Sigma_{f2} \Phi_{2,0}(x)]
 \end{aligned} \tag{3.2}$$

e a condição de contorno:

$$a\Phi_g(x, t) + b \frac{\partial \Phi_g(x, t)}{\partial x} = 0, \tag{3.3}$$

onde $g = 1, 2$ e $|a| + |b| > 0$.

O domínio espacial global é segmentado em um conjunto de subdomínios suficientemente pequenos, onde em cada um deles a solução é representada por uma expansão em série de Taylor na variável espacial, em que o ponto expandido é centralizado no respectivo subdomínio de tamanho $2\Delta x$, como pode ser visto na Figura 3.2.

As expansões das variáveis Φ_1 , Φ_2 e C_i em séries de Taylor no espaço são dadas

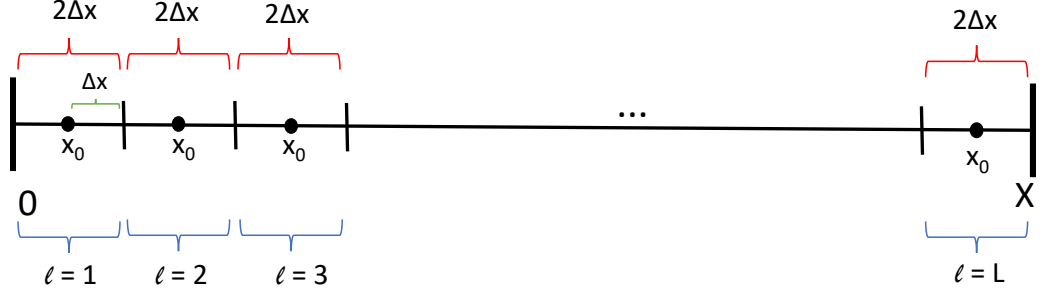


Figura 3.2 – Segmentação do domínio espacial.

por:

$$\begin{aligned}
 \Phi_1^{[l]}(x, t) &= \sum_{n=0}^{\infty} A_n^{[l]}(t)(x - x_0)^n, \\
 \Phi_2^{[l]}(x, t) &= \sum_{n=0}^{\infty} B_n^{[l]}(t)(x - x_0)^n, \\
 C_i^{[l]}(x, t) &= \sum_{n=0}^{\infty} C_{i,n}^{[l]}(t)(x - x_0)^n,
 \end{aligned} \tag{3.4}$$

onde x_0 é o centro do intervalo espacial de tamanho $2\Delta x$; $A_n^{[l]}(t)$, $B_n^{[l]}(t)$ e $C_{i,n}^{[l]}(t)$ são os coeficientes da expansão em séries de Taylor para o fluxo rápido, térmico e as concentrações de precursores de nêutrons atrasados do grupo i , respectivamente, e onde $l = 1 : L$ é o número da célula no espaço. Destaca-se que a dependência do tempo se encontra nos coeficientes das expansões em séries de Taylor, diferentemente dos trabalhos de Ceolin et al., 2015b, 2014, 2015a; Schramm, 2016, sendo assim, uma nova proposta de solução diante da literatura existente. Isto implica que será obtido um sistema recursivo de equações diferenciais ordinárias dependentes do tempo, que posteriormente será solucionado através do Método da Decomposição de Adomian modificado. Esta mudança na expansão da série propicia a utilização em conjunto da expansão em série de Taylor com o Método da Decomposição modificado.

Aplicando as expansões dadas pela Equação 3.4 na primeira Equação do sistema definido em 3.1, tem-se:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{\nu_1} \frac{\partial}{\partial t} \sum_{n=0}^{\infty} A_n^{[l]}(t)(x - x_0)^n &= D_1 \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2)A_{n+2}^{[l]}(t)(x - x_0)^n \\
 -\Sigma_{r1} \sum_{n=0}^{\infty} A_n^{[l]}(t)(x - x_0)^n &+ (1 - \beta)(\nu_1 \Sigma_{f1} \sum_{n=0}^{\infty} A_n^{[l]}(t)(x - x_0)^n \\
 +\nu_2 \Sigma_{f2} \sum_{n=0}^{\infty} B_n^{[l]}(t)(x - x_0)^n &+ \sum_{i=1}^6 \lambda_i \sum_{n=0}^{\infty} C_{i,n}^{[l]}(t)(x - x_0)^n,
 \end{aligned} \tag{3.5}$$

onde:

$$\nabla^2 \sum_{n=0}^{\infty} A_n^{[l]}(t)(x-x_0)^n = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2)A_{n+2}^{[l]}(t)(x-x_0)^n. \quad (3.6)$$

Isolando as expansões em séries de Taylor definidas na Equação 3.4 na Equação 3.5, encontra-se:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \sum_{n=0}^{\infty} A_n^{[l]}(t)(x-x_0)^n - \sum_{n=0}^{\infty} A_n^{[l]}(t)(x-x_0)^n (-\Sigma_{r1}v_1 + (1-\beta)\nu_1\Sigma_{f1}v_1) \\ & - \sum_{n=0}^{\infty} B_n^{[l]}(t)(x-x_0)^n ((1-\beta)\nu_2\Sigma_{f2}v_1) - \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{C}_{i,n}^{[l]}(t)(x-x_0)^n (v_1 \sum_{i=1}^6 \lambda_i) \\ & = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2)A_{n+2}^{[l]}(t)(x-x_0)^n (D_1v_1). \end{aligned} \quad (3.7)$$

Para a Equação 3.7 ser satisfeita para todo x é necessário que o coeficiente de cada potência de x seja nulo, pois diferentes potências de n em x são linearmente independentes. Deste modo, obtém-se:

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} A_n^{[l]}(t) - A_n^{[l]}(t)(-\Sigma_{r1}v_1 + (1-\beta)\nu_1\Sigma_{f1}v_1) - B_n^{[l]}(t)((1-\beta)\nu_2\Sigma_{f2}v_1) \\ & - \mathcal{C}_{i,n}^{[l]}(t)(v_1 \sum_{i=1}^6 \lambda_i) = (n+1)(n+2)A_{n+2}^{[l]}(t)(D_1v_1). \end{aligned} \quad (3.8)$$

Em seguida, utilizando a segunda Equação do sistema 3.1 e substituindo as expansões da Equação 3.4, encontra-se:

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v_2} \frac{\partial}{\partial t} \sum_{n=0}^{\infty} B_n^{[l]}(t)(x-x_0)^n = D_2 \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2)B_{n+2}^{[l]}(t)(x-x_0)^n \\ & - \Sigma_{a2}(t) \sum_{n=0}^{\infty} B_n^{[l]}(t)(x-x_0)^n + \Sigma_{s12} \sum_{n=0}^{\infty} A_n^{[l]}(t)(x-x_0)^n, \end{aligned} \quad (3.9)$$

onde:

$$\nabla^2 \sum_{n=0}^{\infty} B_n^{[l]}(t)(x-x_0)^n = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2)B_{n+2}^{[l]}(t)(x-x_0)^n. \quad (3.10)$$

Isolando as expansões em séries de Taylor na Equação 3.9, tem-se:

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \sum_{n=0}^{\infty} B_n^{[l]}(t)(x-x_0)^n - \sum_{n=0}^{\infty} B_n^{[l]}(t)(x-x_0)^n (-\Sigma_{a2}(t)v_2) \\ & - \sum_{n=0}^{\infty} A_n^{[l]}(t)(x-x_0)^n (\Sigma_{s12}v_2) = \sum_{n=0}^{\infty} (n+1)(n+2)B_{n+2}^{[l]}(t)(x-x_0)^n (D_2v_2). \end{aligned} \quad (3.11)$$

Da mesma maneira, para a Equação 3.11 ser satisfeita para todo x é necessário que o coeficiente de cada potência de x seja nulo, ou seja:

$$\frac{d}{dt} B_n^{[l]}(t) - A_n^{[l]}(t)(\Sigma_{s12}v_2) - B_n^{[l]}(t)(-\Sigma_{a2}(t)v_2) = (n+1)(n+2)B_{n+2}^{[l]}(t)(D_2v_2). \quad (3.12)$$

Aplicando o mesmo procedimento para a última Equação do sistema 3.1, encontra-

se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{C}_{i,n}^{[l]}(t)(x-x_0)^n &= \beta_i(\nu_1 \Sigma_{f1} \sum_{n=0}^{\infty} A_n^{[l]}(t)(x-x_0)^n + \\ &\nu_2 \Sigma_{f2} \sum_{n=0}^{\infty} B_n^{[l]}(t)(x-x_0)^n) - \lambda_i \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{C}_{i,n}^{[l]}(t)(x-x_0)^n. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Isolando as expansões aplicadas na Equação 3.13, tem-se:

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{C}_{i,n}^{[l]}(t)(x-x_0)^n - \sum_{n=0}^{\infty} A_n^{[l]}(t)(x-x_0)^n(\beta_i \nu_1 \Sigma_{f1}) \\ - \sum_{n=0}^{\infty} B_n^{[l]}(t)(x-x_0)^n(\beta_i \nu_2 \Sigma_{f2}) - \sum_{n=0}^{\infty} \mathcal{C}_{i,n}^{[l]}(t)(x-x_0)^n(-\lambda_i) = 0, \end{aligned} \quad (3.14)$$

e portanto:

$$\frac{d}{dt} \mathcal{C}_{i,n}^{[l]}(t) - A_n^{[l]}(t)(\beta_i \nu_1 \Sigma_{f1}) - B_n^{[l]}(t)(\beta_i \nu_2 \Sigma_{f2}) - \mathcal{C}_{i,n}^{[l]}(t)(-\lambda_i) = 0. \quad (3.15)$$

Reescrevendo as Equações 3.8, 3.12 e 3.15 na forma matricial, obtém-se um sistema recursivo válido para qualquer n e cada instante de tempo de equações diferenciais ordinárias com os coeficientes da série de Taylor dependentes do tempo, definido como:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \begin{bmatrix} A_n^{[l]}(t) \\ B_n^{[l]}(t) \\ \mathcal{C}_{1,n}^{[l]}(t) \\ \mathcal{C}_{2,n}^{[l]}(t) \\ \mathcal{C}_{3,n}^{[l]}(t) \\ \mathcal{C}_{4,n}^{[l]}(t) \\ \mathcal{C}_{5,n}^{[l]}(t) \\ \mathcal{C}_{6,n}^{[l]}(t) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -\Sigma_{r1}v_1 + (1-\beta)\nu_1\Sigma_{f1}v_1 & (1-\beta)\nu_2\Sigma_{f2}v_1 & \lambda_1v_1 & \lambda_2v_1 & \lambda_3v_1 \\ \Sigma_{s12}v_2 & -\Sigma_{a2}(t)v_2 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_1\nu_1\Sigma_{f1} & \beta_1\nu_2\Sigma_{f2} & -\lambda_1 & 0 & 0 \\ \beta_2\nu_1\Sigma_{f1} & \beta_2\nu_2\Sigma_{f2} & 0 & -\lambda_2 & 0 \\ \beta_3\nu_1\Sigma_{f1} & \beta_3\nu_2\Sigma_{f2} & 0 & 0 & -\lambda_3 \\ \beta_4\nu_1\Sigma_{f1} & \beta_4\nu_2\Sigma_{f2} & 0 & 0 & 0 \\ \beta_5\nu_1\Sigma_{f1} & \beta_5\nu_2\Sigma_{f2} & 0 & 0 & 0 \\ \beta_6\nu_1\Sigma_{f1} & \beta_6\nu_2\Sigma_{f2} & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix} \cdot \begin{bmatrix} A_n^{[l]}(t) \\ B_n^{[l]}(t) \\ \mathcal{C}_{1,n}^{[l]}(t) \\ \mathcal{C}_{2,n}^{[l]}(t) \\ \mathcal{C}_{3,n}^{[l]}(t) \\ \mathcal{C}_{4,n}^{[l]}(t) \\ \mathcal{C}_{5,n}^{[l]}(t) \\ \mathcal{C}_{6,n}^{[l]}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} v_1 D_1(n+1)(n+2)A_{n+2}^{[l]}(t) \\ v_2 D_2(n+1)(n+2)B_{n+2}^{[l]}(t) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Cabe ressaltar que os coeficientes $A_{n+2}^{[l]}(t)$ e $B_{n+2}^{[l]}(t)$ advindos do termo de fuga

das equações para o fluxo rápido e térmico foram colocados no termo fonte do sistema de EDO's. Cumpre observar que o sistema de Equações 3.16 é semelhante às Equações de Cinética Pontual de Nêutrons.

Evidentemente, deve ser realizado um truncamento a fim de tornar esse problema tratável do ponto de vista computacional. Para isso, é realizado o truncamento das expansões apresentadas na Equação 3.4 levando em consideração os resultados e análises dos trabalhos feitos por Ceolin et al., 2014; Tumelero, 2015; Schramm, 2016 com relação à ordem de truncamento das séries, utilizam-se três termos, ou seja, polinômios quadráticos. De fato, a maior contribuição para a solução está no primeiro termo e decresce sua importância conforme o crescimento da ordem do coeficiente. Os estudos citados mostram que polinômios de grau dois são mais eficientes, sendo mais vantajoso reduzir o tamanho do subdomínio do que aumentar o grau polinomial em relação ao tempo computacional e estabilidade aritmética. Essa discussão será abordada mais especificamente na análise de convergência e controle do erro, onde serão apresentados instrumentos que justificam o que acabou de ser afirmado. Assim sendo, as expansões truncadas são definidas como:

$$\begin{aligned}\Phi_1^{[l]}(x, t) &= A_0^{[l]}(t) + A_1^{[l]}(t)(x - x_0) + A_2^{[l]}(t)(x - x_0)^2, \\ \Phi_2^{[l]}(x, t) &= B_0^{[l]}(t) + B_1^{[l]}(t)(x - x_0) + B_2^{[l]}(t)(x - x_0)^2, \\ C_i^{[l]}(x, t) &= C_{i,0}^{[l]}(t) + C_{i,1}^{[l]}(t)(x - x_0) + C_{i,2}^{[l]}(t)(x - x_0)^2.\end{aligned}\tag{3.17}$$

Com o truncamento das séries, as Equações 3.8, 3.12 e 3.15, podem ser escritas da seguinte forma, primeiramente para $n = 0$:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}A_0^{[l]}(t) - A_0^{[l]}(t)(-\Sigma_{r1}v_1 + (1 - \beta)\nu_1\Sigma_{f1}v_1) - B_0^{[l]}(t)((1 - \beta)\nu_2\Sigma_{f2}v_1) \\ - C_{i,0}^{[l]}(t)(v_1 \sum_{i=1}^6 \lambda_i) = A_2^{[l]}(t)(2D_1v_1), \\ \frac{d}{dt}B_0^{[l]}(t) - A_0^{[l]}(t)(\Sigma_{s12}v_2) - B_0^{[l]}(t)(-\Sigma_{a2}(t)v_2) = B_2^{[l]}(t)(2D_2v_2), \\ \frac{d}{dt}C_{i,0}^{[l]}(t) - A_0^{[l]}(t)(\beta_i\nu_1\Sigma_{f1}) - B_0^{[l]}(t)(\beta_i\nu_2\Sigma_{f2}) - C_{i,0}^{[l]}(t)(-\lambda_i) = 0,\end{aligned}\tag{3.18}$$

para $n = 1$:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}A_1^{[l]}(t) - A_1^{[l]}(t)(-\Sigma_{r1}v_1 + (1 - \beta)\nu_1\Sigma_{f1}v_1) - B_1^{[l]}(t)((1 - \beta)\nu_2\Sigma_{f2}v_1) \\ - C_{i,1}^{[l]}(t)(v_1 \sum_{i=1}^6 \lambda_i) = 0, \\ \frac{d}{dt}B_1^{[l]}(t) - A_1^{[l]}(t)(\Sigma_{s12}v_2) - B_1^{[l]}(t)(-\Sigma_{a2}(t)v_2) = 0, \\ \frac{d}{dt}C_{i,1}^{[l]}(t) - A_1^{[l]}(t)(\beta_i\nu_1\Sigma_{f1}) - B_1^{[l]}(t)(\beta_i\nu_2\Sigma_{f2}) - C_{i,1}^{[l]}(t)(-\lambda_i) = 0,\end{aligned}\tag{3.19}$$

e para $n = 2$:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}A_2^{[l]}(t) - A_2^{[l]}(t)(-\Sigma_{r1}v_1 + (1 - \beta)\nu_1\Sigma_{f1}v_1) - B_2^{[l]}(t)((1 - \beta)\nu_2\Sigma_{f2}v_1) \\
- \mathcal{C}_{i,2}^{[l]}(t)(v_1 \sum_{i=1}^6 \lambda_i) = 0, \\
\frac{d}{dt}B_2^{[l]}(t) - A_2^{[l]}(t)(\Sigma_{s12}v_2) - B_2^{[l]}(t)(-\Sigma_{a2}(t)v_2) = 0, \\
\frac{d}{dt}\mathcal{C}_{i,2}^{[l]}(t) - A_2^{[l]}(t)(\beta_i\nu_1\Sigma_{f1}) - B_2^{[l]}(t)(\beta_i\nu_2\Sigma_{f2}) - \mathcal{C}_{i,2}^{[l]}(t)(-\lambda_i) = 0.
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Destaca-se que $A_3^{[l]}(t)$, $B_3^{[l]}(t)$, $A_4^{[l]}(t)$ e $B_4^{[l]}(t)$ são iguais a zero, pois a série foi truncada no terceiro termo. Portanto, a equação diferencial para $n = 0$ é heterogênea e as equações para $n = 1$ e 2 são homogêneas.

Deste modo, os sistemas de EDO's na forma matricial correspondentes para $n = 0, 1$ e 2 são definidos, respectivamente, como:

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} A_0^{[l]}(t) \\ B_0^{[l]}(t) \\ \mathcal{C}_{1,0}^{[l]}(t) \\ \vdots \\ \mathcal{C}_{6,0}^{[l]}(t) \end{bmatrix} - \mathbf{W}(t) \begin{bmatrix} A_0^{[l]}(t) \\ B_0^{[l]}(t) \\ \mathcal{C}_{1,0}^{[l]}(t) \\ \vdots \\ \mathcal{C}_{6,0}^{[l]}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2v_1D_1A_2^{[l]}(t) \\ 2v_2D_2B_2^{[l]}(t) \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{3.21}$$

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} A_1^{[l]}(t) \\ B_1^{[l]}(t) \\ \mathcal{C}_{1,1}^{[l]}(t) \\ \vdots \\ \mathcal{C}_{6,1}^{[l]}(t) \end{bmatrix} - \mathbf{W}(t) \begin{bmatrix} A_1^{[l]}(t) \\ B_1^{[l]}(t) \\ \mathcal{C}_{1,1}^{[l]}(t) \\ \vdots \\ \mathcal{C}_{6,1}^{[l]}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{3.22}$$

$$\frac{d}{dt} \begin{bmatrix} A_2^{[l]}(t) \\ B_2^{[l]}(t) \\ \mathcal{C}_{1,2}^{[l]}(t) \\ \vdots \\ \mathcal{C}_{6,2}^{[l]}(t) \end{bmatrix} - \mathbf{W}(t) \begin{bmatrix} A_2^{[l]}(t) \\ B_2^{[l]}(t) \\ \mathcal{C}_{1,2}^{[l]}(t) \\ \vdots \\ \mathcal{C}_{6,2}^{[l]}(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix}, \tag{3.23}$$

onde:

$$\mathbf{W}(t) = \begin{bmatrix} -\Sigma_{r1}v_1 + (1 - \beta)\nu_1\Sigma_{f1}v_1 & (1 - \beta)\nu_2\Sigma_{f2}v_1 & \lambda_1v_1 & \lambda_2v_1 & \lambda_3v_1 & \lambda_4v_1 \\ \Sigma_{s12}v_2 & -\Sigma_{a2}(t)v_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_1\nu_1\Sigma_{f1} & \beta_1\nu_2\Sigma_{f2} & -\lambda_1 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_2\nu_1\Sigma_{f1} & \beta_2\nu_2\Sigma_{f2} & 0 & -\lambda_2 & 0 & 0 \\ \beta_3\nu_1\Sigma_{f1} & \beta_3\nu_2\Sigma_{f2} & 0 & 0 & -\lambda_3 & 0 \\ \beta_4\nu_1\Sigma_{f1} & \beta_4\nu_2\Sigma_{f2} & 0 & 0 & 0 & -\lambda_4 \\ \beta_5\nu_1\Sigma_{f1} & \beta_5\nu_2\Sigma_{f2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_6\nu_1\Sigma_{f1} & \beta_6\nu_2\Sigma_{f2} & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda_5v_1 & \lambda_6v_1 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ 0 & 0 \\ -\lambda_5 & 0 \\ 0 & -\lambda_6 \end{bmatrix}. \quad (3.24)$$

As Equações 3.22 e 3.23 tem a mesma estrutura, portanto $A_2^{[l]} = \kappa A_1^{[l]}$, onde κ representa a escala entre os coeficientes lineares e quadráticos, e o mesmo vale para os coeficientes $B_2^{[l]}$ e $C_{i,2}^{[l]}$.

Os sistemas de Equações 3.21, 3.22 e 3.23 também podem ser escritos na forma diferencial matricial linear compacta da seguinte maneira:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}\mathbf{X}_0^{[l]}(t) - \mathbf{W}(t)\mathbf{X}_0^{[l]}(t) &= \mathbf{S}^{[l]}(t), \\ \frac{d}{dt}\mathbf{X}_1^{[l]}(t) - \mathbf{W}(t)\mathbf{X}_1^{[l]}(t) &= 0, \\ \mathbf{X}_2^{[l]}(t) &= \kappa\mathbf{X}_1^{[l]}(t), \end{aligned} \quad (3.25)$$

onde $\mathbf{X}_n^{[l]}(t) = \left[A_n^{[l]}(t) \ B_n^{[l]}(t) \ C_{i,n}^{[l]}(t) \right]^T$ para $n = 0, 1$ e 2 com $i = 1 : 6$ e $\mathbf{S}^{[l]}(t) = \left[2v_1D_1A_2^{[l]}(t) \ 2v_2D_2B_2^{[l]}(t) \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \ 0 \right]^T$.

O próximo passo consiste em aplicar a ideia modificada do Método Clássico da Decomposição de Adomian [Adomian, 1988, 1994; Adominan e Rach, 1996; Petersen, 2011; Da Silva et al., 2014] para resolver o sistema de equações diferenciais ordinárias. Cabe

ressaltar neste ponto que, as equações objeto de estudo são lineares e não é necessário calcular os coeficientes da expansão como no método clássico, somente a técnica de expansão é empregada. Em resumo, a ideia consiste em expandir as variáveis, no caso da presente tese os coeficientes das séries de Taylor dependentes do tempo, em uma série truncada e em seguida substituí-las nas equações diferenciais desejadas; forma-se um conjunto de sistemas recursivos de equações diferenciais; no primeiro sistema utiliza-se a condição inicial, formando um sistema homogêneo de equações diferenciais de primeira ordem com entradas constantes; os sistemas restantes formam equações diferenciais de primeira ordem não homogêneas, pois carregam a dependência temporal no termo fonte; as respostas das recursões são obtidas utilizando soluções conhecidas para as equações diferenciais matriciais de primeira ordem [Petersen, 2011]. Assim, para iniciar a aplicação do Método da Decomposição modificado, expandem-se os coeficientes $A_n^{[l]}(t)$, $B_n^{[l]}(t)$ e $\mathcal{C}_{i,n}^{[l]}(t)$ (para $n = 0, 1$ e 2) em séries truncadas como:

$$\begin{aligned} A_n^{[l]}(t) &= \sum_{j=0}^J A_{n,j}^{[l]}(t), \\ B_n^{[l]}(t) &= \sum_{j=0}^J B_{n,j}^{[l]}(t), \\ \mathcal{C}_{i,n}^{[l]}(t) &= \sum_{j=0}^J \mathcal{C}_{i,n,j}^{[l]}(t). \end{aligned} \tag{3.26}$$

Aqui, J indica o truncamento da soma infinita mas convergente para $J \rightarrow \infty$, sendo que a quantidade de termos desse truncamento será apresentada nos resultados desta tese.

Para a aplicação da metodologia, reescreve-se a matriz $\mathbf{W}(t)$, apresentada na Equação 3.24, em uma matriz diagonal \mathbf{W}_0 composta dos elementos constantes da diagonal de $\mathbf{W}(t)$, mais outra matriz $\mathbf{W}_1(t)$ com os elementos fora da diagonal de $\mathbf{W}(t)$ e que carrega os termos com dependência do tempo, caso existam. Para isso, reescreve-se $\Sigma_{a2}(t) = \Sigma_{a2,0} + \Sigma_{a2,1}(t)$, ou seja, a seção de choque macroscópica de absorção do grupo térmico é dividida em uma parte constante e outra dependente do tempo, onde, na literatura, inserem-se perturbações. Isso permite desacoplar, já na recursão de inicialização, as equações com suas escalas de tempo associadas, contornando o problema de rigidez que

de outra maneira seria aparente. Deste modo, as matrizes citadas têm a forma:

$$\mathbf{W}_0 = \begin{bmatrix} -\Sigma_{r1}v_1 + (1 - \beta)\nu_1\Sigma_{f1}v_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Sigma_{a2,0}v_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\lambda_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_6 \end{bmatrix} \quad (3.27)$$

e

$$\mathbf{W}_1(t) = \begin{bmatrix} 0 & (1 - \beta)\nu_2\Sigma_{f2}v_1 & \lambda_1v_1 & \lambda_2v_1 & \lambda_3v_1 & \lambda_4v_1 & \lambda_5v_1 & \lambda_6v_1 \\ \Sigma_{s12}v_2 & -\Sigma_{a2,1}(t)v_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_1\nu_1\Sigma_{f1} & \beta_1\nu_2\Sigma_{f2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_2\nu_1\Sigma_{f1} & \beta_2\nu_2\Sigma_{f2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_3\nu_1\Sigma_{f1} & \beta_3\nu_2\Sigma_{f2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_4\nu_1\Sigma_{f1} & \beta_4\nu_2\Sigma_{f2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_5\nu_1\Sigma_{f1} & \beta_5\nu_2\Sigma_{f2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_6\nu_1\Sigma_{f1} & \beta_6\nu_2\Sigma_{f2} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (3.28)$$

Inserindo as expansões da Equação 3.26 no sistema de equações diferenciais obtêm-se as equações constitutivas que determinam os coeficientes $A_{n,j}^{[l]}$, $B_{n,j}^{[l]}$ e $\mathcal{C}_{i,n,j}^{[l]}$. Como será mostrado adiante, o sistema recursivo corrige a solução até uma precisão prescrita, deste modo, o número de recursões é finito e encerra em determinado passo J . Assim, o que era originalmente um conjunto de três sistemas de equações, cada um com oito componentes, agora se torna um número infinito de equações recursivas. Vale destacar que esta expansão dá origem a um maior número de coeficientes desconhecidos do que de equações, então o problema original é transformado em um conjunto infinito de equações que poderiam, em princípio, serem resolvidas exatamente. A construção do esquema recursivo é organizado de maneira que, para uma determinada recursão, todos parâmetros são determinados unicamente para o esquema adotado. É importante ressaltar que este procedimento de divisão não é único, existe uma variedade de possibilidades e a escolha para o esquema apresentado baseia-se no fato de as soluções para cada passo serem conhecidas. Expli-

cando de maneira mais específica, a estratégia é reagrupar os termos de tal forma que o termo fonte seja sempre composto por termos conhecidos da recursão anterior [Da Silva et al., 2014]. O termo fonte não pode dominar a solução, pois se as correções forem muito grandes, podem ocorrer oscilações na convergência e problemas aritméticos. Essa implementação da Decomposição ainda não possui um critério matemático rigoroso, mas um trabalho está em andamento com base no número de condicionamento como critério para indicar quais componentes podem ser colocadas no termo fonte para garantir convergência [Ladeia et al., 2018].

Diante disso, os sistemas lineares compactos da Equação 3.25 podem ser escritos da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}\mathbf{X}_0^{[l]}(t) - \mathbf{W}_0\mathbf{X}_0^{[l]}(t) &= \mathbf{S}^{[l]}(t) + \mathbf{W}_1(t)\mathbf{X}_0^{[l]}(t), \\ \frac{d}{dt}\mathbf{X}_1^{[l]}(t) - \mathbf{W}_0\mathbf{X}_1^{[l]}(t) &= \mathbf{W}_1(t)\mathbf{X}_1^{[l]}(t), \\ \frac{d}{dt}\mathbf{X}_2^{[l]}(t) - \mathbf{W}_0\mathbf{X}_2^{[l]}(t) &= \mathbf{W}_1(t)\mathbf{X}_2^{[l]}(t).\end{aligned}\tag{3.29}$$

Diante da segmentação da matriz $\mathbf{W}(t)$, agora substituem-se as expansões da Equação 3.26 dentro da Equação 3.18 (para $n = 0$), resultando em:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}(A_{0,0}^{[l]}(t) + \dots + A_{0,J}^{[l]}(t)) - (A_{0,0}^{[l]}(t) + \dots + A_{0,J}^{[l]}(t))(-\Sigma_{r1}v_1 + (1 - \beta)\nu_1\Sigma_{f1}v_1) \\ = (A_{2,0}^{[l]}(t) + \dots + A_{2,J}^{[l]}(t))(2D_1v_1) + (B_{0,0}^{[l]}(t) + \dots + B_{0,J}^{[l]}(t))((1 - \beta)\nu_2\Sigma_{f2}v_1) \\ + (\mathcal{C}_{i,0,0}^{[l]}(t) + \dots + \mathcal{C}_{i,0,J}^{[l]}(t))(v_1 \sum_{i=1}^6 \lambda_i), \\ \frac{d}{dt}(B_{0,0}^{[l]}(t) + \dots + B_{0,J}^{[l]}(t)) - (B_{0,0}^{[l]}(t) + \dots + B_{0,J}^{[l]}(t))(-\Sigma_{a2,0}v_2) \\ = (B_{2,0}^{[l]}(t) + \dots + B_{2,J}^{[l]}(t))(2D_2v_2) + (A_{0,0}^{[l]}(t) + \dots + A_{0,J}^{[l]}(t))(\Sigma_{s12}v_2) \\ + (B_{0,0}^{[l]}(t) + \dots + B_{0,J}^{[l]}(t))(-\Sigma_{a2,1}(t)v_2), \\ \frac{d}{dt}(\mathcal{C}_{i,0,0}^{[l]}(t) + \dots + \mathcal{C}_{i,0,J}^{[l]}(t)) - (\mathcal{C}_{i,0,0}^{[l]}(t) + \dots + \mathcal{C}_{i,0,J}^{[l]}(t))(-\lambda_i) \\ = (A_{0,0}^{[l]}(t) + \dots + A_{0,J}^{[l]}(t))(\beta_i\nu_1\Sigma_{f1}) + (B_{0,0}^{[l]}(t) + \dots + B_{0,J}^{[l]}(t))(\beta_i\nu_2\Sigma_{f2}).\end{aligned}\tag{3.30}$$

Do mesmo modo, substituindo na Equação 3.19 (para $n = 1$), obtém-se:

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}(A_{1,0}^{[l]}(t) + \dots + A_{1,J}^{[l]}(t)) - (A_{1,0}^{[l]}(t) + \dots + A_{1,J}^{[l]}(t))(-\Sigma_{r1}v_1 + (1 - \beta)\nu_1\Sigma_{f1}v_1) \\ = (B_{1,0}^{[l]}(t) + \dots + B_{1,J}^{[l]}(t))((1 - \beta)\nu_2\Sigma_{f2}v_1) + (\mathcal{C}_{i,1,0}^{[l]}(t) + \dots + \mathcal{C}_{i,1,J}^{[l]}(t))(v_1 \sum_{i=1}^6 \lambda_i), \\ \frac{d}{dt}(B_{1,0}^{[l]}(t) + \dots + B_{1,J}^{[l]}(t)) - (B_{1,0}^{[l]}(t) + \dots + B_{1,J}^{[l]}(t))(-\Sigma_{a2,0}v_2) \\ = (A_{1,0}^{[l]}(t) + \dots + A_{1,J}^{[l]}(t))(\Sigma_{s12}v_2) + (B_{1,0}^{[l]}(t) + \dots + B_{1,J}^{[l]}(t))(-\Sigma_{a2,1}(t)v_2), \\ \frac{d}{dt}(\mathcal{C}_{i,1,0}^{[l]}(t) + \dots + \mathcal{C}_{i,1,J}^{[l]}(t)) - (\mathcal{C}_{i,1,0}^{[l]}(t) + \dots + \mathcal{C}_{i,1,J}^{[l]}(t))(-\lambda_i) \\ = (A_{1,0}^{[l]}(t) + \dots + A_{1,J}^{[l]}(t))(\beta_i\nu_1\Sigma_{f1}) + (B_{1,0}^{[l]}(t) + \dots + B_{1,J}^{[l]}(t))(\beta_i\nu_2\Sigma_{f2}),\end{aligned}\tag{3.31}$$

já para a Equação 3.20 (para $n = 2$), tem-se:

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dt}(A_{2,0}^{[l]}(t) + \dots + A_{2,J}^{[l]}(t)) - (A_{2,0}^{[l]}(t) + \dots + A_{2,J}^{[l]}(t))(-\Sigma_{r1}v_1 + (1 - \beta)\nu_1\Sigma_{f1}v_1) \\
& = (B_{2,0}^{[l]}(t) + \dots + B_{2,J}^{[l]}(t))((1 - \beta)\nu_2\Sigma_{f2}v_1) + (\mathcal{C}_{i,2,0}^{[l]}(t) + \dots + \mathcal{C}_{i,2,J}^{[l]}(t))(v_1 \sum_{i=1}^6 \lambda_i), \\
& \quad \frac{d}{dt}(B_{2,0}^{[l]}(t) + \dots + B_{2,J}^{[l]}(t)) - (B_{2,0}^{[l]}(t) + \dots + B_{2,J}^{[l]}(t))(-\Sigma_{a2,0}v_2) \\
& = (A_{2,0}^{[l]}(t) + \dots + A_{2,J}^{[l]}(t))(\Sigma_{s12}v_2) + (B_{2,0}^{[l]}(t) + \dots + B_{2,J}^{[l]}(t))(-\Sigma_{a2,1}(t)v_2), \\
& \quad \frac{d}{dt}(\mathcal{C}_{i,2,0}^{[l]}(t) + \dots + \mathcal{C}_{i,2,J}^{[l]}(t)) - (\mathcal{C}_{i,2,0}^{[l]}(t) + \dots + \mathcal{C}_{i,2,J}^{[l]}(t))(-\lambda_i) \\
& = (A_{2,0}^{[l]}(t) + \dots + A_{2,J}^{[l]}(t))(\beta_i\nu_1\Sigma_{f1}) + (B_{2,0}^{[l]}(t) + \dots + B_{2,J}^{[l]}(t))(\beta_i\nu_2\Sigma_{f2}).
\end{aligned} \tag{3.32}$$

Porém, como mencionado anteriormente, os sistemas de Equações definidos em 3.30, 3.31 e 3.32 possuem $8 \times J$ incógnitas e apenas oito equações para cada n (com $n = 0, 1$ e 2), tornando os sistemas indeterminados. Entretanto, em vista de contornar esse problema, constroem-se sistemas recursivos, em que o primeiro termo da expansão ($j = 0$) da solução é definido para $n = 0, 1$ e 2 como:

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dt}A_{0,0}^{[l]}(t) - A_{0,0}^{[l]}(t)(-\Sigma_{r1}v_1 + (1 - \beta)\nu_1\Sigma_{f1}v_1) = A_{2,0}^{[l]}(t)(2D_1v_1), \\
& \quad \frac{d}{dt}B_{0,0}^{[l]}(t) - B_{0,0}^{[l]}(t)(-\Sigma_{a2,0}v_2) = B_{2,0}^{[l]}(t)(2D_2v_2), \\
& \quad \frac{d}{dt}\mathcal{C}_{i,0,0}^{[l]}(t) - \mathcal{C}_{i,0,0}^{[l]}(t)(-\lambda_i) = 0,
\end{aligned} \tag{3.33}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dt}A_{1,0}^{[l]}(t) - A_{1,0}^{[l]}(t)(-\Sigma_{r1}v_1 + (1 - \beta)\nu_1\Sigma_{f1}v_1) = 0, \\
& \quad \frac{d}{dt}B_{1,0}^{[l]}(t) - B_{1,0}^{[l]}(t)(-\Sigma_{a2,0}v_2) = 0, \\
& \quad \frac{d}{dt}\mathcal{C}_{i,1,0}^{[l]}(t) - \mathcal{C}_{i,1,0}^{[l]}(t)(-\lambda_i) = 0,
\end{aligned} \tag{3.34}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dt}A_{2,0}^{[l]}(t) - A_{2,0}^{[l]}(t)(-\Sigma_{r1}v_1 + (1 - \beta)\nu_1\Sigma_{f1}v_1) = 0, \\
& \quad \frac{d}{dt}B_{2,0}^{[l]}(t) - B_{2,0}^{[l]}(t)(-\Sigma_{a2,0}v_2) = 0, \\
& \quad \frac{d}{dt}\mathcal{C}_{i,2,0}^{[l]}(t) - \mathcal{C}_{i,2,0}^{[l]}(t)(-\lambda_i) = 0.
\end{aligned} \tag{3.35}$$

Para $n = 1$ e 2 , novamente tem-se equações com mesma estrutura e, portanto, $A_{2,0}^{[l]} = \kappa A_{1,0}^{[l]}$, ou ainda na forma matricial compacta:

$$\begin{aligned}
& \frac{d}{dt}\mathbf{X}_{0,0}^{[l]}(t) - \mathbf{W}_0\mathbf{X}_{0,0}^{[l]}(t) = \mathbf{S}_0^{[l]}(t), \\
& \quad \frac{d}{dt}\mathbf{X}_{1,0}^{[l]}(t) - \mathbf{W}_0\mathbf{X}_{1,0}^{[l]}(t) = 0, \\
& \quad \mathbf{X}_{2,0}^{[l]}(t) = \kappa\mathbf{X}_{1,0}^{[l]}(t).
\end{aligned} \tag{3.36}$$

Portanto, a inicialização para o sistema recursivo forma sistemas de equações diferenciais homogêneos para $n = 1$ e 2 , enquanto que para $n = 0$ é heterogêneo com as contribuições difusivas na fonte.

Em seqüência, definem-se os termos genéricos da solução com $j = 1 : J$, para $n = 0, 1$ e 2 , respectivamente:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}A_{0,j}^{[l]}(t) - A_{0,j}^{[l]}(t)(-\Sigma_{r1}v_1 + (1 - \beta)\nu_1\Sigma_{f1}v_1) &= A_{2,j}^{[l]}(t)(2D_1v_1) \\
&+ B_{0,j-1}^{[l]}(t)((1 - \beta)\nu_2\Sigma_{f2}v_1) + \mathcal{C}_{i,0,j-1}^{[l]}(t)(v_1 \sum_{i=1}^6 \lambda_i), \\
\frac{d}{dt}B_{0,j}^{[l]}(t) - B_{0,j}^{[l]}(t)(-\Sigma_{a2,0}v_2) &= B_{2,j}^{[l]}(t)(2D_2v_2) + A_{0,j-1}^{[l]}(t)(\Sigma_{s12}v_2) \\
&+ B_{0,j-1}^{[l]}(t)(-\Sigma_{a2,1}v_2), \\
\frac{d}{dt}\mathcal{C}_{i,0,j}^{[l]}(t) - \mathcal{C}_{i,0,j}^{[l]}(t)(-\lambda_i) &= A_{0,j-1}^{[l]}(t)(\beta_i\nu_1\Sigma_{f1}) + B_{0,j-1}^{[l]}(t)(\beta_i\nu_2\Sigma_{f2}),
\end{aligned} \tag{3.37}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}A_{1,j}^{[l]}(t) - A_{1,j}^{[l]}(t)(-\Sigma_{r1}v_1 + (1 - \beta)\nu_1\Sigma_{f1}v_1) &= B_{1,j-1}^{[l]}(t)((1 - \beta)\nu_2\Sigma_{f2}v_1) \\
&+ \mathcal{C}_{i,1,j-1}^{[l]}(t)(v_1 \sum_{i=1}^6 \lambda_i), \\
\frac{d}{dt}B_{1,j}^{[l]}(t) - B_{1,j}^{[l]}(t)(-\Sigma_{a2}v_2) &= A_{1,j-1}^{[l]}(t)(\Sigma_{s12}v_2) + B_{1,j-1}^{[l]}(t)(-\Sigma_{a2,1}v_2), \\
\frac{d}{dt}\mathcal{C}_{i,1,j}^{[l]}(t) - \mathcal{C}_{i,1,j}^{[l]}(t)(-\lambda_i) &= A_{1,j-1}^{[l]}(t)(\beta_i\nu_1\Sigma_{f1}) + B_{1,j-1}^{[l]}(t)(\beta_i\nu_2\Sigma_{f2}),
\end{aligned} \tag{3.38}$$

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}A_{2,j}^{[l]}(t) - A_{2,j}^{[l]}(t)(-\Sigma_{r1}v_1 + (1 - \beta)\nu_1\Sigma_{f1}v_1) &= B_{2,j-1}^{[l]}(t)((1 - \beta)\nu_2\Sigma_{f2}v_1) \\
&+ \mathcal{C}_{i,2,j-1}^{[l]}(t)(v_1 \sum_{i=1}^6 \lambda_i), \\
\frac{d}{dt}B_{2,j}^{[l]}(t) - B_{2,j}^{[l]}(t)(-\Sigma_{a2}v_2) &= A_{2,j-1}^{[l]}(t)(\Sigma_{s12}v_2) + B_{2,j-1}^{[l]}(t)(-\Sigma_{a2,1}v_2), \\
\frac{d}{dt}\mathcal{C}_{i,2,j}^{[l]}(t) - \mathcal{C}_{i,2,j}^{[l]}(t)(-\lambda_i) &= A_{2,j-1}^{[l]}(t)(\beta_i\nu_1\Sigma_{f1}) + B_{2,j-1}^{[l]}(t)(\beta_i\nu_2\Sigma_{f2}),
\end{aligned} \tag{3.39}$$

ou escritos na forma matricial compacta:

$$\begin{aligned}
\frac{d}{dt}\mathbf{X}_{0,j}^{[l]}(t) - \mathbf{W}_0\mathbf{X}_{0,j}^{[l]}(t) &= \mathbf{S}_j^{[l]}(t) + \mathbf{W}_1(t)\mathbf{X}_{0,j-1}^{[l]}(t), \\
\frac{d}{dt}\mathbf{X}_{1,j}^{[l]}(t) - \mathbf{W}_0\mathbf{X}_{1,j}^{[l]}(t) &= \mathbf{W}_1(t)\mathbf{X}_{1,j-1}^{[l]}(t), \\
\frac{d}{dt}\mathbf{X}_{2,j}^{[l]}(t) - \mathbf{W}_0\mathbf{X}_{2,j}^{[l]}(t) &= \mathbf{W}_1(t)\mathbf{X}_{2,j-1}^{[l]}(t).
\end{aligned} \tag{3.40}$$

Logo, o sistema de equações diferenciais ordinárias construído, com $j = 1 : J$, é não homogêneo e a fonte depende da variável temporal. Sendo que o termo fonte, para cada equação diferencial ordinária, é determinado através da recursão anterior $j - 1$. Neste ponto, é preciso notar que, como explicado anteriormente, esta decomposição é feita de tal maneira que o cumprimento da Equação 3.25 é garantido embora não seja único, a menos da matriz $\mathbf{W}_1(t)$ que não aparece na Equação 3.36, mas aparece em 3.40. Ressalta-se que a solução das Equações 3.36 e 3.40, equações diferenciais ordinárias lineares de primeira ordem, são conhecidas e determinadas de modo direto. Cabe destacar também que a

divisão da matriz $\mathbf{W}(t)$ dos coeficientes em duas facilita a convergência, pois a recursão de inicialização é gerada utilizando a matriz diagonal \mathbf{W}_0 e as próximas corrigem a solução, inserindo a contribuição de $\mathbf{W}_1(t)$. Com esse artifício, não é necessária a utilização da continuação analítica e, portanto, determina-se a solução para cada valor do tempo sem precisar determinar as anteriores [Da Silva et al., 2014]. Cada recursão capta e corrige simultaneamente a evolução temporal da curva em todos os tempos precedentes. Na literatura anteriormente citada para resolver as Equações de Cinética Espacial de Difusão de Nêutrons não foi utilizada essa ideia, todas obras utilizam a continuação analítica.

Rescrevendo o sistema de Equações 3.40 na forma diferencial matricial linear compacta genérica, obtém-se:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{X}^{[l]}(t) - \mathbf{W}_0\mathbf{X}^{[l]}(t) = \mathbf{Q}^{[l]}(t), \quad (3.41)$$

onde $\mathbf{X}^{[l]}(t)$ é o vetor das variáveis dependentes e $\mathbf{Q}^{[l]}(t)$ é o vetor fonte. Portanto, a solução dessa equação matricial é bem conhecida, utilizando a técnica da Transformada de Laplace com a propriedade de convolução, dada por:

$$\mathbf{X}^{[l]}(t) = \exp(\mathbf{W}_0 t)\mathbf{X}^{[l]}(0) + \int_0^t \exp(\mathbf{W}_0 \tau)\mathbf{Q}^{[l]}(t - \tau)d\tau, \quad (3.42)$$

onde $\mathbf{X}^{[l]}(0)$ são as condições iniciais do problema. Destaca-se que os termos da integral na equação acima são conhecidos e pode-se resolvê-la analiticamente.

No caso em que a fonte é igual a zero na Equação 3.41, a solução é determinada por:

$$\mathbf{X}^{[l]}(t) = \exp(\mathbf{W}_0 t)\mathbf{X}^{[l]}(0). \quad (3.43)$$

Lembrando que, como $\mathbf{X}^{[l]}(0)$ representa os coeficientes das expansões em Taylor para o instante $t = 0$, importam-se os coeficientes para o mesmo problema na forma estacionária (Equação 2.93), advindos da metodologia utilizada por Ceolin, 2014:

$$\Phi_1^{[l]}(x) = A_2^{[l]}(x - x_0)^2 + A_1^{[l]}(x - x_0) + A_0^{[l]}, \quad (3.44)$$

$$\Phi_2^{[l]}(x) = B_2^{[l]}(x - x_0)^2 + B_1^{[l]}(x - x_0) + B_0^{[l]}, \quad (3.45)$$

onde resumidamente resolveu-se o problema de difusão de nêutrons na criticalidade expandindo as variáveis espaciais em séries de Taylor e resolvendo o sistema linear formado juntamente com as equações para as condições de contorno e interface. Sendo que as con-

dições iniciais importadas do problema estacionário somente são aplicadas na inicialização do Método da Decomposição modificado ($j = 0$). Para as demais recursões, a condição inicial imposta é nula.

Analisando a aplicação da metodologia, observa-se que a contribuição da dependência do tempo dos parâmetros nucleares entram através do termo fonte na integral da Equação 3.42. Desta forma, a inicialização ($j = 0$) determina a maior contribuição para a solução e as recursões seguintes, dadas pelo termo integral, corrigem a solução com as contribuições da rigidez do problema. Para pequenos instantes de tempo, a integral fornece pequenas contribuições, enquanto que para instantes grandes de tempo o termo exponencial domina o integrando, o qual resulta ainda em pequenas contribuições. Somente para tempos onde o integrando não é pequeno, grandes contribuições aparecem na solução. Além disso, a solução da evolução do tempo é corrigida simultaneamente para todos os tempos, então as correções na região temporal onde a integral tem contribuições significantes determinam a profundidade do passo de acordo com a precisão prescrita da solução, uma clara vantagem em relação a métodos progressivos [Ceolin, 2010; Ceolin et al., 2014, 2015b; Petersen, 2011; Oliveira, 2013].

O problema de rigidez presente em várias abordagens não aparece neste método, pois a origem do caráter de rigidez é manifestado em diferentes ordens de magnitude dos valores numéricos da diagonal dos elementos da matriz W_0 . As correções da solução alteram os componentes de cada escala de tempo separadamente, pois a matriz exponencial no integrando é diagonal, deste modo, os termos fonte adicionam somente termos para cada contribuição com suas respectivas escalas de tempo.

Uma vez definida a solução para cada célula, como o problema é homogêneo, a conexão entre as células é feita por continuação analítica, a qual assegura continuidade das densidades de fluxo e corrente. Na primeira célula, aplica-se a condição de contorno do tipo fluxo nulo e na interface a continuidade da densidade de corrente:

$$\begin{aligned} A_2^{[1]}(t)(\Delta x)^2 - A_1^{[1]}(t)(\Delta x) + A_0^{[1]}(t) &= 0, \\ -D_1^{[1]}(2A_2^{[1]}(t)(\Delta x) + A_1^{[1]}(t)) &= -D_1^{[2]}(2A_2^{[2]}(t)(\Delta x) - A_1^{[2]}(t)), \end{aligned} \quad (3.46)$$

onde os índices superiores indicam o número da célula, Δx é a distância entre x e x_0 .

Nas células subsequentes até a célula $L - 1$, onde L é o número total de células, aplica-se na interface esquerda continuidade de fluxo e na interface direita conservação da

densidade de corrente:

$$\begin{aligned} A_2^{[l-1]}(t)(\Delta x)^2 + A_1^{[l-1]}(t)(\Delta x) + A_0^{[l-1]}(t) &= A_2^{[l]}(t)(\Delta x)^2 - A_1^{[l]}(t)(\Delta x) + A_0^{[l]}(t), \\ -D_1^{[l]}(2A_2^{[l]}(t)(\Delta x) + A_1^{[l]}(t)) &= -D_1^{[l+1]}(2A_2^{[l+1]}(t)(\Delta x) - A_1^{[l+1]}(t)). \end{aligned} \quad (3.47)$$

Na última célula, aplica-se na interface continuidade de fluxo e no contorno a condição de fluxo nulo:

$$\begin{aligned} A_2^{[L-1]}(t)(\Delta x)^2 + A_1^{[L-1]}(t)(\Delta x) + A_0^{[L-1]}(t) &= A_2^{[L]}(t)(\Delta x)^2 - A_1^{[L]}(t)(\Delta x) + A_0^{[L]}(t), \\ A_2^{[L]}(t)(\Delta x)^2 + A_1^{[L]}(t)(\Delta x) + A_0^{[L]}(t) &= 0. \end{aligned} \quad (3.48)$$

Esta análise é análoga para o coeficiente $B_n^{[l]}(t)$. Vale lembrar que um grau de liberdade no espaço é fixado com a condição inicial da solução estacionária da referência Ceolin, 2014.

3.1.1 Estimativa do erro e análise de convergência e estabilidade

Na literatura, encontram-se poucos trabalhos que tratam sobre a convergência e controle do erro de métodos híbridos, semi-analíticos ou numéricos. Em sua maioria apresentam poucas informações ou tratam critérios de parada como sendo um critério de convergência. Cabe ressaltar que para problemas lineares existe o Teorema de Lax-Milgram que relaciona estabilidade e consistência com a convergência. Assim, afirmar que um método converge com certa quantidade de iterações ou recursões, após ter alcançado determinado número de dígitos significativos não é suficiente, pois o procedimento pode falhar e divergir, um exemplo conhecido é uma divergência logarítmica. Apesar do problema desta tese ser linear, a metodologia apresenta sistemas recursivos e, devido a característica de rigidez, aritmeticamente podem ocorrer divergências.

Inicialmente, vale destacar que a maior contribuição dos termos das séries de Taylor está no primeiro termo e decresce sua importância com o aumento do grau do polinômio, como pode ser visto nos trabalhos de Ceolin et al., 2014; Tumelero, 2015; Schramm, 2016. Assim sendo, utilizar polinômios de elevado grau para as séries de Taylor não melhora significativamente a solução, e ainda, pode aumentar substancialmente o tempo computacional do algoritmo. Um estudo aprofundado é realizado por Tumelero, 2015, considerando o grau do polinômio, tamanho do passo e também passo adaptativo (conforme precisão desejada), mostrando a comparação de tempo computacional e erros gerados. Portanto,

com polinômios de baixa ordem pode-se alcançar a convergência para os casos estudados. A contribuição das recursões dos Métodos da Decomposição modificado e dos coeficientes das séries de Taylor serão ilustrados na seção dos resultados numéricos.

Deste modo, neste trabalho além de apresentar as recursões necessárias para atingir determinado número de dígitos significativos, mostra-se o controle do erro e um critério para estimativa de estabilidade calculando os termos residuais gerados com a variação espaço-tempo e, garantindo assim, a convergência do método. A ideia desta estimativa de erro e convergência baseia-se em utilizar a própria equação diferencial.

Uma análise de convergência consistente pode ser determinada, na maior parte dos casos, com testes de convergência como o Teste da Razão, Cauchy-Hadamard, etc. Porém, no presente trabalho, encontrar expressões para os coeficientes empregados se torna um problema complicado, se não impossível. Além disso, encontram-se dificuldades com a paridade dos coeficientes, onde pode-se encontrar coeficientes nulos faltando informações acerca do raio de convergência da série espaço-temporal. Levando em conta essas observações, reforça-se a ideia de utilizar a própria equação diferencial como estimativa.

Relembrando, em cada intervalo uma expansão em série de Taylor foi utilizada e necessita-se um critério para a qualidade da solução em todo o domínio. Para isso, emprega-se o sistema de equação diferencial original junto com a norma máxima, a fim de determinar o termo residual, pois sendo suficientemente pequeno representa um critério necessário para a convergência. A variação dos coeficientes determinados e sua influência nos termos residuais, os quais são definidos abaixo, mostram se os coeficientes encontrados resultam na menor norma máxima, ou seja, mais próxima da solução verdadeira. Para o estudo da análise proposta [Ladeia et al., 2018], considera-se:

$$\Omega[f_{exata}] = 0, \quad (3.49)$$

onde Ω é a equação diferencial parcial com todos os termos levados ao lado esquerdo da equação igualada a zero e f_{exata} é solução exata da equação. Ou seja, substituindo a solução exata dentro da equação diferencial obtém-se uma identidade ($0 = 0$).

No método proposto, a solução encontrada não é uma solução exata, pois a série de Taylor é truncada em determinado grau no espaço e para o tempo em determinado número de recursões do Método da Decomposição de Adomian modificado. Nesse caso, esta solução aproximada (f_{aprox}) gera um termo residual que pode ser maior ou menor que

zero. A utilização da norma máxima para a Equação 3.49, mas com a solução aproximada obtida, gera um termo residual positivo:

$$||\Omega[f_{aprox}]||_{\infty} = T_{RE}, \quad (3.50)$$

onde T_{RE} é o termo residual do erro. O termo residual é uma grandeza próxima de zero, tomando o máximo valor no domínio inteiro. Sabe-se que mesmo sendo um valor pequeno, todos os outros serão melhores devido a definição de norma máxima, obtendo-se uma estimativa para o erro. A condição necessária é então que com o aumento das recursões o termo residual descreve uma sequência nula.

O critério suficiente para encerrar a análise de convergência consiste em mostrar a estabilidade do presente método. Para isso, realiza-se um processo inverso, introduzindo uma perturbação na solução dos coeficientes e analisando-se como o termo residual se comporta. No caso em que o conjunto de coeficientes determinar o menor termo residual na norma máxima, a solução encontrada é a melhor possível para o tamanho de segmentação do domínio e grau do polinômio. A perturbação pode ser definida como:

$$||\Omega[f_{aprox} \pm \Delta f_{aprox}]||_{\infty} = T_{RP}, \quad (3.51)$$

onde T_{RP} é o termo residual da perturbação. Através dessa variação e a prévia discussão, pode-se afirmar que a solução aproximada f_{aprox} está convergindo, apesar de não ser uma prova matematicamente rigorosa, pois a solução obedece o critério de parada (não muda mais para um determinado número de dígitos significativos), tem um termo residual pequeno e ainda é estável diante de perturbações.

3.2 Resultados Numéricos para o Problema 1

A fim de demonstrar a viabilidade da metodologia apresentada neste presente capítulo, aplica-se o método proposto nas Equações de Cinética Espacial de Nêutrons em um domínio homogêneo em geometria cartesiana unidimensional, com 2 grupos de energia e 6 grupos de precursores de nêutrons atrasados. Também é apresentada a estimativa de convergência, controle do erro e estabilidade, juntamente com a comparação aos resultados da literatura.

No primeiro caso, a metodologia proposta é aplicada em um problema, que pode ser encontrado em Ceolin, 2010, em que sua geometria consiste em um domínio de com-

primento $X = 160$ cm em um meio homogêneo com condições de contorno do tipo vácuo ($\Phi(0, t) = \Phi(X, t) = 0$), apresentada na Figura 3.3. A condição inicial é obtida através da metodologia proposta por Ceolin, 2014 e é apresentada na Figura 3.4 para o fluxo rápido e térmico normalizados. Cabe ressaltar que o incremento no espaço utilizado foi $\Delta x = 0,25$ cm para esse caso.

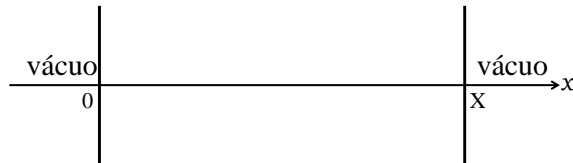


Figura 3.3 – Geometria do Problema 1.

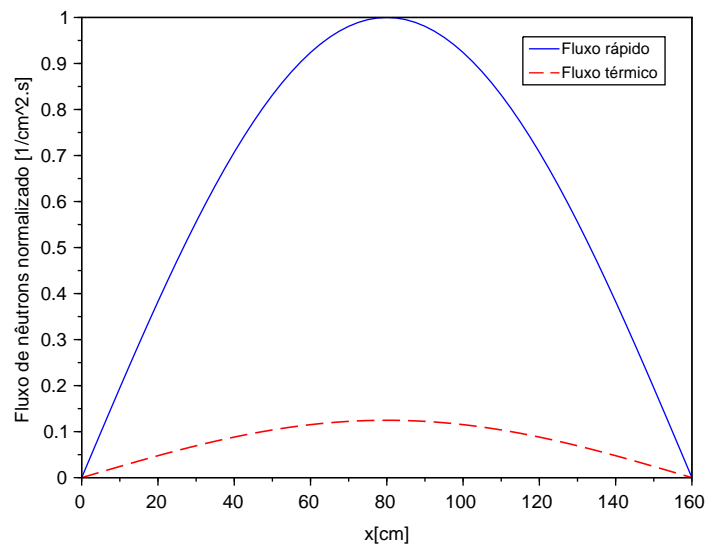


Figura 3.4 – Condições iniciais normalizadas para o fluxo rápido e térmico para o Problema 1.

Os parâmetros nucleares utilizados nesse caso são apresentados na Tabela 3.1 e os referentes aos nêutrons atrasados, na Tabela 3.2.

Tabela 3.1 – Parâmetros nucleares para o Problema 1. [Fonte: Adaptada de Nagaya e Kobayashi, 1995]

Parâmetro	Grupo Rápido	Grupo Térmico
$D[cm]$	1,0	0,5
$v[cm/s]$	$1,0 \cdot 10^7$	$3,0 \cdot 10^5$
$\Sigma_r[cm^{-1}]$	0,02	0,08
$\Sigma_{s12}[cm^{-1}]$	0,01	0
$\nu\Sigma_f[cm^{-1}]$	0,005	0,099

Tabela 3.2 – Parâmetros referentes aos nêutrons atrasados para o Problema 1. [Fonte: Adaptada de Nagaya e Kobayashi, 1995]

i	β_i	$\lambda_i[s^{-1}]$
1	0,00025	0,0124
2	0,00164	0,0305
3	0,00147	0,111
4	0,00296	0,301
5	0,00086	1,14
6	0,00032	3,01

Para visualizar o comportamento do fluxo rápido e térmico, apresentam-se as Figuras 3.5 e 3.6, para os instantes $t = 1,5$ e 10 s. O comportamento do fluxo mostra um caso subcrítico, pois tende a diminuir com o passar do tempo, como era esperado através do conjunto de parâmetros utilizados. Já nas Figuras 3.7 e 3.8 é possível observar esse comportamento assintótico dos fluxos para vários instantes de tempo em representação tridimensional. Também são apresentados os resultados dos fluxos na Tabela 3.3 para o instante $t = 5$ s.

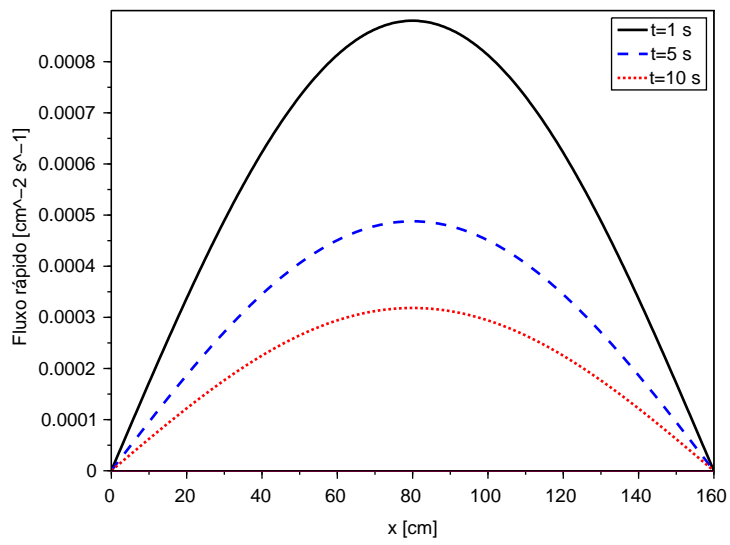


Figura 3.5 – Fluxo rápido para o Problema 1.

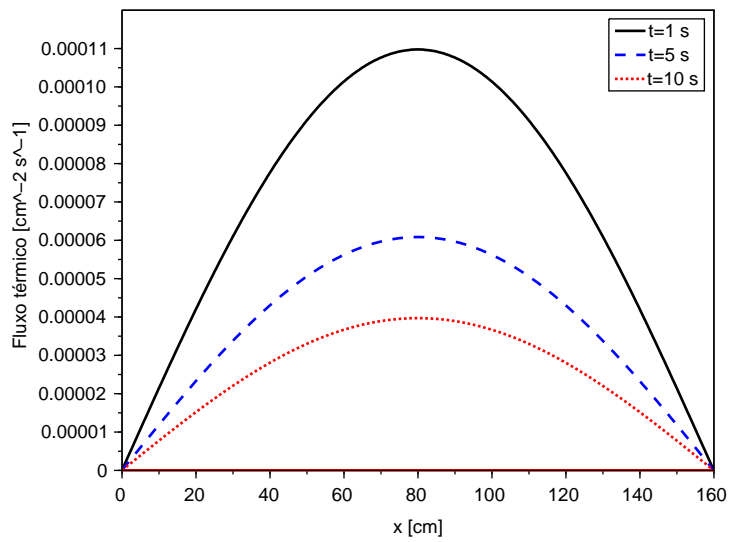


Figura 3.6 – Fluxo térmico para o Problema 1.

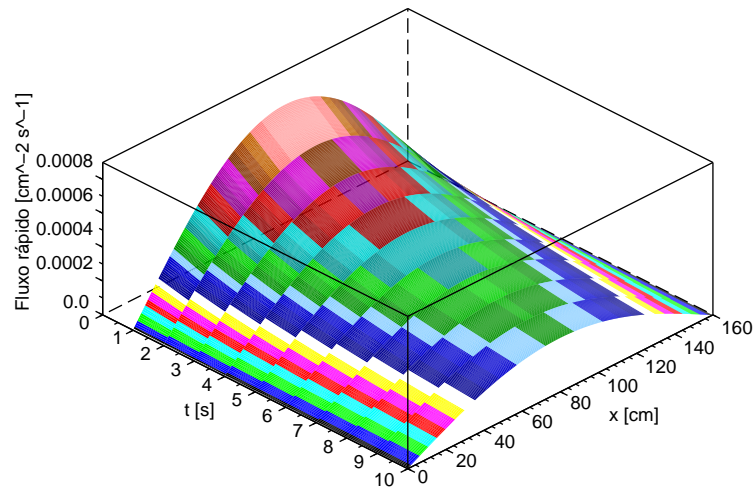


Figura 3.7 – Fluxo rápido para o Problema 1 em vários instantes de tempo.

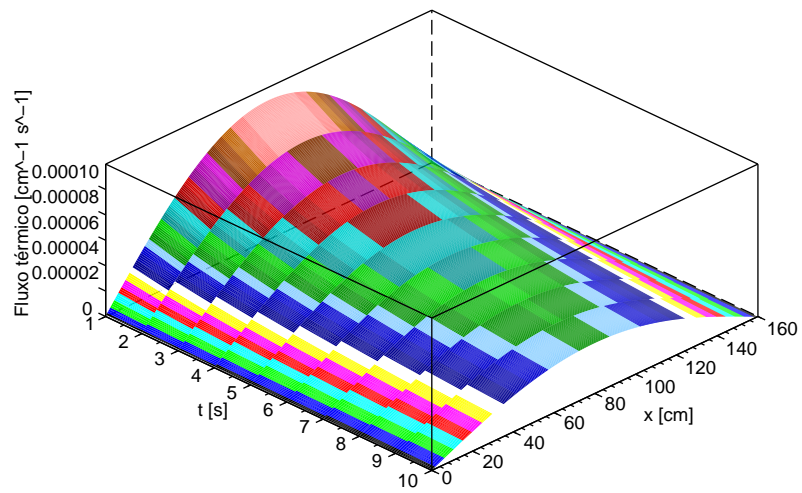


Figura 3.8 – Fluxo térmico para o Problema 1 em vários instantes de tempo.

Tabela 3.3 – Valores dos fluxos rápido e térmico no instante $t = 5$ s para o Problema 1.

$x[cm]$	$\Phi_1[cm^{-2}s^{-1}]$	$\Phi_2[cm^{-2}s^{-1}]$
0	0	0
1	0,00000514073	0,00000064169
10	0,00009085999	0,00001133128
20	0,00018258168	0,00002276923
30	0,00026724643	0,00003332706
40	0,00034188886	0,00004263549
50	0,00040320929	0,00005028227
60	0,00044907166	0,00005600141
70	0,00047764768	0,00005956481
80	0,00048791982	0,00006084572
90	0,00047930962	0,00005977170
100	0,00045233304	0,00005640741
110	0,00040818132	0,00005090169
120	0,00034814770	0,00004341509
130	0,00027479932	0,00003426822
140	0,00019091658	0,00002380773
150	0,00009968143	0,00001243035
160	0	0

Para a análise da convergência da solução para o fluxo rápido e térmico, primeiramente varia-se o número de termos do Método da Decomposição de Adomian modificado. No trabalho desenvolvido por Ceolin, 2010, utilizou-se o mesmo método para a solução da variável temporal, porém empregando GITT na variável espacial com continuação analítica. A fim de comparar a quantidade de termos necessários para atingir a precisão desejada da solução comparado ao método citado da literatura, apresentam-se nas Tabelas 3.4 e 3.5 os valores dos fluxos de nêutrons aumentando o número J de termos da série expandida na variável temporal, na posição $x = X/2$ e no instante $t = 1$ s. Já na Figura 3.9, apresentam-se as contribuições de cada recursão do Método da Decomposição de Adomian modificado para cada coeficiente dependente do tempo da série de Taylor, para a mesma posição e instante de tempo, onde o coeficiente A se refere ao fluxo rápido, B ao fluxo térmico, os índices 0, 1 e 2 ao coeficiente da série de Taylor de ordem constante, linear e quadrática, respectivamente, e j à recursão do Método da Decomposição modificado.

Tabela 3.4 – Valores para o fluxo rápido na posição $x = X/2$ e no instante $t = 1$ s, aumentando o número de termos do Método da Decomposição modificado para o Problema 1.

J	$\Phi_1[cm^{-2}s^{-1}]$
2	0,00014454598
10	0,00052324994
20	0,00073721052
30	0,00082348593
40	0,00085788806
50	0,00087148094
100	0,00088012141
150	0,00088019442
200	0,00088019499
300	0,00088019499
400	0,00088019499

Tabela 3.5 – Valores para o fluxo térmico na posição $x = X/2$ e no instante $t = 1$ s, aumentando o número de termos do Método da Decomposição modificado para o Problema 1.

J	$\Phi_2[cm^{-2}s^{-1}]$
2	0,00001753745
10	0,00006422107
20	0,00009118650
30	0,00010228426
40	0,00010678391
50	0,00010858685
100	0,00010975359
150	0,00010976386
200	0,00010976394
300	0,00010976394
400	0,00010976394

Observando os resultados da Tabela 3.4, pode-se perceber que com a soma de 200 termos obtém-se uma precisão de 8 algarismos significativos, enquanto que no trabalho de Ceolin, 2010 atingiu-se com 40 termos. Entretanto, essa diferença se justifica pela utilização da continuação analítica, que alcança a precisão de 8 algarismos mais rapidamente, mas com a necessidade de calcular todos instantes de tempo anteriores (em cada passo de

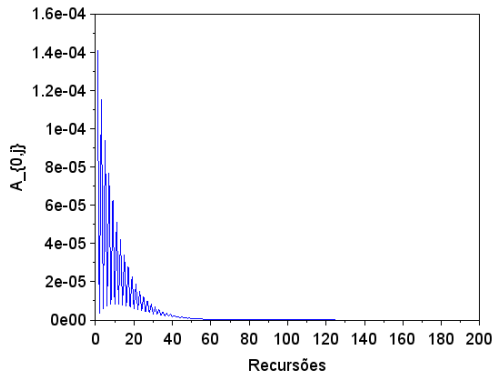
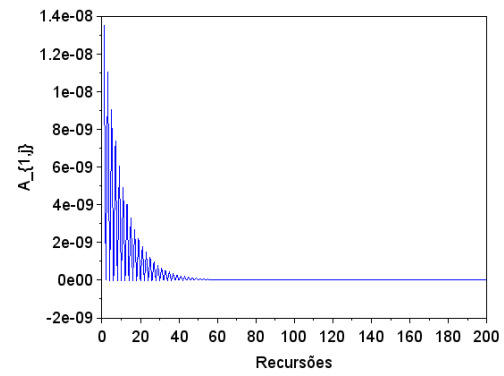
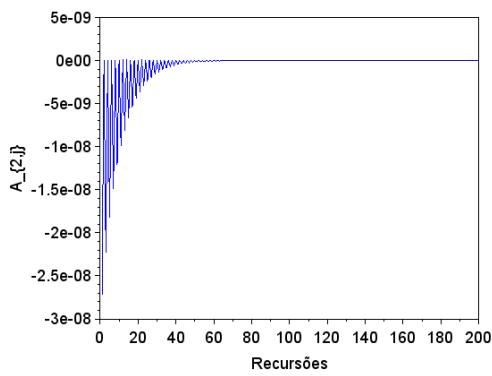
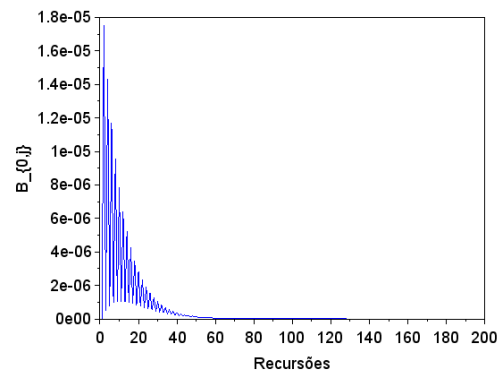
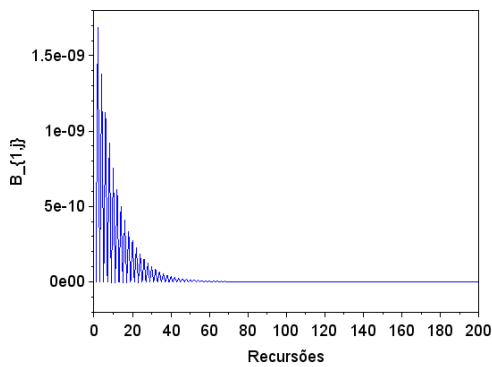
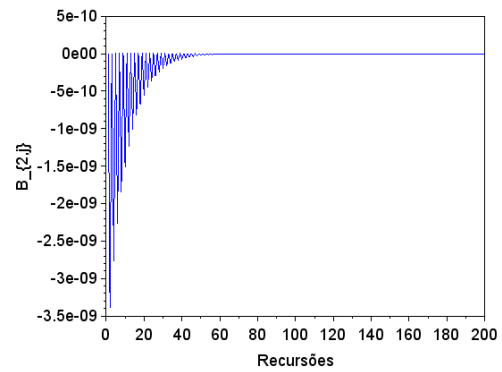
(a) Coeficiente $A_{0,j}^{[l]}$ (b) Coeficiente $A_{1,j}^{[l]}$ (c) Coeficiente $A_{2,j}^{[l]}$ (d) Coeficiente $B_{0,j}^{[l]}$ (e) Coeficiente $B_{1,j}^{[l]}$ (f) Coeficiente $B_{2,j}^{[l]}$

Figura 3.9 – Contribuição de cada recursão do Método da Decomposição modificado para os coeficientes da expansão em séries de Taylor dependentes do tempo do Problema

tempo). As soluções para o fluxo térmico na Tabela 3.5 indicam que a precisão de 8 algarismos também foi alcançada com 200 termos. A necessidade de mais recursões se deve ao fato de que a metodologia corrige a variação temporal precedente, pois não se calcula os instantes anteriores. Em outras palavras, o método proposto nesta tese precisa de 200 recursões no total para alcançar 8 algarismos significativos de precisão, enquanto que os métodos com continuação analítica precisam de determinado número de recursões para cada passo de tempo Δt , precisando de cada vez mais iterações para instantes maiores. Assim, o método da presente tese gera resultados na ordem de segundos, pois necessita calcular somente o instante de tempo desejado. Vale destacar aqui, que para instantes pequenos de tempo não há significativos ganhos computacionais sem a utilização da continuação analítica, porém com o aumento do instante pretendido atingem-se benefícios expressivos. Apesar de precisar de 200 termos para alcançar a mesma precisão, através da Figura 3.9, nota-se que com aproximadamente 60 recursões já é possível obter bons resultados. Na mesma figura, percebe-se que os coeficientes da expansão de ordem quadrática e linear são suaves, como era esperado e foi afirmado anteriormente, tanto para o fluxo rápido como para o térmico. Isso se deve ao fato de que cada polinômio representa um pequeno passo no espaço, com uma variação quase insignificante dentro desse intervalo (quase constante), sendo a variação temporal captada pela dependência do tempo desses coeficientes. A oscilação das contribuições em todos os coeficientes se justifica pela fonte das EDO's, que corrige a solução, ter sinal negativo.

Em seguida, dando sequência a análise de convergência, na Figura 3.10 e na Tabela 3.6 apresentam-se os termos residuais no instante $t = 5$ s para o fluxo rápido e térmico, utilizando a própria equação diferencial para a estimativa, conforme discutido anteriormente. Por esta tabela, pode-se perceber que o maior termo residual para o fluxo rápido é da ordem de 10^{-5} , enquanto que para o fluxo térmico é de 10^{-6} . Para outros instantes de tempo, pode-se visualizar os termos residuais para o fluxo rápido e térmico, respectivamente, nas Figuras 3.11 e 3.12.

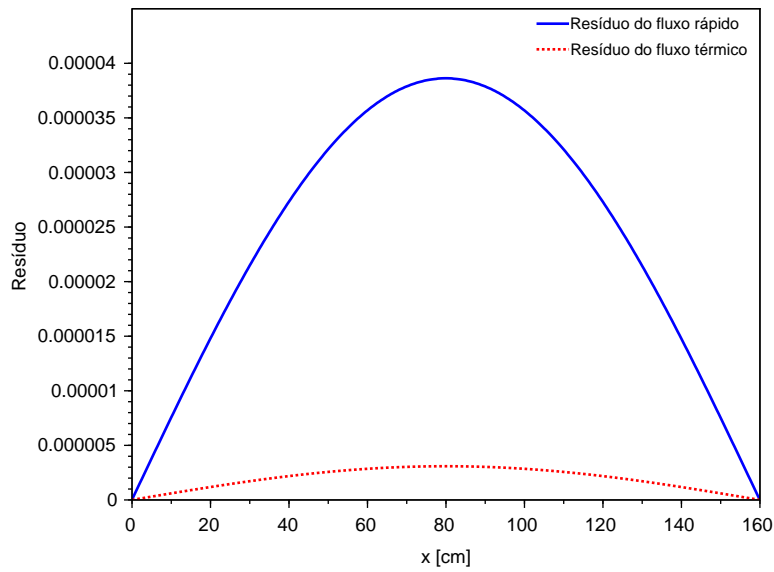


Figura 3.10 – Termos residuais dos fluxos rápido e térmico no instante $t = 5$ s para o Problema 1.

Tabela 3.6 – Termos residuais dos fluxos rápido e térmico no instante $t = 5$ s para o Problema 1.

$x[cm]$	Termo residual do Φ_1	Termo residual do Φ_2
0	0	0
1	$4,0 \cdot 10^{-7}$	$3,2 \cdot 10^{-8}$
10	$7,1 \cdot 10^{-6}$	$5,7 \cdot 10^{-7}$
20	$1,4 \cdot 10^{-5}$	$1,1 \cdot 10^{-6}$
30	$2,1 \cdot 10^{-5}$	$1,6 \cdot 10^{-6}$
40	$2,7 \cdot 10^{-5}$	$2,1 \cdot 10^{-6}$
50	$3,1 \cdot 10^{-5}$	$2,5 \cdot 10^{-6}$
60	$3,5 \cdot 10^{-5}$	$2,8 \cdot 10^{-6}$
70	$3,7 \cdot 10^{-5}$	$3,0 \cdot 10^{-6}$
80	$3,8 \cdot 10^{-5}$	$3,1 \cdot 10^{-6}$
90	$3,7 \cdot 10^{-5}$	$3,0 \cdot 10^{-6}$
100	$3,5 \cdot 10^{-5}$	$2,8 \cdot 10^{-6}$
110	$3,2 \cdot 10^{-5}$	$2,5 \cdot 10^{-6}$
120	$2,7 \cdot 10^{-5}$	$2,2 \cdot 10^{-6}$
130	$2,1 \cdot 10^{-5}$	$1,7 \cdot 10^{-6}$
140	$1,5 \cdot 10^{-5}$	$1,2 \cdot 10^{-6}$
150	$7,8 \cdot 10^{-6}$	$6,3 \cdot 10^{-7}$
160	0	0

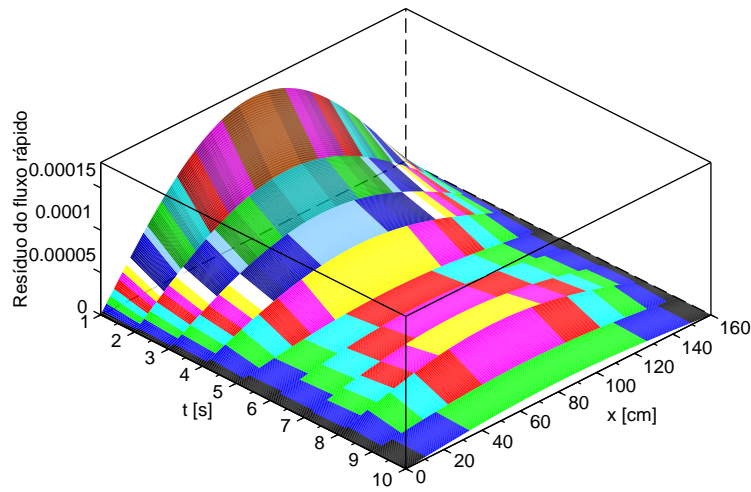


Figura 3.11 – Termo residual do fluxo rápido para o Problema 1 em vários instantes de tempo.

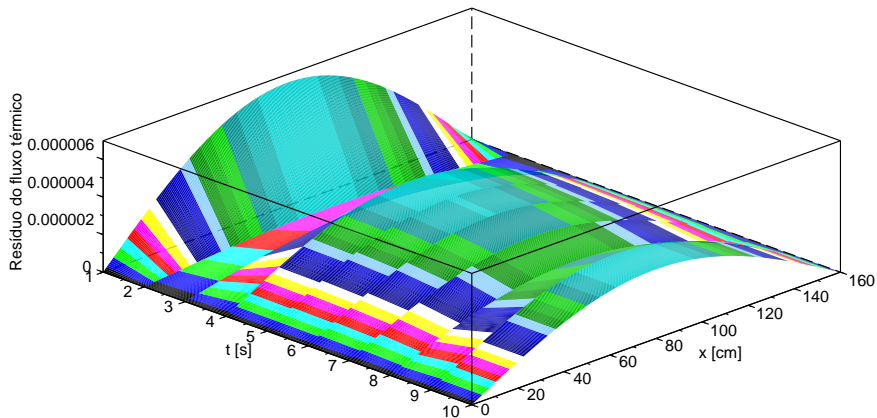
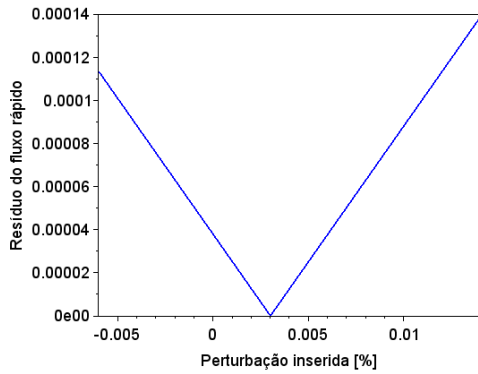


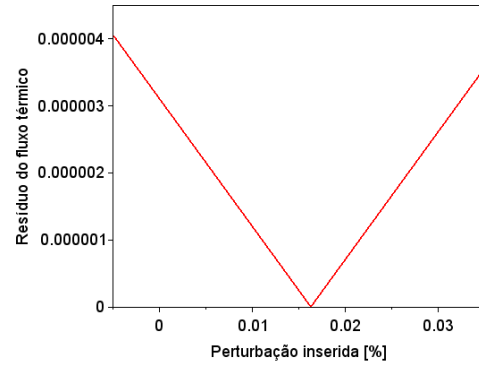
Figura 3.12 – Termo residual do fluxo térmico para o Problema 1 em vários instantes de tempo.

A representação tridimensional dos termos residuais mostra que, tanto para o fluxo rápido como para o térmico, ocorrem mais erros no instante inicial e no centro do domínio espacial. Depois, os termos residuais para o fluxo rápido diminuem e em $t = 8$ s há um pico e volta a decrescer. Já para o fluxo térmico, depois do instante inicial existem mais dois picos, em $t = 4$ e 10 s.

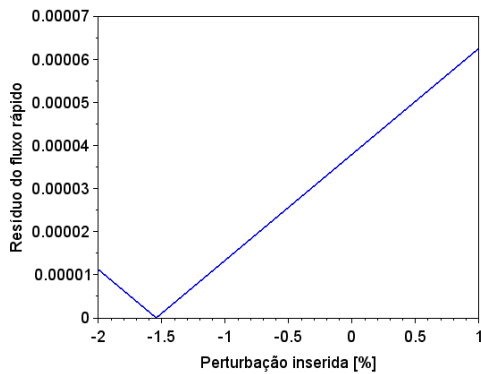
Em relação à estimativa de estabilidade, perturbam-se os coeficientes constante, linear e quadrático da série de Taylor, para visualizar o comportamento da solução. Na Figura 3.13, apresentam-se gráficos que mostram os termos residuais para os fluxos rápido e térmico, inserindo a perturbação nos coeficientes de ordem quadrática ($A_2^{[l]}(t)$ e $B_2^{[l]}(t)$), linear ($A_1^{[l]}(t)$ e $B_1^{[l]}(t)$) e constante ($A_0^{[l]}(t)$ e $B_0^{[l]}(t)$). É possível ver claramente por esses gráficos que a determinação da solução é significativa para o primeiro e segundo termo da expansão em série de Taylor, enquanto que o terceiro (quadrático) pouco influencia. Isto pode ser observado devido à diferença da grandeza de porcentagem que se pode incluir e o termo residual pouco se altera, enquanto que o constante e linear são mais sensíveis à perturbação. Percebe-se que, indicando a melhor solução para o tamanho de segmentação do domínio e grau do polinômio, com uma perturbação no coeficiente constante de aproximadamente 0,003% o termo residual do fluxo rápido zera e com aproximadamente 0,0161% o termo residual do fluxo térmico também zera; para o coeficiente linear, com uma perturbação de $\approx -1,55\%$ para o fluxo rápido e $\approx 17\%$ para o fluxo térmico; para o coeficiente quadrático, com uma perturbação de $\approx 45\%$ para o fluxo rápido e $\approx 68\%$ para o térmico. Cabe ressaltar, que as perturbações dos coeficientes A_n e B_n foram inseridas conjuntamente e o instante de tempo utilizado como exemplo foi $t = 5$ s e na posição $x = X/2$. Destaca-se aqui também que através dessa otimização, como a solução não é exata devido o truncamento das séries, obtêm-se as melhores estimativas para os coeficientes que geram a solução aproximada.



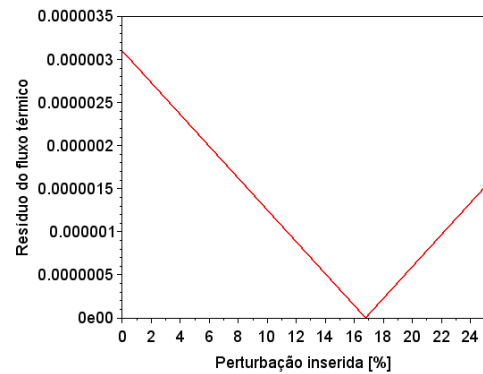
(a) Termo residual do fluxo rápido com perturbação no coeficiente constante



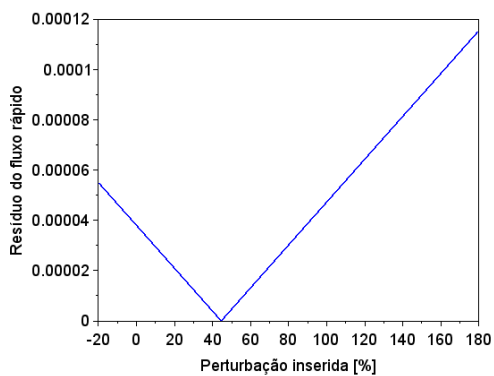
(b) Termo residual do fluxo térmico com perturbação no coeficiente constante



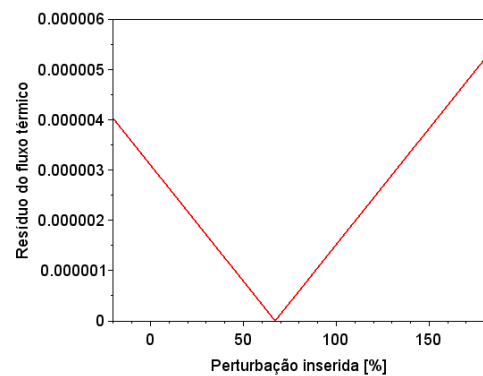
(c) Termo residual do fluxo rápido com perturbação no coeficiente linear



(d) Termo residual do fluxo térmico com perturbação no coeficiente linear



(e) Termo residual do fluxo rápido com perturbação no coeficiente quadrático



(f) Termo residual do fluxo térmico com perturbação no coeficiente quadrático

Figura 3.13 – Termos residuais dos fluxos inserindo perturbações nos coeficientes constantes, lineares e quadráticos para o Problema 1, em $t = 5$ s e na posição $x = X/2$.

3.3 Resultados Numéricos para o Problema 2

A geometria do Problema 2 consiste em um domínio de comprimento $X = 10$ cm em um meio homogêneo com condições de contorno $\frac{d\Phi(0,t)}{dx} = 0$ e $\Phi(X,t) = 0$. A condição inicial é obtida através da metodologia proposta por Ceolin, 2014, apresentada na Figura 3.14 para o fluxo rápido e térmico normalizados. Cabe ressaltar que o incremento no espaço utilizado foi $\Delta x = 0,025$ cm para esse caso. Os dados e condições desse problema, para comparação, estão presentes no trabalho de Oliveira, 2013.

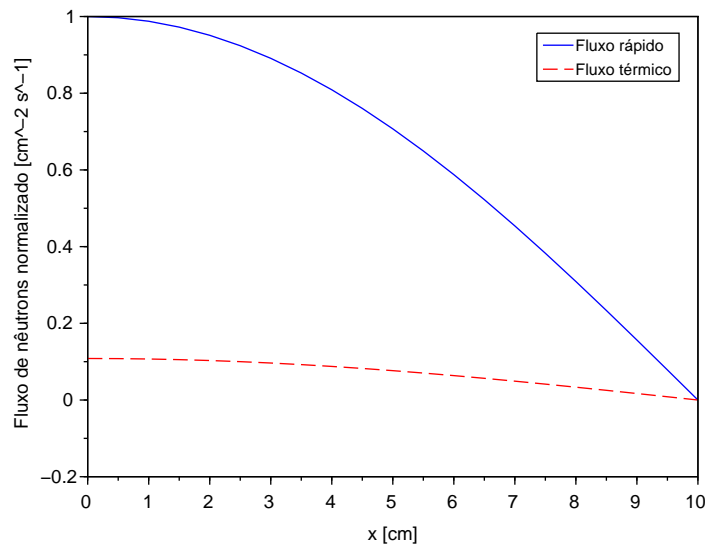


Figura 3.14 – Condições iniciais normalizadas para o fluxo rápido e térmico para o Problema 2.

Os parâmetros nucleares utilizados para simulação numérica são os mesmos apresentados na Tabela 3.1 para o Problema 1 e os referentes aos nêutrons atrasados estão listados na Tabela 3.7.

Tabela 3.7 – Parâmetros referentes aos nêutrons atrasados para o Problema 2.

i	β_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

O comportamento do fluxo rápido e térmico podem ser visualizados através dos gráficos das Figuras 3.15 e 3.16 para os instantes de tempo $t = 1, 5, 10$ e 30 s. Já nas Figuras 3.17 e 3.18, pode-se observar os fluxos para vários instantes de tempo em representação 3D. Também apresentam-se os valores dos fluxos na Tabela 3.8. O comportamento do fluxo, como no primeiro caso, tende a diminuir com o aumento do tempo (subcrítico).

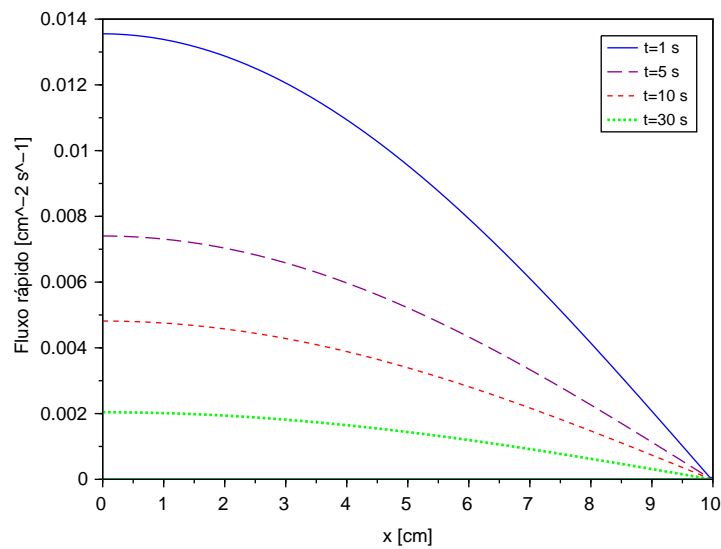


Figura 3.15 – Fluxo rápido para o Problema 2.

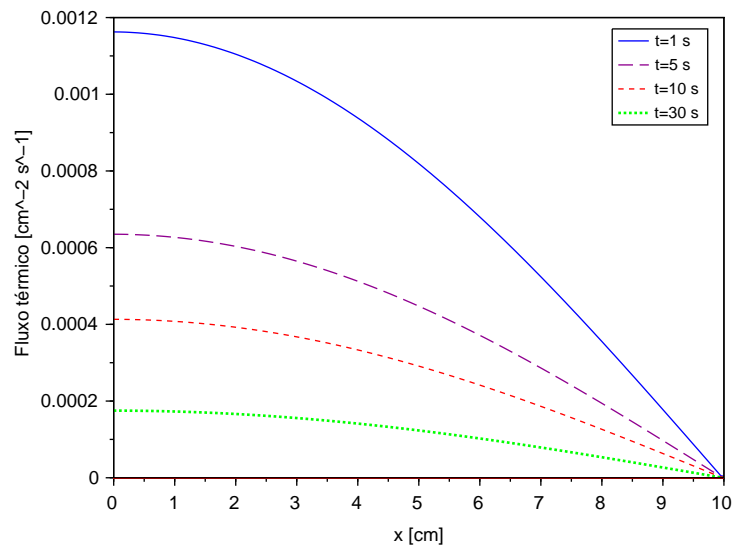


Figura 3.16 – Fluxo térmico para o Problema 2.

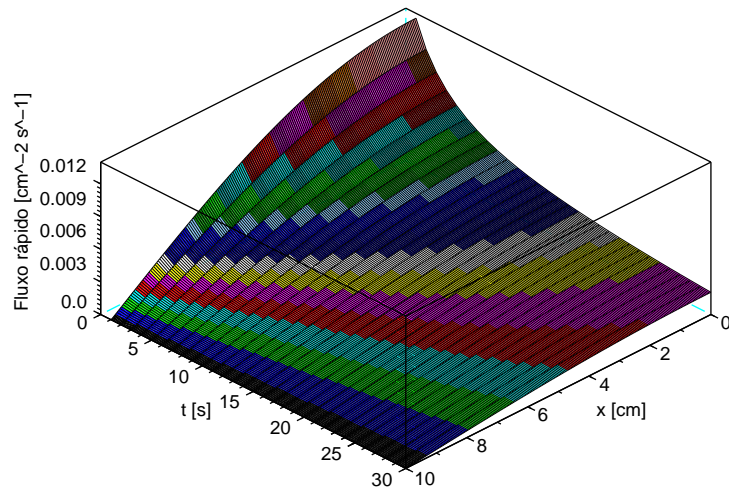


Figura 3.17 – Fluxo rápido para o Problema 2 em vários instantes de tempo.

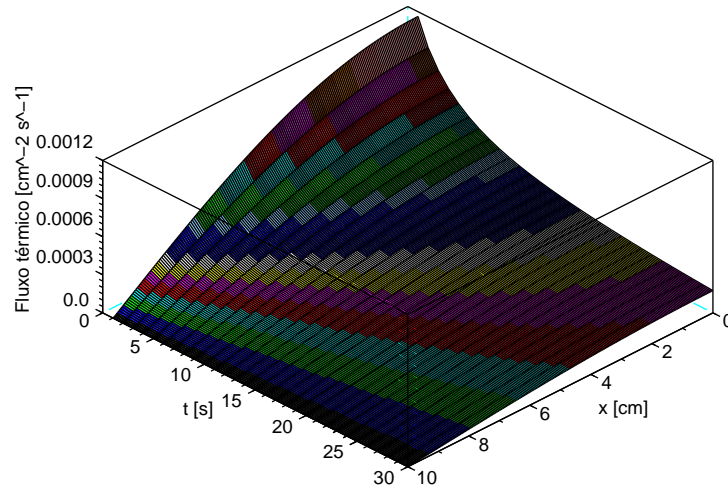


Figura 3.18 – Fluxo térmico para o Problema 2 em vários instantes de tempo.

Tabela 3.8 – Valores dos fluxos rápido e térmico no instante $t = 5$ s para o Problema 2.

$x[cm]$	$\Phi_1[cm^{-2}s^{-1}]$	$\Phi_2[cm^{-2}s^{-1}]$
1	0,00731725697	0,00062768532
2	0,00705094955	0,00060484053
3	0,00661066401	0,00056707161
4	0,00600796949	0,00051537107
5	0,00525693698	0,00045094586
6	0,00437685634	0,00037545081
7	0,00338910600	0,00029071977
8	0,00231789796	0,00019882967
9	0,00118928342	0,00010201519
10	0	0

Em seguida, analisa-se a convergência da solução para o fluxo rápido e térmico aumentando o número de termos do Método da Decomposição de Adomian modificado. A fim de comparar a quantidade de termos necessários para estabilizar a solução comparando com o método da literatura Oliveira, 2013, apresentam-se nas Tabelas 3.9 e 3.10 os valores dos fluxos de nêutrons aumentando o número J de termos do Método da Decomposição modificado na variável temporal, na posição $x = 4$ cm e no instante $t = 1$ s. Na Figura 3.9, apresentam-se as contribuições de cada recursão do Método da Decomposição de Adomian modificado para cada coeficiente dependente do tempo da série de Taylor,

para a mesma posição e instante de tempo, onde o coeficiente A se refere ao fluxo rápido, B ao fluxo térmico, os índices 0, 1 e 2 ao coeficiente da série de Taylor de ordem constante, linear e quadrática, respectivamente, e j à recursão do Método da Decomposição modificado. Cabe destacar que no trabalho desenvolvido por Oliveira, 2013 resolveu-se esse caso empregando séries de autofunções seno para expandir as variáveis.

Tabela 3.9 – Valores para o fluxo rápido aumentando o número de termos do Método da Decomposição modificado na posição $x = 4$ cm e no instante $t = 1$ s para o Problema 2.

J	$\Phi_1[cm^{-2}s^{-1}]$
2	0,00050525007
10	0,00366129935
20	0,00713685609
30	0,00916795671
40	0,01018104957
50	0,01064764682
100	0,01099629575
150	0,01100015502
200	0,01100018912
300	0,01100018939
400	0,01100018939

Tabela 3.10 – Valores para o fluxo térmico aumentando o número de termos do Método da Decomposição modificado na posição $x = 4$ cm e no instante $t = 1$ s para o Problema 2.

J	$\Phi_2[cm^{-2}s^{-1}]$
2	0,00001620303
10	0,00025349618
20	0,00056792531
30	0,00076213264
40	0,00086145881
50	0,00090789450
100	0,00094312193
150	0,00094352264
200	0,00094352625
300	0,00094352628
400	0,00094352628

Verificando os resultados na Tabela 3.9, pode-se perceber que com a soma de 300

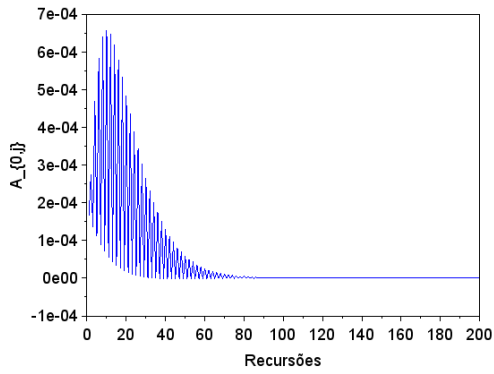
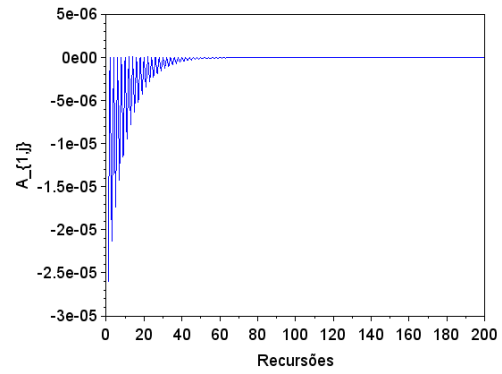
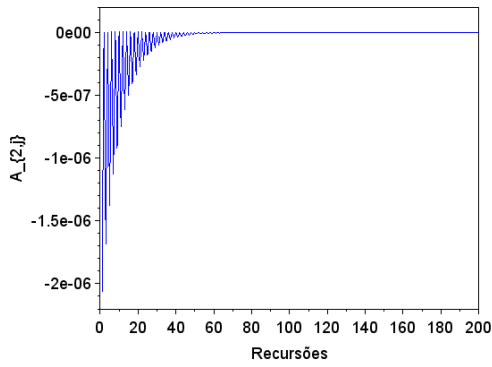
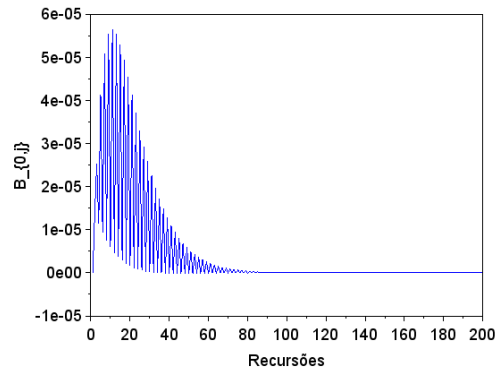
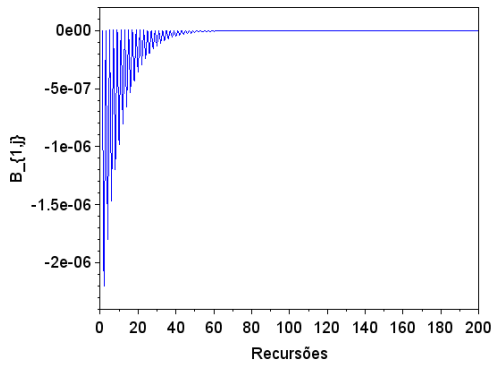
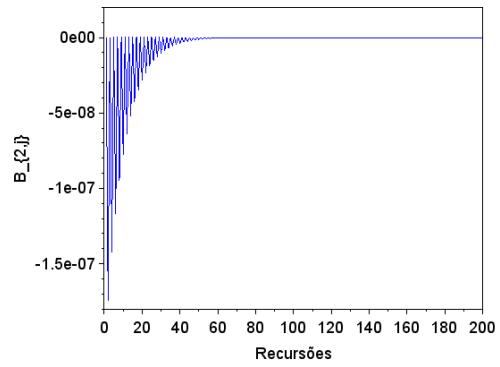
(a) Coeficiente $A_{0,j}^{[l]}$ (b) Coeficiente $A_{1,j}^{[l]}$ (c) Coeficiente $A_{2,j}^{[l]}$ (d) Coeficiente $B_{0,j}^{[l]}$ (e) Coeficiente $B_{1,j}^{[l]}$ (f) Coeficiente $B_{2,j}^{[l]}$

Figura 3.19 – Contribuição de cada recursão do Método da Decomposição modificado para os coeficientes da expansão em séries de Taylor dependentes do tempo do Problema

termos obtêm-se uma precisão de 8 algarismos significativos, enquanto que no trabalho de Oliveira, 2013 afirma-se que se atingiu 5 algarismos com 150 termos. Os resultados para o fluxo térmico na Tabela 3.10 indicam que a precisão de 8 algarismos também foi alcançada com 300 termos. Entretanto, na Figura 3.9 percebe-se que com aproximadamente 80 recursões obtêm-se resultados satisfatórios. Na mesma figura, nota-se que os coeficientes da expansão de ordem quadrática utilizada são suaves e assim contribuem pouco para a solução.

Posteriormente, ainda analisando a convergência e o controle do erro, na Figura 3.20 e na Tabela 3.11 mostram-se os termos residuais no instante $t = 5$ s para o fluxo rápido e térmico, conforme procedimento discutido anteriormente. Analisando essa tabela, pode-se perceber que o maior termo residual para o fluxo rápido é da ordem de 10^{-4} e para o fluxo térmico 10^{-5} , ambos no início da placa. Para outros instantes de tempo, pode-se visualizar os termos residuais para o fluxo rápido e térmico, respectivamente, nas Figuras 3.21 e 3.22.

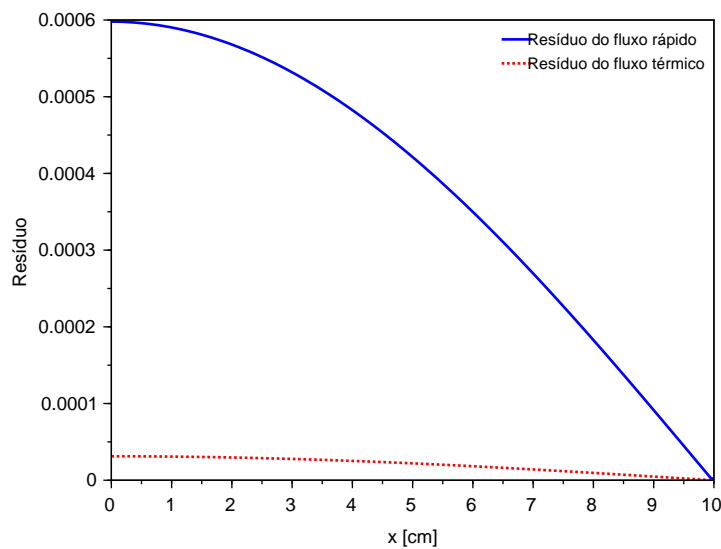


Figura 3.20 – Termos residuais dos fluxos rápido e térmico no instante $t = 5$ s para o Problema 2.

Tabela 3.11 – Termos residuais dos fluxos rápido e térmico no instante $t = 5$ s para o Problema 2.

$x[cm]$	Termo residual do Φ_1	Termo residual do Φ_2
1	$5,9 \cdot 10^{-4}$	$3,0 \cdot 10^{-5}$
2	$5,6 \cdot 10^{-4}$	$2,9 \cdot 10^{-5}$
3	$5,3 \cdot 10^{-4}$	$2,7 \cdot 10^{-5}$
4	$4,8 \cdot 10^{-4}$	$2,5 \cdot 10^{-5}$
5	$4,2 \cdot 10^{-4}$	$2,2 \cdot 10^{-5}$
6	$3,5 \cdot 10^{-4}$	$1,8 \cdot 10^{-6}$
7	$2,7 \cdot 10^{-4}$	$1,4 \cdot 10^{-5}$
8	$1,8 \cdot 10^{-4}$	$9,7 \cdot 10^{-6}$
9	$9,6 \cdot 10^{-5}$	$5,0 \cdot 10^{-6}$
10	0	0

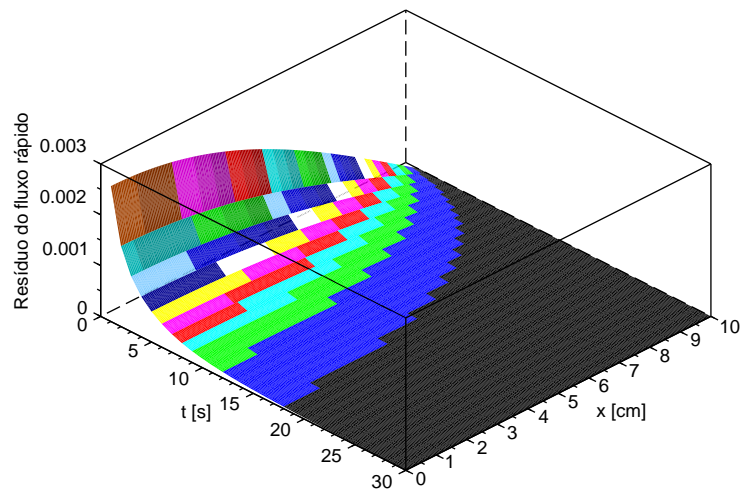


Figura 3.21 – Termo residual do fluxo rápido para o Problema 2 em vários instantes de tempo.

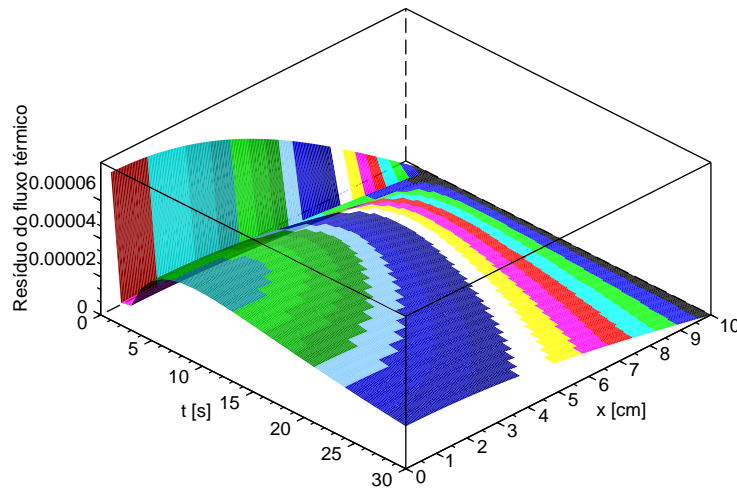
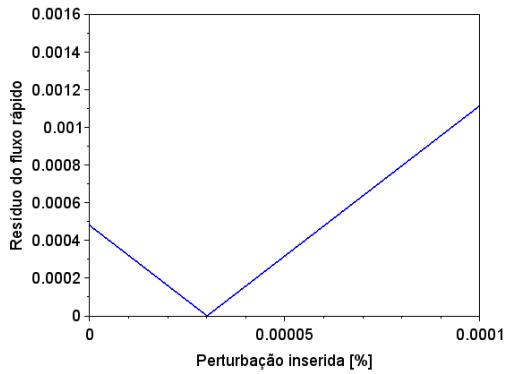


Figura 3.22 – Termo residual do fluxo térmico para o Problema 2 em vários instantes de tempo.

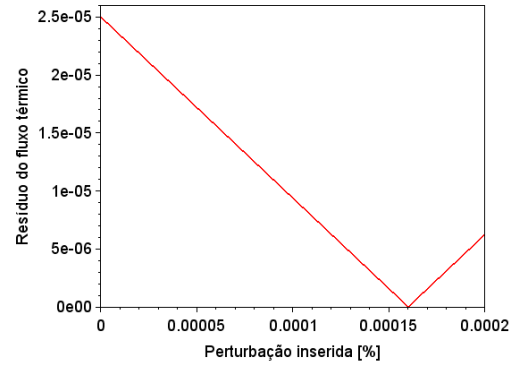
Nas representações tridimensionais dos termos residuais, pode-se perceber que para o fluxo rápido o termo residual diminui com o passar do tempo e para o fluxo térmico ocorre um pico em torno do instante $t = 10$ s.

Em seguida, para completar a análise com a estimativa de estabilidade para o Problema 2, perturbam-se os coeficientes da expansão das séries para visualizar o comportamento da solução. Na Figura 3.23 apresentam-se os gráficos que mostram os termos residuais para os fluxos rápido e térmico, inserindo a perturbação nos coeficientes de ordem quadrática ($A_2^{[l]}(t)$ e $B_2^{[l]}(t)$), linear ($A_1^{[l]}(t)$ e $B_1^{[l]}(t)$) e constante ($A_0^{[l]}(t)$ e $B_0^{[l]}(t)$). Neste caso, o primeiro e o segundo termo são significativos para a solução, enquanto que o de ordem quadrática pouco contribui. Esse fato é constatado nos gráficos pela diferença da grandeza de porcentagem que se pode inserir sem que ocorra discrepância na solução final para $A_2^{[l]}(t)$ e $B_2^{[l]}(t)$, ocorrendo o oposto para os demais. Percebe-se também, que a melhor solução para o tamanho de segmentação do domínio e grau do polinômio para os coeficientes constantes ocorre com uma perturbação de aproximadamente 0,00003% para o fluxo rápido e aproximadamente 0,00016% para o fluxo térmico. Já para os coeficientes lineares, para o fluxo rápido com aproximadamente 0,11% de perturbação inserida e 0,6% para o fluxo térmico. Para o quadrático, com $\approx -10\%$ para o fluxo rápido e $\approx -85\%$ para o fluxo térmico. Cabe ressaltar também que as perturbações inseridas em todos os

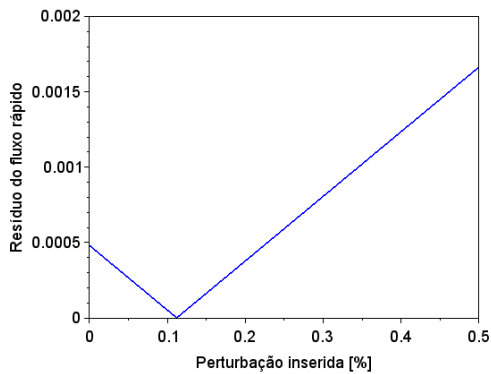
coeficientes geram maior perturbação na solução do fluxo térmico. Para o Problema 2, as perturbações dos coeficientes A_n e B_n (com $n = 0, 1$ e 2) foram inseridas conjuntamente e o instante de tempo utilizado como exemplo foi $t = 5$ s e posição $x = 4$ cm.



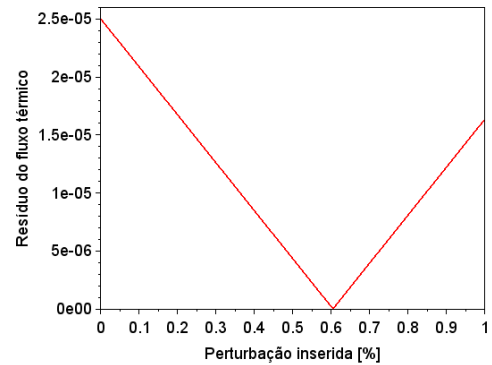
(a) Termo residual do fluxo rápido com perturbação no coeficiente constante



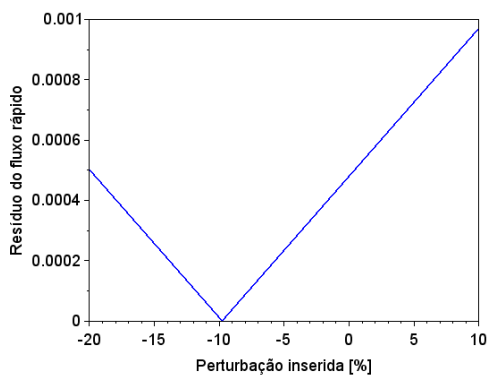
(b) Termo residual do fluxo térmico com perturbação no coeficiente constante



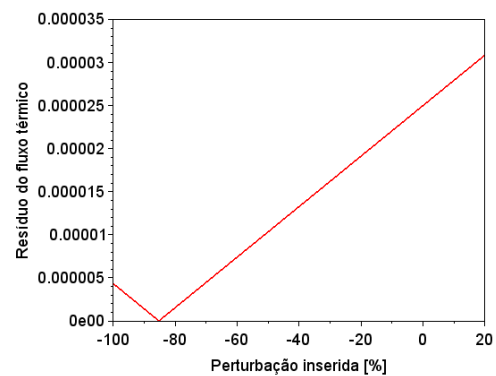
(c) Termo residual do fluxo rápido com perturbação no coeficiente linear



(d) Termo residual do fluxo térmico com perturbação no coeficiente linear



(e) Termo residual do fluxo rápido com perturbação no coeficiente quadrático



(f) Termo residual do fluxo térmico com perturbação no coeficiente quadrático

Figura 3.23 – Termos residuais dos fluxos inserindo perturbações nos coeficientes constantes, lineares e quadráticos para o Problema 2, $t = 5$ s e na posição $x = 4$ cm.

4 SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DE CINÉTICA ESPACIAL DE NÊUTRONS UNIDIMENSIONAIS EM UM DOMÍNIO HETEROGÊNEO

4.1 Apresentação do problema

Nesta seção, apresentam-se os procedimentos aplicados para a determinação da solução das Equações de Cinética Espacial de Difusão de Nêutrons, com dois grupos de energia, seis grupos de precursores de nêutrons atrasados, em geometria cartesiana unidimensional e domínio heterogêneo. Apesar de não se ter obtido a solução final do problema, este capítulo tem por objetivo advertir e instruir futuros trabalhos com o mesmo tema desta tese, como também para outras áreas do conhecimento, que utilizam o método da Decomposição, ou tenham presença de rigidez, assim como em metodologias com dificuldade na aplicação das condições de interface em meios heterogêneos.

Um problema com domínio heterogêneo apresenta parâmetros físicos nucleares com diferentes valores para cada região do reator e, por isso, são descontínuos sobre as interfaces entre refletores, combustível, barras de controle ou moderador. Essas discontinuidades em alguns casos apresentam grandes saltos. As condições de interface são conhecidas como continuidade de fluxo e de corrente, que garantem que a componente tangencial do fluxo e a componente normal são contínuas através da superfície em questão.

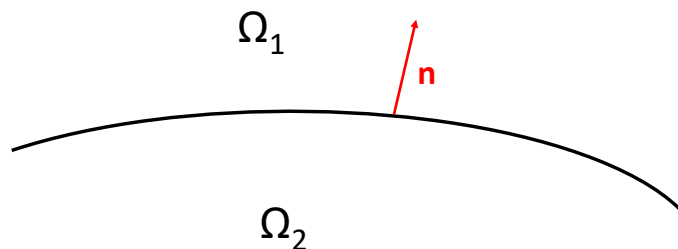


Figura 4.1 – Interface entre os meios Ω_1 e Ω_2 .

Cabe evidenciar que o parâmetro nuclear que gera grandes saltos entre as interfaces é o coeficiente de Difusão, que é a constante de proporcionalidade que relaciona a densidade de corrente com o gradiente espacial do fluxo, como mencionado anteriormente. Esse parâmetro surge da aplicação da Lei de Fick, onde se assume um meio infinito. Então,

vale lembrar que ela é válida somente se as dimensões do problema são maiores que alguns livres caminhos médios da borda do meio, uma vez que o termo exponencial desaparece rapidamente com uma pequena distância. Também se faz a suposição de um meio uniforme, assim, na fronteira entre dois meios com diferentes valores para o espalhamento, a Lei de Fick ainda vale, desde que não se altere rapidamente a variação do fluxo. Portanto, a Lei de Fick é válida se a segunda derivada do fluxo não variar consideravelmente.

Para ilustrar todos os procedimentos a serem apresentados neste capítulo, toma-se como exemplo a configuração apresentada na Figura 4.2, que é um esboço de um domínio contendo três regiões. A região 1 é limitada pelas posições de interface $x = 0$ cm e $x = 40$ cm, a região 2 por $x = 40$ cm e $x = 200$ cm e a região 3 por $x = 200$ cm e $x = 240$ cm, sendo que as regiões 1 e 3 são constituídas pelo mesmo material. Os parâmetros nucleares podem ser visualizados na Tabela 4.1 e os referentes aos nêutrons atrasados são os mesmos que para o Problema 1 (Tabela 3.2). A condição inicial do problema, gerada com a metodologia descrita por Ceolin, 2014, pode ser visualizada na Figura 4.3.

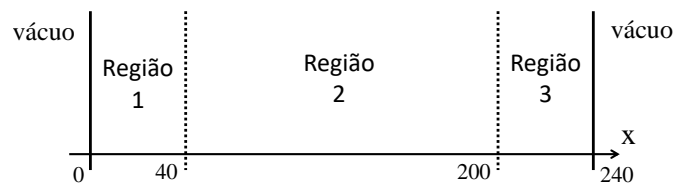


Figura 4.2 – Geometria do problema heterogêneo.

Tabela 4.1 – Parâmetros nucleares para o problema heterogêneo.

Região	$D_1^{[l]}$ [cm]	$D_2^{[l]}$ [cm]	$\Sigma_{r1}^{[l]}$ [cm ⁻¹]	$\Sigma_{r2}^{[l]}$ [cm ⁻¹]	$\nu_1 \Sigma_{f1}^{[l]}$ [cm ⁻¹]	$\nu_2 \Sigma_{f2}^{[l]}$ [cm ⁻¹]	$\Sigma_{s12}^{[l]}$ [cm ⁻¹]
1 e 3	1,5	0,5	0,026	0,18	0,01	0,2	0,015
2	1,0	0,5	0,02	0,08	0,005	0,099	0,01

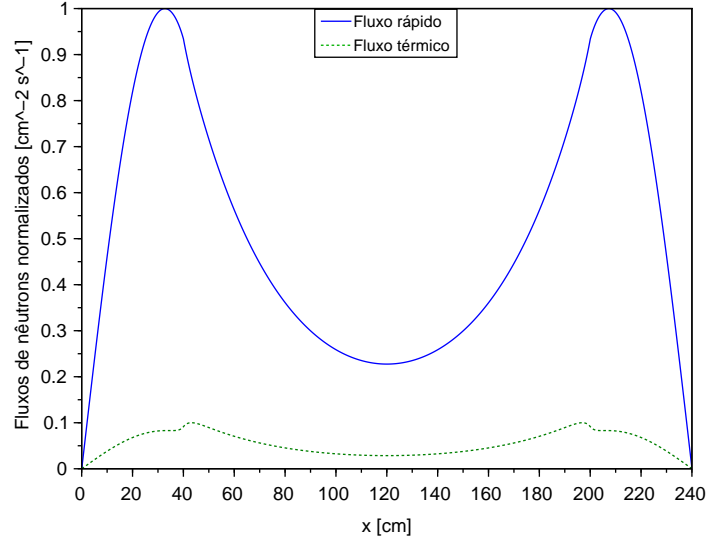


Figura 4.3 – Condições iniciais normalizadas para o fluxo rápido e térmico para o problema heterogêneo.

As equações que descrevem o problema são as mesmas do caso homogêneo, contudo considerando que cada célula espacial tem seus parâmetros característicos distintos em diferentes regiões, pode-se reescrevê-las como:

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{v_1} \frac{\partial \Phi_1^{[l]}(x,t)}{\partial t} &= D_1^{[l]} \nabla^2 \Phi_1^{[l]}(x,t) - \Sigma_{r1}^{[l]} \Phi_1^{[l]}(x,t) + (1 - \beta) (\nu_1 \Sigma_{f1}^{[l]} \Phi_1^{[l]}(x,t) + \nu_2 \Sigma_{f2}^{[l]} \Phi_2^{[l]}(x,t)) \\
 &\quad + \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i^{[l]}(x,t), \\
 \frac{1}{v_2} \frac{\partial \Phi_2^{[l]}(x,t)}{\partial t} &= D_2^{[l]} \nabla^2 \Phi_2^{[l]}(x,t) - \Sigma_{a2}^{[l]}(t) \Phi_2^{[l]}(x,t) + \Sigma_{s12}^{[l]} \Phi_1^{[l]}(x,t), \\
 \frac{\partial C_i^{[l]}(x,t)}{\partial t} &= \beta_i (\nu_1 \Sigma_{f1}^{[l]} \Phi_1^{[l]}(x,t) + \nu_2 \Sigma_{f2}^{[l]} \Phi_2^{[l]}(x,t)) - \lambda_i C_i^{[l]}(x,t),
 \end{aligned} \tag{4.1}$$

onde $i = 1 : 6$ e onde $l = 1 : L$ é o número da célula no espaço. As condições iniciais do problema são dadas por:

$$\begin{aligned}
 \Phi_1^{[l]}(x, 0) &= \Phi_{1,0}^{[l]}(x), \\
 \Phi_2^{[l]}(x, 0) &= \Phi_{2,0}^{[l]}(x), \\
 C_i^{[l]}(x, 0) &= \frac{\beta_i}{\lambda_i} [\nu_1 \Sigma_{f1}^{[l]} \Phi_{1,0}^{[l]}(x) + \nu_2 \Sigma_{f2}^{[l]} \Phi_{2,0}^{[l]}(x)],
 \end{aligned} \tag{4.2}$$

onde $\Phi_{g,0}^{[l]}(x)$ indica a solução do fluxo para o problema estacionário, não confundir com

os índices da série de Taylor e Decomposição. E as condições de contorno e interface:

$$\begin{aligned}
 \Phi_g^{[1]}(0, t) &= 0, \\
 \Phi_g^{[L]}(X, t) &= 0, \\
 \Phi_g^{[l]}(x, t) &= \Phi_g^{[l+1]}(x, t), \\
 -D_g^{[l]} \frac{\partial \Phi_g^{[l]}(x, t)}{\partial x} &= -D_g^{[l+1]} \frac{\partial \Phi_g^{[l+1]}(x, t)}{\partial x}.
 \end{aligned}
 \tag{4.3}$$

4.2 Cuidados computacionais

Primeiramente, vale destacar que para construir o algoritmo e realizar as simulações numéricas, utilizou-se o programa SciLab. Aliado à mudança drástica de parâmetros entre materiais distintos, ainda se deve lidar com as dificuldades que já existiam anteriormente, como a rigidez que gera um mau condicionamento nas matrizes e a sensibilidade da convergência, que se agrava diante dos degraus dos fluxos nas interfaces. Para caracterizar um problema como rígido, a sua “medida de rigidez” deve ser elevada (≥ 500). Nas regiões 1 e 3 da placa apresentada, o condicionamento das matrizes são: $cond(\mathbf{W}_0) \approx 10^7$, $cond(\mathbf{W}_1) \approx 10^{27}$ e $cond(\mathbf{W}) \approx 10^{11}$. Nesse tipo de caso, comandos numéricos, como por exemplo, inversão e exponencial de matrizes devem ser ratificados. Uma maneira de validar a inversão de uma matriz computacionalmente é multiplicar a inversa da matriz calculada através do comando do programa pela matriz original repetidas vezes, se a inversão está certa deve-se obter como resposta uma matriz identidade, ou muito próximo dela. No software utilizado, o SciLab, a inversão das matrizes não causou inconvenientes. No entanto, o pacote que calcula a exponencial da matriz, sim. A Figura 4.4 mostra o resultado da exponencial da matriz $\mathbf{W}_0 \cdot t$ na região 1.

```

--> expm(W0_R1*t)
ans =

    0.9979119807779501805101    0.          0.          0.          0.          0.          0.
    0.          0.9937970958166579826809    0.          0.          0.          0.          0.
    0.          0.          0.          0.          0.          0.          0.
    0.          0.          0.          0.          0.          0.          0.
    0.          0.          0.          0.          0.          0.          0.
    0.          0.          0.          0.          0.          0.          0.
    0.          0.          0.          0.          0.          0.          0.
    0.          0.          0.          0.          0.          0.          0.

```

Figura 4.4 – Exponencial da matriz \mathbf{W}_0 na região 1 através do comando “expm” do SciLab.

O comando do SciLab “expm” calcula a exponencial da matriz primeiro diagonalizando em blocos e, em seguida, aplicando uma aproximação de Padé em cada bloco. Como pode ser visto na Figura 4.4, o valor obtido pelo comando está errado, pois se espera que nas duas primeiras linhas se obtenham valores muito próximos de zero e nas seguintes, aproximadamente um. Segundo Molery e Loanz, 2003, os erros de arredondamento e custos computacionais das aproximações por Taylor ou Padé aumentam com o aumento de t ou quando a propagação dos autovalores aumenta. Estas dificuldades podem ser contornadas utilizando a escala e quadratura, uma propriedade fundamental das funções exponenciais:

$$\exp(\mathbf{W}_0 t) = (\exp((\mathbf{W}_0 t)/m))^m, \quad (4.4)$$

onde m deve ser escolhido de tal maneira que $\|(\mathbf{W}_0 t)/m\| < 1$. A Figura 4.5 mostra um exemplo.

```
--> expm(W0_R1*t/1000)^1000
ans =

      column 1 to 5

0.  0.  0.  0.  0.
0.  0.  0.  0.  0.
0.  0.  0.9876765632116704107801  0.  0.
0.  0.  0.  0.9699604320674091173515  0.
0.  0.  0.  0.  0.8949387489288547214983
0.  0.  0.  0.  0.
0.  0.  0.  0.  0.
0.  0.  0.  0.  0.

      column 6 to 8

0.  0.  0.
0.  0.  0.
0.  0.  0.
0.  0.  0.
0.  0.  0.
0.7400777727467029443176  0.  0.
0.  0.31981902181618726555  0.
0.  0.  0.0492916787604587916527
```

Figura 4.5 – Exponencial da matriz \mathbf{W}_0 na região 1 através do comando “expm” do SciLab utilizando escala e quadratura.

Ressalta-se que para grandes valores de t , o comando pode falhar, sendo que uma outra possibilidade é escrever: $\exp(\mathbf{W}_0 t) = ((\exp(\mathbf{W}_0/m))^m)^t$. Como pode ser observado na Figura 4.5, os elementos da diagonal das duas primeiras linhas resultam em zero através

do comando referido, pois o valor é tão próximo de zero que computacionalmente o assume assim. Utilizando a escala e quadratura e fazendo uma expansão em série de Taylor com 20 termos, obtêm-se os valores $\approx 1,48 \cdot 10^{-323}$ e $\approx 4,44 \cdot 10^{-323}$ para os elementos da diagonal da matriz nas duas primeiras linhas (relacionada às equações para os fluxos). Apesar de ser um valor muito pequeno, sendo lido como zero computacionalmente e a fonte contendo elementos grandes, pode ocasionar uma dificuldade de convergência na solução. Em outras palavras, o termo que deveria ajustar o tamanho da correção está sendo arredondado computacionalmente para zero. Vale destacar aqui, que testou-se o cálculo das exponenciais e simulou-se algumas recursões do método da Decomposição em outros programas, como C++ e Fortran, a fim de verificar o nível de precisão e não se obteve melhoras significativas.

4.3 Abordagens para aplicação das condições de contorno e interface e artifícios aplicados para obtenção da solução

Problemas com características distributivas como, por exemplo, densidade de partículas, de energia, de fluxo e corrente em domínios heterogêneos globalmente, mas seccionalmente homogêneos, podem ser resolvidos por expansões locais da solução (como no caso da presente tese), onde a coordenada de referência da expansão não deve estar localizada no contorno de domínios vizinhos a fim de evitar divergências. Dependendo das características da equação diferencial parcial que descreve a continuidade dinâmica da função em questão, a continuidade da função que depende do gradiente, pode não existir. Um exemplo é a própria Equação de Difusão, onde a continuidade do fluxo escalar e a densidade de corrente nas fronteiras deve ser assegurada. Na presente tese, esses graus de liberdade possibilitam construir a solução em cada célula (homogênea) utilizando a mesma metodologia. Isso implica que existem “degraus” entre as soluções das várias regiões consideradas, que surgem pelo fato de que os parâmetros nucleares são distintos. Assim, com o intuito de obter uma solução global mantendo a invariância de escala com os parâmetros nucleares pré-determinados, é possível fixar escalas com espectros apropriados, de modo que a continuidade ajuste a magnitude do fluxo de nêutrons garantindo o acoplamento das interfaces.

Pode-se também, para que ocorra a conexão de todos os coeficientes das expansões em séries incluindo as condições de interface, realizar uma otimização nas condições de

interface em cada troca de região, por exemplo, através dos Multiplicadores Lagrangeanos. Esta técnica realiza uma otimização do problema através da melhor combinação entre os parâmetros existentes, cumprindo o vínculo nas interfaces. Na realidade, a solução de uma região é estendida sobre as outras (mesmo que não seja verdadeira) para determinar a curva tangente com as restrições do problema (condições de contorno e interface). Então, essa metodologia é uma estratégia para encontrar máximos e mínimos locais de uma função que está sujeita a restrições exatas, como o problema de difusão em que deve-se impor a continuidade de fluxo e corrente de nêutrons. Porém, os Multiplicadores de Lagrange adicionam novas incógnitas às equações originais, podendo gerar grandes sistemas e também uma implementação numérica mal condicionada. A construção da solução das Equações de Cinética Espacial da Difusão de Nêutrons juntamente com os Multiplicadores Lagrangeanos para assegurar a aplicação das condições de contorno e interface é apresentada na Subseção 4.3.1.

Outra alternativa seria empregar a técnica de Wiener-Hopf, que possibilita a resolução explicitamente de equações diferenciais parciais lineares que estão sujeitas a condições de contorno em domínio semi-infinitos. Esta metodologia faz uso de transformadas integrais, como a Transformada de Fourier ou Mellin, explorando as propriedades analíticas das funções complexas. Com sua aplicação, transformam-se equações, condições de contorno e interface em um sistema, definindo um par de funções complexas. Essas funções são analíticas nas metades superior e inferior do plano complexo, coincidentes em uma determinada região que contém o eixo real e a continuidade analítica garante ser uma função analítica simples em todo o plano complexo. Essa ideia pode ser utilizada na presente tese para resolver o conjunto de EDO's obtido pela aplicação das séries de Taylor juntamente com as condições de contorno e interface transformadas, ou seja, em cada recursão da Decomposição resolve-se o sistema linear resultante da aplicação da técnica de Wiener-Hopf até a j -ésima recursão. O desenvolvimento dos cálculos e aplicação da metodologia são apresentados na Subseção 4.3.2.

A construção da solução para cada célula espacial pode ser feita levando em consideração a equação diferencial ordinária resultante da aplicação das séries de Taylor na variável espacial para $n = 0$, em que há a conexão dos coeficientes constante e quadrático, juntamente com as condições de contorno e interfaces expandidas da mesma maneira. Assim, o coeficiente constante é determinado pela resolução da EDO e os lineares e qua-

dráticos através das equações da continuidade de fluxo e corrente de nêutrons expandidas que formam o sistema linear. Deste modo, todos os coeficientes da série de Taylor dependentes do tempo conectam-se resolvendo o sistema linear resultante de tamanho $6L \times 6L$, onde L é o número total de células espaciais. O sistema é resolvido em cada recursão do método da Decomposição até chegar na precisão desejada. Essa abordagem é apresentada detalhadamente na Subseção 4.3.3.

4.3.1 Multiplicadores de Lagrange

Uma alternativa para incluir as condições de interface de forma que, por consequência, ocorra a conexão de todos os coeficientes da expansão em série é a utilização dos Multiplicadores Lagrangeanos (ML). Os ML, otimizando o problema, podem fazer o vínculo das interfaces, escolhendo a melhor combinação entre os parâmetros, respeitando a condição de continuidade de fluxo e corrente de nêutrons. A solução nos contornos não é realmente verdadeira, pois a ideia consiste em estender a solução de uma região sobre a outra, mesmo que essa não seja relevante, para encontrar a concordância da curva tangente com as condições de interface. Em outras palavras, não se pode aplicar os ML somente no ponto de troca de interface, as restrições do problema são funções que se manifestam em torno das interfaces.

Na maioria de problemas contínuos, ou em métodos de solução direta, podem existir dificuldades na imposição direta de restrições [Zienkiewicz e Taylor, 2005]. Os ML podem auxiliar nesses casos, pois sua ideia básica é introduzir um conceito matemático necessário para uma certa equação, forçando com que esta restrição externa do problema seja satisfeita. Em outras palavras, converte-se um problema restrito em um otimizado não restrito. Tradicionalmente, esse método é uma estratégia para encontrar máximos ou mínimos locais de uma função sujeita a restrições exatas. Os ML são amplamente empregados na termodinâmica para determinar um potencial químico, bem como em transformações de substâncias fixando proporções [Kremer e Liu, 1980; Altino et al., 2016]. Encontram-se muitas metodologias na literatura que o utilizam juntamente com o método dos Elementos Finitos [Facco, 2012; Gomes, 2013; Zienkiewicz e Taylor, 2005].

Os ML incluem incógnitas adicionais ao problema original, e em alguns casos, por análise adimensional, pode-se atribuir-lhes interpretação física. Dependendo do número de variáveis adicionadas, pode-se gerar grandes sistemas de equações e sua implementação

numérica pode ser mal condicionada [Zienkiewicz e Taylor, 2005]. No caso da restrição ser a conexão entre as interfaces, como no caso da presente tese, a resolução se torna mais complicada com o aumento do número de regiões. Isso se justifica pelo fato de estar acrescentando mais variáveis desconhecidas em cada nova interface.

Neste contexto, consideram-se soluções locais para o fluxo que são representadas por expansões em séries de Taylor truncadas $\Phi_n^{[sr]}$ (sendo n o truncamento e sr o subdomínio ou sub-região) para formular o seguinte problema de otimização:

$$f_{n, sr} = \|\Phi_n^{[sr\pm]} - \Phi_n^{[sr]}\|_{\min; sr; n; \mathbf{r} \in \Gamma}, \quad (4.5)$$

onde $sr\pm$ simbolicamente significa qualquer um dos possíveis subdomínios adjacentes, Γ representa uma condição de interface e $\|\cdot\|_{\min; sr; n; \mathbf{r} \in \Gamma}$ é uma (semi-)norma¹ mínima no contorno. A conservação da densidade de corrente é então tratada como uma restrição, em vez de uma condição de contorno, a qual como mencionado anteriormente, tornaria a solução inviável. Assim, a restrição pode ser escrita como:

$$g_{n, sr} = \|\nabla \Phi_n^{[sr\pm]} - \nabla \Phi_n^{[sr]}\|_{\min; sr; n; \mathbf{r} \in \Gamma} = c_{sr, n}. \quad (4.6)$$

Para o modelo de difusão, esta é a razão inversa das constantes de difusão, proporcionais a Σ_{tr} . Vale destacar que tanto f como g devem ter primeira derivada parcial contínua. Para combinar o problema de otimização f sujeito à restrição g , utiliza-se a técnica dos ML, onde a função Lagrangeana é definida como:

$$\mathcal{L}(\mathbf{r}, t, \gamma) = f(\mathbf{r}, t) - \gamma(g(\mathbf{r}) - c), \quad (4.7)$$

onde \mathcal{L} é a função Lagrangeana, $f(\mathbf{r}, t)$ é a equação a qual se deseja adicionar as restrições, γ é o ML, $g(\mathbf{r})$ é uma restrição. Se $f(\mathbf{r}_0, t)$ é um mínimo de f para um problema restrito, então existe um γ o qual a função Lagrangeana $\mathcal{L}(\mathbf{r}, \gamma)$ tem um ponto estacionário:

$$\nabla f = \gamma \nabla g. \quad (4.8)$$

Nota-se que os pontos estacionários tem derivadas parciais nulas de \mathcal{L} . No entanto, em geral nem todos os pontos estacionários produzem uma solução do problema original, a qual pode impor uma limitação ao método proposto.

¹Uma semi-norma satisfaz todas as propriedades de norma, com exceção do primeiro axioma ($\|\mathbf{x}\| \geq 0$, $\forall \mathbf{x} \in X$; $\|\mathbf{x}\| = 0 \Leftrightarrow \mathbf{x} = \mathbf{0}$).

Para dois domínios adjacentes, o problema pode ser formulado como um único problema restrito com o objetivo de minimizar f sujeito à restrição g . Para uma expansão além da ordem zero existem mais incógnitas do que equações. Assim, é preciso recorrer a restrições que (devido à não existência de uma solução como acima mencionado) terão caráter dinâmico para permitir uma aproximação e que seja próxima o suficiente da solução verdadeira. Para isso, existem pontos, linhas, superfícies ou hipersuperfícies (dependendo da dimensão das coordenadas do espaço em consideração) onde $\frac{\nabla f}{|\nabla f|} = \pm \frac{\nabla g}{|\nabla g|}$, então existe $\gamma = \pm \frac{\nabla f}{\nabla g}$ com $sign(\gamma) = sign(\nabla f \cdot \nabla g)$.

A partir da construção do problema de otimização, aplica-se a regra de L'Hospital e então se conclui que nos domínios onde o peso do termo da curvatura se mantiver, o ML deve permanecer o mesmo, pois:

$$\gamma = \left| \frac{\nabla f}{\nabla g} \right| \frac{\nabla f \cdot \nabla g}{|\nabla f| |\nabla g|} = \nabla f \cdot \frac{\nabla g}{|\nabla g|^2}, \quad (4.9)$$

e portanto, para subdomínios homogêneos adjacentes é simplesmente a curvatura a qual na teoria de difusão clássica é D^{-1} (onde D é o parâmetro de difusão). Observando a Figura 4.2, como existem três regiões há duas trocas de interface (na posição 40 e 200). Em cada interface são necessários dois ML para o fluxo rápido e dois para o fluxo térmico, pois precisa-se impor duas condições: continuidade de corrente e de fluxo de nêutrons. Logo, para o domínio inteiro adicionam-se oito novas variáveis. As expressões abaixo mostram a definição de cada ML e a condição de interface (restrição) que se refere:

$$\begin{aligned} \gamma_{1,a,1}(t) &\rightarrow \Phi_1^{[1]}(x, t) = \Phi_1^{[2]}(x, t), \\ \gamma_{1,a,2}(t) &\rightarrow -D_1^{[1]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_1^{[1]}(x, t) = -D_1^{[2]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_1^{[2]}(x, t), \\ \gamma_{2,a,1}(t) &\rightarrow \Phi_2^{[1]}(x, t) = \Phi_2^{[2]}(x, t), \\ \gamma_{2,a,2}(t) &\rightarrow -D_2^{[1]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_2^{[1]}(x, t) = -D_2^{[2]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_2^{[2]}(x, t), \\ \gamma_{1,b,1}(t) &\rightarrow \Phi_1^{[2]}(x, t) = \Phi_1^{[3]}(x, t), \\ \gamma_{1,b,2}(t) &\rightarrow -D_1^{[2]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_1^{[2]}(x, t) = -D_1^{[3]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_1^{[3]}(x, t), \\ \gamma_{2,b,1}(t) &\rightarrow \Phi_2^{[2]}(x, t) = \Phi_2^{[3]}(x, t), \\ \gamma_{2,b,2}(t) &\rightarrow -D_2^{[2]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_2^{[2]}(x, t) = -D_2^{[3]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_2^{[3]}(x, t), \end{aligned} \quad (4.10)$$

onde os sobrescritos nos fluxos indicam a região e onde γ são os ML, em ordem os subíndices referem-se respectivamente: equação para o fluxo rápido (1) e térmico (2), interface (a para posição 40 ou b para posição 200) e tipo de condição de interface, de continuidade de

fluxo (1) e corrente (2). Ressalta-se novamente que as restrições do problema são funções que se pronunciam em torno das trocas de interface, por isso não se escreve as restrições aplicadas especificamente nos pontos a e b .

Considera-se agora a Equação Cinética de Difusão de Nêutrons unidimensional em geometria cartesiana, com dois grupos de energia e seis de precursores de nêutrons atrasados em um domínio heterogêneo, incluindo os ML, definida como:

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}_1^{[r]} &= \frac{1}{v_1} \frac{\partial \Phi_1^{[r]}(x,t)}{\partial t} - D_1^{[r]} \nabla^2 \Phi_1^{[r]}(x,t) + \Sigma_{f1}^{[r]} \Phi_1^{[r]}(x,t) - (1 - \beta)(\nu_1^{[r]} \Sigma_{f1}^{[r]} \Phi_1^{[r]}(x,t) \\
&\quad + \nu_2^{[r]} \Sigma_{f2}^{[r]} \Phi_2^{[r]}(x,t)) - \sum_{i=1}^6 \lambda_i C_i^{[r]}(x,t) - \Psi_1^{[r]}, \\
\mathcal{L}_2^{[r]} &= \frac{1}{v_2} \frac{\partial \Phi_2^{[r]}(x,t)}{\partial t} - D_2^{[r]} \nabla^2 \Phi_2^{[r]}(x,t) + \Sigma_{a2}^{[r]}(t) \Phi_2^{[r]}(x,t) - \Sigma_{s12}^{[r]} \Phi_1^{[r]}(x,t) - \Psi_2^{[r]}, \\
\mathcal{L}_{i+2}^{[r]} &= \frac{\partial C_i^{[r]}(x,t)}{\partial t} - \beta_i (\nu_1^{[r]} \Sigma_{f1}^{[r]} \Phi_1^{[r]}(x,t) + \nu_2^{[r]} \Sigma_{f2}^{[r]} \Phi_2^{[r]}(x,t)) + \lambda_i C_i^{[r]}(x,t),
\end{aligned} \tag{4.11}$$

com $r = 1, 2, \dots, R$, onde o índice $[r]$ representa a respectiva região, sendo R o número total de regiões (no caso apresentado, $R = 3$) e Ψ são os ML para cada equação e região da placa. Os Ψ são definidos como:

$$\begin{aligned}
\Psi_1^{[1]} &= \gamma_{1,a,1}(t)(\Phi_1^{[1]}(x,t) - \Phi_1^{[2]}(x,t)) + \gamma_{1,a,2}(t)(-D_1^{[1]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_1^{[1]}(x,t) \\
&\quad + D_1^{[2]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_1^{[2]}(x,t)), \\
\Psi_2^{[1]} &= \gamma_{2,a,1}(t)(\Phi_2^{[1]}(x,t) - \Phi_2^{[2]}(x,t)) + \gamma_{2,a,2}(t)(-D_2^{[1]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_2^{[1]}(x,t) \\
&\quad + D_2^{[2]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_2^{[2]}(x,t)), \\
\Psi_1^{[2]} &= \gamma_{1,a,1}(t)(\Phi_1^{[1]}(x,t) - \Phi_1^{[2]}(x,t)) + \gamma_{1,a,2}(t)(-D_1^{[1]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_1^{[1]}(x,t) \\
&\quad + D_1^{[2]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_1^{[2]}(x,t)) + \\
&\quad \gamma_{1,b,1}(t)(\Phi_1^{[2]}(x,t) - \Phi_1^{[3]}(x,t)) + \gamma_{1,b,2}(t)(-D_1^{[2]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_1^{[2]}(x,t) \\
&\quad + D_1^{[3]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_1^{[3]}(x,t)), \\
\Psi_2^{[2]} &= \gamma_{2,a,1}(t)(\Phi_2^{[1]}(x,t) - \Phi_2^{[2]}(x,t)) + \gamma_{2,a,2}(t)(-D_2^{[1]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_2^{[1]}(x,t) \\
&\quad + D_2^{[2]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_2^{[2]}(x,t)) + \\
&\quad \gamma_{2,b,1}(t)(\Phi_2^{[2]}(x,t) - \Phi_2^{[3]}(x,t)) + \gamma_{2,b,2}(t)(-D_2^{[2]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_2^{[2]}(x,t) \\
&\quad + D_2^{[3]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_2^{[3]}(x,t)), \\
\Psi_1^{[3]} &= \gamma_{1,b,1}(t)(\Phi_1^{[2]}(x,t) - \Phi_1^{[3]}(x,t)) + \gamma_{1,b,2}(t)(-D_1^{[2]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_1^{[2]}(x,t) \\
&\quad + D_1^{[3]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_1^{[3]}(x,t)), \\
\Psi_2^{[3]} &= \gamma_{2,b,1}(t)(\Phi_2^{[2]}(x,t) - \Phi_2^{[3]}(x,t)) + \gamma_{2,b,2}(t)(-D_2^{[2]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_2^{[2]}(x,t) \\
&\quad + D_2^{[3]} \frac{\partial}{\partial x} \Phi_2^{[3]}(x,t)).
\end{aligned} \tag{4.12}$$

O próximo passo consiste em tomar a derivada de cada função Lagrangeana \mathcal{L} em relação a x , t e cada γ separadamente, igualá-las a zero, e então resolver o sistema de

equações. Assim, obtêm-se as equações $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial x}$, $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial t}$, $\frac{\partial \mathcal{L}}{\partial \gamma}$ igualadas a zero. Agora, aplica-se a expansão em série de Taylor, análogo ao problema homogêneo, trunca-se a série e obtêm-se equações diferenciais ordinárias dependentes do tempo. Como esperado, a inserção dos ML aumenta substancialmente o número de variáveis e de equações a serem resolvidas. As equações diferenciais ordinárias de primeira ordem obtidas têm a forma genérica:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{Y}_n^{[sr]}(t) + \mathbf{M}_{1,n}^{[r]}(t) \mathbf{Y}_n^{[sr]}(t) + \mathbf{M}_{2,n}^{[r]} \mathbf{Y}_n^{[sr]}(t) \cdot \mathbf{Y}_n^{[sr]}(t) = 0, \quad (4.13)$$

e as de segunda ordem são definidas genericamente como:

$$\frac{d^2}{dt^2} \mathbf{Y}_n^{[sr]}(t) + \frac{d}{dt} (\mathbf{N}_{1,n}^{[r]}(t) \mathbf{Y}_n^{[sr]}(t)) + \frac{d}{dt} (\mathbf{N}_{2,n}^{[r]} \mathbf{Y}_n^{[sr]}(t) \cdot \mathbf{Y}_n^{[sr]}(t)) = 0, \quad (4.14)$$

com $sr = 1 : SR$, $r = 1 : 3$ e $n = 0 : 2$, onde $\mathbf{M}_{1,n}^{[r]}(t)$, $\mathbf{M}_{2,n}^{[r]}$, $\mathbf{N}_{1,n}^{[r]}(t)$ e $\mathbf{N}_{2,n}^{[r]}$ são matrizes genéricas dos coeficientes das equações diferenciais resultantes, que dependem do índice n da expansão em série de Taylor e da região r a qual pertence. As Equações 4.13 e 4.14 obtidas são não lineares e estão genericamente representadas para cada região, sub-região e índice da série de Taylor. Englobando todas as equações com suas variáveis ao mesmo tempo obtêm-se um único sistema. Cabe destacar que a não linearidade surge da multiplicação dos ML pelos coeficientes da série de Taylor, pois as condições de interface são descritas por variáveis dependentes. Nessas mesmas equações não existem termos em que os ML aparecem sozinhos (lineares), o que pode dificultar a obtenção de uma solução.

Uma maneira de otimizar a metodologia é estender as funções referentes a cada região, que possuem determinados parâmetros nucleares, sobre as regiões vizinhas. Em seguida, as condições de interface (de continuidade de fluxo e densidade de corrente de nêutrons) são inseridas através dos ML como restrições apenas na “vizinhança” da interface. Em outras palavras, através da utilização de uma função suave, como uma tangente hiperbólica, pode-se inserir essas condições como uma função “envoltória” na interface, ou com “efeito dissipativo”, a qual espera-se suavizar as oscilações em torno das interfaces e realizar a conexão entre a solução de cada região. Assim, a solução final pode ser interpretada como um somatório da solução de cada região ($f_{aprox} = \sum_{r=1}^R f_{aprox}^{[r]}$), realizando o vínculo das interfaces em torno das mesmas com a utilização da função tangente hiperbólica. Cabe ressaltar que a escolha da tangente hiperbólica se deve ao fato de que, pelo seu comportamento gráfico, suaviza a mudança dos parâmetros nucleares a partir de um certo ponto em torno das interfaces, pois se fosse utilizada uma função Heaviside, por

exemplo, poderiam aparecer degraus na solução final.

Infelizmente essa abordagem não funciona para o caso desta tese, nem mesmo aplicando os ML em todo comprimento da placa ou com uma função “envoltória” nas interfaces, pois sendo um problema com convergência sensível, acrescentar oito novas variáveis (ML) e tornar o sistema não linear, além de gerar EDO’s complexas com a diferenciação de cada função Lagrangeana em relação a cada variável dependente, transforma o problema para um ainda mais complexo e difícil de ser resolvido. Cabe destacar, que essa abordagem pode ser facilmente empregada para outras metodologias, no entanto, no caso da presente tese, lida-se com uma dificuldade de convergência computacional pela aritmética do problema.

4.3.2 Método de Wiener-Hopf

A técnica de Wiener-Hopf (WH) primeiramente foi empregada para a solução de equações integrais especiais e, mais tarde, em problemas da teoria de difração que foram formulados como equações integrais. O Método de Wiener-Hopf permite resolver explicitamente equações diferenciais parciais lineares, sujeitas a condições de contorno em domínios semi-infinitos. Problemas com condições de contorno mistas (diferentes condições em diferentes regiões do contorno, como condições de Robin ou uma mistura de condições de Neumann e Dirichlet) são difíceis de solucionar até mesmo sem transientes e soluções com abordagem analítica ou semianalítica se tornam possíveis pela aplicação do Método de WH [Noble, 1988; Crighton et al., 1988]. Além disso, pode-se resolver equações singulares em domínios multidimensionais e problemas de contorno de Hilbert, na qual o contorno consiste de arcos e linhas, onde as funções associadas à condição de contorno são descontínuas.

A metodologia explora as propriedades analíticas de funções complexas, utilizando geralmente a Transformada de Fourier, mas outras transformadas também podem ser empregadas. As equações e condições de contorno são transformadas e o sistema resultante é utilizado para definir um par de funções complexas, que são analíticas nas metades superior (+) e inferior (-) do plano complexo. Esse par de funções coincide em uma determinada região do plano complexo, em uma estreita faixa que contém o eixo real, como pode ser visto na Figura 4.6. A continuidade analítica garante que essas duas funções definem uma função analítica simples em todo o plano complexo.

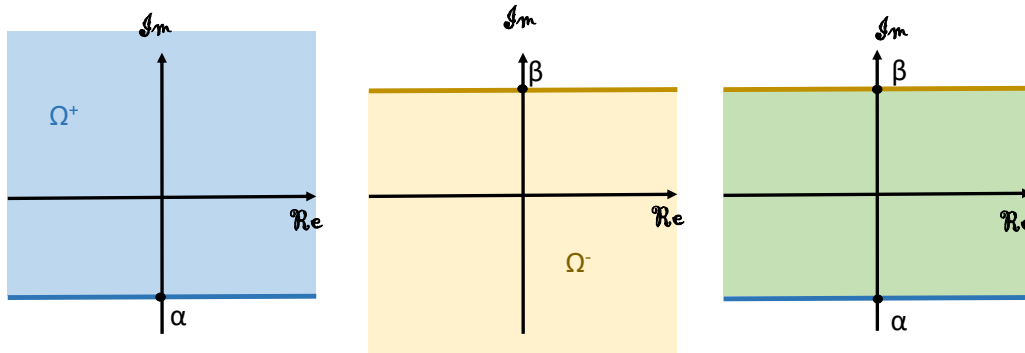


Figura 4.6 – Ilustração dos domínios nas metades superior (+) e inferior (-) do plano complexo e a região de analiticidade entre eles.

De uma forma geral, pode-se resumir a aplicação do Método de WH da seguinte maneira [Wright, 2004]:

- 1) Determinar as condições de contorno e interface do problema em questão;
- 2) Aplicar a Transformada de Fourier para obter equações algébricas ao invés de diferenciais;
- 3) Aplicar as condições de contorno e interface transformadas nas metades superior (+) e inferior (-) do plano complexo, cujos domínios de analiticidade se sobreponham;
- 4) Manipular essas relações na forma da equação geral de Wiener-Hopf (a ser apresentada adiante);
- 5) Fatorar e decompor funções para obter uma igualdade entre as funções (+) e (-);
- 6) Usar o teorema de Abel para deduzir o comportamento no infinito do comportamento físico esperado na borda, onde a condição de contorno muda;
- 7) Usar o teorema de Liouville para deduzir a forma da função inteira do seu comportamento no infinito;
- 8) Resolver as variáveis transformadas;
- 9) Inverter a transformada para obter a solução desejada.

A equação geral de Wiener-Hopf pode ser representada da seguinte maneira [Wright, 2004]:

$$K(s)U^+(s) + V^-(s) = P(s), \quad \alpha < \eta < \beta \quad (4.15)$$

onde K (Kernel do problema) e P são conhecidos e U^+ e V^- desconhecidos. Os sobres-

critos mais e menos indicam as transformadas de Fourier generalizadas das funções sobre os valores positivos e negativos da sua variável independente (x por exemplo). Onde o domínio de analiticidade de U^+ é para $\eta > \alpha$ e de V^- para $\eta < \beta$, e no plano complexo esses domínios de analiticidade sobrepõem-se. O procedimento é rearranjar esta equação tal que um lado da igualdade seja todo (+) e o outro (-). Isto pode ser feito fatorando K como K^+K^- e dividindo a equação por K^- :

$$K^+U^+ + \frac{V^-}{K^-} = \frac{P}{K^-} \equiv R \quad (4.16)$$

com K^- não nulo. Agora, decompõe-se R como uma soma, $R = R^+ + R^-$ e rearranja-se:

$$K^+U^+ - R^+ = R^- - \frac{V^-}{K^-}, \quad (4.17)$$

onde o lado esquerdo é analítico para $\eta > \alpha$ e o direito, para $\eta < \beta$. Observando os dois lados da Equação 4.17, percebe-se que cada lado forma uma continuação analítica do outro, pois as duas funções são analíticas sobre os domínios que se sobrepõem e são iguais nessa região, então deve existir uma única função que é analítica sobre ambos os domínios ($E(s)$). Portanto:

$$K^+U^+ - R^+ = R^- - \frac{V^-}{K^-} \equiv E(s). \quad (4.18)$$

A solução para o problema das Equações Cinéticas de Difusão de nêutrons unidimensionais heterogêneas segue o mesmo procedimento que o problema homogêneo para as variáveis espaciais e temporal. Portanto, continua-se a resolver aplicando séries de Taylor na variável espacial nas equações diferenciais parciais, obtendo equações diferenciais ordinárias acopladas. Com a aplicação das séries de Taylor, reescrevem-se as condições de contorno e interface. A parte temporal é resolvida pelo Método da Decomposição da mesma maneira, com a divisão da matriz dos coeficientes com o intuito de contornar a rigidez e tornando o problema duplamente recursivo. Com a técnica de WH, nas equações diferenciais ordinárias obtidas pelas séries de Taylor e nas condições de contorno e interface serão aplicadas as funções Transformadas de Fourier nas metades superior (+) e inferior (-) do plano complexo, cujos domínios de analiticidade se sobreponham. Desta maneira, obtém-se um sistema linear para as funções (+) e (-) em cada recursão do Método da Decomposição, que por sua vez, atualiza os coeficientes até que seja necessário (J termos). Então, aplica-se a Transformada Inversa de Fourier para finalmente escrever

os fluxos e concentrações de precursores de nêutrons atrasados (polinômios quadráticos) com os coeficientes encontrados.

A aplicação da metodologia de WH, inicia-se a partir da EDO para $n = 0$:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{X}_{0,j}^{[l]}(t) - \mathbf{W}_0^{[l]} \mathbf{X}_{0,j}^{[l]}(t) = \mathbf{S}_j^{[l]} + \mathbf{W}_1^{[l]}(t) \mathbf{X}_{0,j-1}^{[l]}, \quad (4.19)$$

onde $\mathbf{X}_{0,j}^{[l]}(t) = \left[A_{0,j}^{[l]}(t) \ B_{0,j}^{[l]}(t) \ C_{i,0,j}^{[l]}(t) \right]^T$, $j = 1 : J$, $i = 1 : 6$, o índice l representando o número da célula no espaço. Aqui é importante ressaltar que primeiramente realizou-se testes sem um transiente severo, considerando $\Sigma_{a2,1}(t) = 0$ e tornando todos elementos da matriz $\mathbf{W}_1^{[l]}(t)$ constantes (portanto $\mathbf{W}_1^{[l]}$), que é um caso mais simples para ser resolvido. Suas condições de contorno e interface para as células 1, intermediárias e L são, respectivamente:

$$\begin{aligned} A_{2,j}^{[1]}(t)(\Delta x)^2 - A_{1,j}^{[1]}(t)(\Delta x) + A_{0,j}^{[1]}(t) &= 0, \\ -D_1^{[1]}(2A_{2,j}^{[1]}(t)(\Delta x) + A_{1,j}^{[1]}(t)) &= -D_1^{[2]}(2A_{2,j}^{[2]}(t)(\Delta x) - A_{1,j}^{[2]}(t)), \\ B_{2,j}^{[1]}(t)(\Delta x)^2 - B_{1,j}^{[1]}(t)(\Delta x) + B_{0,j}^{[1]}(t) &= 0, \\ -D_1^{[1]}(2B_{2,j}^{[1]}(t)(\Delta x) + B_{1,j}^{[1]}(t)) &= -D_1^{[2]}(2B_{2,j}^{[2]}(t)(\Delta x) - B_{1,j}^{[2]}(t)), \end{aligned} \quad (4.20)$$

$$\begin{aligned} A_{2,j}^{[l-1]}(t)(\Delta x)^2 + A_{1,j}^{[l-1]}(t)(\Delta x) + A_{0,j}^{[l-1]}(t) &= A_{2,j}^{[l]}(t)(\Delta x)^2 - A_{1,j}^{[l]}(t)(\Delta x) + A_{0,j}^{[l]}(t), \\ -D_1^{[l]}(2A_{2,j}^{[l]}(t)(\Delta x) + A_{1,j}^{[l]}(t)) &= -D_1^{[l+1]}(2A_{2,j}^{[l+1]}(t)(\Delta x) - A_{1,j}^{[l+1]}(t)), \\ B_{2,j}^{[l-1]}(t)(\Delta x)^2 + B_{1,j}^{[l-1]}(t)(\Delta x) + B_{0,j}^{[l-1]}(t) &= B_{2,j}^{[l]}(t)(\Delta x)^2 - B_{1,j}^{[l]}(t)(\Delta x) + B_{0,j}^{[l]}(t), \\ -D_1^{[l]}(2B_{2,j}^{[l]}(t)(\Delta x) + B_{1,j}^{[l]}(t)) &= -D_1^{[l+1]}(2B_{2,j}^{[l+1]}(t)(\Delta x) - B_{1,j}^{[l+1]}(t)), \end{aligned} \quad (4.21)$$

$$\begin{aligned} A_{2,j}^{[L-1]}(t)(\Delta x)^2 + A_{1,j}^{[L-1]}(t)(\Delta x) + A_{0,j}^{[L-1]}(t) &= A_{2,j}^{[L]}(t)(\Delta x)^2 - A_{1,j}^{[L]}(t)(\Delta x) + A_{0,j}^{[L]}(t), \\ A_{2,j}^{[L]}(t)(\Delta x)^2 + A_{1,j}^{[L]}(t)(\Delta x) + A_{0,j}^{[L]}(t) &= 0, \\ B_{2,j}^{[L-1]}(t)(\Delta x)^2 + B_{1,j}^{[L-1]}(t)(\Delta x) + B_{0,j}^{[L-1]}(t) &= B_{2,j}^{[L]}(t)(\Delta x)^2 - B_{1,j}^{[L]}(t)(\Delta x) + B_{0,j}^{[L]}(t), \\ B_{2,j}^{[L]}(t)(\Delta x)^2 + B_{1,j}^{[L]}(t)(\Delta x) + B_{0,j}^{[L]}(t) &= 0. \end{aligned} \quad (4.22)$$

Então, define-se a Transformada de Fourier complexa na variável temporal:

$$\mathbf{F}(s) \equiv \mathbf{F}\{\mathbf{f}(t)\} = \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{f}(t) \exp(-ist) dt, \quad (4.23)$$

onde $s = s_1 + is_2$. Aplicando a transformada apresentada na Equação 4.23 na EDO 4.19,

obtém-se:

$$(Iis - \mathbf{W}_0^{[l]})\mathbf{F}_{0,j}^{[l]}(s) = \mathbf{F}_{2,j}^{[l]} + \mathbf{W}_1^{[l]}\mathbf{F}_{0,j-1}^{[l]}, \quad (4.24)$$

sendo que a derivada da transformada é $\mathbf{F}'(s) = is\mathbf{F}(s)$, $\mathbf{F}_{0,j}^{[l]}(s)$ representa a Transformada de Fourier dos coeficientes da série de Taylor para o fluxo rápido e térmico e as concentrações de precursores de nêutrons atrasados ($A_{0,j}^{[l]}(t)$, $B_{0,j}^{[l]}(t)$ e $C_{i,0,j}^{[l]}(t)$).

Rearranjando, tem-se a solução:

$$\mathbf{F}_{0,j}^{[l]}(s) = (Iis - \mathbf{W}_0^{[l]})^{-1}(\mathbf{F}_{2,j}^{[l]} + \mathbf{W}_1^{[l]}\mathbf{F}_{0,j-1}^{[l]}). \quad (4.25)$$

Agora, aplicando a Equação 4.23 nas condições de contorno e interface 4.20, 4.21 e 4.22, têm-se:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{2,j}^{[1]}(s)(\Delta x)^2 - \mathbf{F}_{1,j}^{[1]}(s)(\Delta x) + \mathbf{F}_{0,j}^{[1]}(s) &= 0, \\ -D_1^{[1]}[2\mathbf{F}_{2,j}^{[1]}(s)(\Delta x) + \mathbf{F}_{1,j}^{[1]}(s)] &= -D_1^{[2]}[2\mathbf{F}_{2,j}^{[2]}(s)(\Delta x) - \mathbf{F}_{1,j}^{[2]}(s)], \end{aligned} \quad (4.26)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{2,j}^{[l-1]}(s)(\Delta x)^2 + \mathbf{F}_{1,j}^{[l-1]}(s)(\Delta x) + \mathbf{F}_{0,j}^{[l-1]}(s) \\ = \mathbf{F}_{2,j}^{[l]}(s)(\Delta x)^2 - \mathbf{F}_{1,j}^{[l]}(s)(\Delta x) + \mathbf{F}_{0,j}^{[l]}(s), \\ -D_1^{[l]}[2\mathbf{F}_{2,j}^{[l]}(s)(\Delta x) + \mathbf{F}_{1,j}^{[l]}(s)] &= -D_1^{[l+1]}[2\mathbf{F}_{2,j}^{[l+1]}(s)(\Delta x) - \mathbf{F}_{1,j}^{[l+1]}(s)], \end{aligned} \quad (4.27)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{2,j}^{[L-1]}(s)(\Delta x)^2 + \mathbf{F}_{1,j}^{[L-1]}(s)(\Delta x) + \mathbf{F}_{0,j}^{[L-1]}(s) \\ = \mathbf{F}_{2,j}^{[L]}(s)(\Delta x)^2 - \mathbf{F}_{1,j}^{[L]}(s)(\Delta x) + \mathbf{F}_{0,j}^{[L]}(s), \\ \mathbf{F}_{2,j}^{[L]}(s)(\Delta x)^2 + \mathbf{F}_{1,j}^{[L]}(s)(\Delta x) + \mathbf{F}_{0,j}^{[L]}(s) &= 0. \end{aligned} \quad (4.28)$$

O ponto crucial da metodologia de WH é decompor a função em um par de funções complexas, que são analíticas nos semiplanos superior (+) e inferior (-) do plano complexo. Para isso, decompõe-se a TF da seguinte forma:

$$\mathbf{F}(s) = \int_{\Gamma_1} \mathbf{f}(t) \exp(-ist) dt + \int_{\Gamma_2} \mathbf{f}(t) \exp(-ist) dt, \quad (4.29)$$

$$\mathbf{F}(s) = \mathbf{F}^-(s) + \mathbf{F}^+(s), \quad (4.30)$$

onde os contornos Γ_1 e Γ_2 são paralelos ao eixo real e pelo Lema de Jordan, para $t > 0$ pode-se fechar o contorno Γ_1 na metade inferior do plano complexo e, para $t < 0$ pode-se fechar o contorno Γ_2 na metade superior do plano complexo. Cabe ressaltar que \mathbf{F}^+ é uma função analítica de t na região $s_2 > \alpha$ e \mathbf{F}^- , na região $s_2 < \beta$.

Assim sendo, aplicando a decomposição definida na Equação 4.30 em 4.25:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{0,j}^{-,[l]}(s) + \mathbf{F}_{0,j}^{+,[l]}(s) &= (Iis - \mathbf{W}_0^{[l]})^{-1}[(\mathbf{F}_{2,j}^{-,[l]} + \mathbf{F}_{2,j}^{+,[l]}) \\ &\quad + \mathbf{W}_1^{[l]}(\mathbf{F}_{0,j-1}^{-,[l]} - \mathbf{F}_{0,j-1}^{+,[l]})], \end{aligned} \quad (4.31)$$

e nas condições de contorno e interface definidas nas Equações 4.26, 4.27 e 4.28:

$$\begin{aligned} &[\mathbf{F}_{2,j}^{-,[1]}(s) + \mathbf{F}_{2,j}^{+,[1]}(s)](\Delta x)^2 - [\mathbf{F}_{1,j}^{-,[1]}(s) + \mathbf{F}_{1,j}^{+,[1]}(s)](\Delta x) \\ &\quad + [\mathbf{F}_{0,j}^{-,[1]}(s) + \mathbf{F}_{0,j}^{+,[1]}(s)] = 0, \\ -D_1^{[1]}[2(\mathbf{F}_{2,j}^{-,[1]}(s) + \mathbf{F}_{2,j}^{+,[1]}(s))(\Delta x) + (\mathbf{F}_{1,j}^{-,[1]}(s) + \mathbf{F}_{1,j}^{+,[1]}(s))] &= \\ -D_1^{[2]}[2(\mathbf{F}_{2,j}^{-,[2]}(s) + \mathbf{F}_{2,j}^{+,[2]}(s))(\Delta x) - (\mathbf{F}_{1,j}^{-,[2]}(s) + \mathbf{F}_{1,j}^{+,[2]}(s))] &= \end{aligned} \quad (4.32)$$

$$\begin{aligned} &[\mathbf{F}_{2,j}^{-,[l-1]}(s) + \mathbf{F}_{2,j}^{+,[l-1]}(s)](\Delta x)^2 + [\mathbf{F}_{1,j}^{-,[l-1]}(s) + \mathbf{F}_{1,j}^{+,[l-1]}(s)](\Delta x) \\ &\quad + [\mathbf{F}_{0,j}^{-,[l-1]}(s) + \mathbf{F}_{0,j}^{+,[l-1]}(s)] = [\mathbf{F}_{2,j}^{-,[l]}(s) + \mathbf{F}_{2,j}^{+,[l]}(s)](\Delta x)^2 \\ &\quad - [\mathbf{F}_{1,j}^{-,[l]}(s) + \mathbf{F}_{1,j}^{+,[l]}(s)](\Delta x) + [\mathbf{F}_{0,j}^{-,[l]}(s) + \mathbf{F}_{0,j}^{+,[l]}(s)], \\ -D_1^{[l]}[2(\mathbf{F}_{2,j}^{-,[l]}(s) + \mathbf{F}_{2,j}^{+,[l]}(s))(\Delta x) + (\mathbf{F}_{1,j}^{-,[l]}(s) + \mathbf{F}_{1,j}^{+,[l]}(s))] &= \\ -D_1^{[l+1]}[2(\mathbf{F}_{2,j}^{-,[l+1]}(s) + \mathbf{F}_{2,j}^{+,[l+1]}(s))(\Delta x) - (\mathbf{F}_{1,j}^{-,[l+1]}(s) + \mathbf{F}_{1,j}^{+,[l+1]}(s))] &= \end{aligned} \quad (4.33)$$

$$\begin{aligned} &[\mathbf{F}_{2,j}^{-,[L-1]}(s) + \mathbf{F}_{2,j}^{+,[L-1]}(s)](\Delta x)^2 + [\mathbf{F}_{1,j}^{-,[L-1]}(s) + \mathbf{F}_{1,j}^{+,[L-1]}(s)](\Delta x) \\ &\quad + [\mathbf{F}_{0,j}^{-,[L-1]}(s) + \mathbf{F}_{0,j}^{+,[L-1]}(s)] = [\mathbf{F}_{2,j}^{-,[L]}(s) + \mathbf{F}_{2,j}^{+,[L]}(s)](\Delta x)^2 \\ &\quad - [\mathbf{F}_{1,j}^{-,[L]}(s) + \mathbf{F}_{1,j}^{+,[L]}(s)](\Delta x) + [\mathbf{F}_{0,j}^{-,[L]}(s) + \mathbf{F}_{0,j}^{+,[L]}(s)], \\ [\mathbf{F}_{2,j}^{-,[L]}(s) + \mathbf{F}_{2,j}^{+,[L]}(s)](\Delta x)^2 + [\mathbf{F}_{1,j}^{-,[L]}(s) + \mathbf{F}_{1,j}^{+,[L]}(s)](\Delta x) &= \\ + [\mathbf{F}_{0,j}^{-,[L]}(s) + \mathbf{F}_{0,j}^{+,[L]}(s)] = 0. \end{aligned} \quad (4.34)$$

Por conseguinte, separam-se as funções (+) e (-) de forma a obter uma igualdade, resultando na Equação de WH como em 4.18 para o problema de cinética de difusão de nêutrons unidimensional:

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{0,j}^{-,[l]}(s) - (Iis - \mathbf{W}_0^{[l]})^{-1}(\mathbf{F}_{2,j}^{-,[l]} + \mathbf{W}_1^{[l]}\mathbf{F}_{0,j-1}^{-,[l]}) &= \\ -\mathbf{F}_{0,j}^{+,[l]}(s) + (Iis - \mathbf{W}_0^{[l]})^{-1}(\mathbf{F}_{2,j}^{+,[l]} + \mathbf{W}_1^{[l]}\mathbf{F}_{0,j-1}^{+,[l]}), \end{aligned} \quad (4.35)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{F}_{2,j}^{-,[1]}(s)(\Delta x)^2 - \mathbf{F}_{1,j}^{-,[1]}(s)(\Delta x) + \mathbf{F}_{0,j}^{-,[1]}(s) &= \\ -\mathbf{F}_{2,j}^{+,[1]}(s)(\Delta x)^2 + \mathbf{F}_{1,j}^{+,[1]}(s)(\Delta x) - \mathbf{F}_{0,j}^{+,[1]}(s), \end{aligned} \quad (4.36)$$

$$\begin{aligned}
& -D_1^{[1]}[2\mathbf{F}_{2j}^{-,[1]}(s)(\Delta x) + \mathbf{F}_{1j}^{-,[1]}(s)] + D_1^{[2]}[2\mathbf{F}_{2j}^{-,[2]}(s)(\Delta x) - \mathbf{F}_{1j}^{-,[2]}(s)] = \\
& D_1^{[1]}[2\mathbf{F}_{2j}^{+,[1]}(s)(\Delta x) + \mathbf{F}_{1j}^{+,[1]}(s)] - D_1^{[2]}[2\mathbf{F}_{2j}^{+,[2]}(s)(\Delta x) - \mathbf{F}_{1j}^{+,[2]}(s)],
\end{aligned} \tag{4.37}$$

$$\begin{aligned}
& \mathbf{F}_2^{-,[l-1]}(s)(\Delta x)^2 + \mathbf{F}_1^{-,[l-1]}(s)(\Delta x) + \mathbf{F}_0^{-,[l-1]}(s) - \mathbf{F}_2^{-,[l]}(s)(\Delta x)^2 \\
& \quad + \mathbf{F}_1^{-,[l]}(s)(\Delta x) - \mathbf{F}_0^{-,[l]}(s) = \\
& -\mathbf{F}_2^{+,[l-1]}(s)(\Delta x)^2 - \mathbf{F}_1^{+,[l-1]}(s)(\Delta x) - \mathbf{F}_0^{+,[l-1]}(s) + \mathbf{F}_2^{+,[l]}(s)(\Delta x)^2 \\
& \quad - \mathbf{F}_1^{+,[l]}(s)(\Delta x) + \mathbf{F}_0^{+,[l]}(s),
\end{aligned} \tag{4.38}$$

$$\begin{aligned}
& -D_1^{[l]}[2\mathbf{F}_2^{-,[l]}(s)(\Delta x) + \mathbf{F}_1^{-,[l]}(s)] + D_1^{[l+1]}[2\mathbf{F}_2^{-,[l+1]}(s)(\Delta x) - \mathbf{F}_1^{-,[l+1]}(s)] = \\
& D_1^{[l]}[2\mathbf{F}_2^{+,[l]}(s)(\Delta x) + \mathbf{F}_1^{+,[l]}(s)] - D_1^{[l+1]}[2\mathbf{F}_2^{+,[l+1]}(s)(\Delta x) - \mathbf{F}_1^{+,[l+1]}(s)],
\end{aligned} \tag{4.39}$$

$$\begin{aligned}
& \mathbf{F}_2^{-,[L-1]}(s)(\Delta x)^2 + \mathbf{F}_1^{-,[L-1]}(s)(\Delta x) + \mathbf{F}_0^{-,[L-1]}(s) - \mathbf{F}_2^{-,[L]}(s)(\Delta x)^2 \\
& \quad + \mathbf{F}_1^{-,[L]}(s)(\Delta x) - \mathbf{F}_0^{-,[L]}(s) = \\
& -\mathbf{F}_2^{+,[L-1]}(s)(\Delta x)^2 - \mathbf{F}_1^{+,[L-1]}(s)(\Delta x) - \mathbf{F}_0^{+,[L-1]}(s) + \mathbf{F}_2^{+,[L]}(s)(\Delta x)^2 \\
& \quad - \mathbf{F}_1^{+,[L]}(s)(\Delta x) + \mathbf{F}_0^{+,[L]}(s),
\end{aligned} \tag{4.40}$$

$$\begin{aligned}
& \mathbf{F}_2^{-,[L]}(s)(\Delta x)^2 + \mathbf{F}_1^{-,[L]}(s)(\Delta x) + \mathbf{F}_0^{-,[L]}(s) = \\
& -\mathbf{F}_2^{+,[L]}(s)(\Delta x)^2 - \mathbf{F}_1^{+,[L]}(s)(\Delta x) - \mathbf{F}_0^{+,[L]}(s).
\end{aligned} \tag{4.41}$$

Nas Equações 4.35-4.41, o lado esquerdo é analítico no semiplano inferior, enquanto que o lado direito, no semiplano superior e a continuação analítica garante a existência de uma função em todo o plano, que coincide com o lado direito ou esquerdo em seus respectivos semiplanos. Além disso, a função analítica em todo o plano complexo tende a zero quando $s \rightarrow \infty$ (limitada no infinito) em qualquer direção e então, o Teorema de Liouville é identicamente zero.

Para montar o sistema linear e encontrar os valores dos coeficientes, ainda é necessário aplicar a Transformada Inversa de Fourier nas equações acima, definida por:

$$\mathbf{f}(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \mathbf{F}(s) \exp(-ist) ds, \tag{4.42}$$

em que, para as Equações 4.35, particularmente têm-se:

$$\begin{aligned}\mathbf{F}_{0,j}^{-,[l]}(t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma_1} \frac{(\mathbf{F}_{2,j}^{-,[l]} + \mathbf{W}_1^{[l]} \mathbf{F}_{0,j-1}^{-,[l]}) \exp(ist)}{(Is - \mathbf{W}_0^{[l]})} ds, \\ \mathbf{F}_{0,j}^{+,[l]}(t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{\Gamma_2} \frac{(\mathbf{F}_{2,j}^{+,[l]} + \mathbf{W}_1^{[l]} \mathbf{F}_{0,j-1}^{+,[l]}) \exp(ist)}{(Is - \mathbf{W}_0^{[l]})} ds.\end{aligned}\quad (4.43)$$

A integral da Equação 4.43 possui um polo em $-\mathbf{W}_0 i$, conforme Figura 4.7. Lembrando que a matriz \mathbf{W}_0 possui somente elementos negativos, por isso $-\mathbf{W}_0 i$ fica na parte positiva do eixo imaginário.

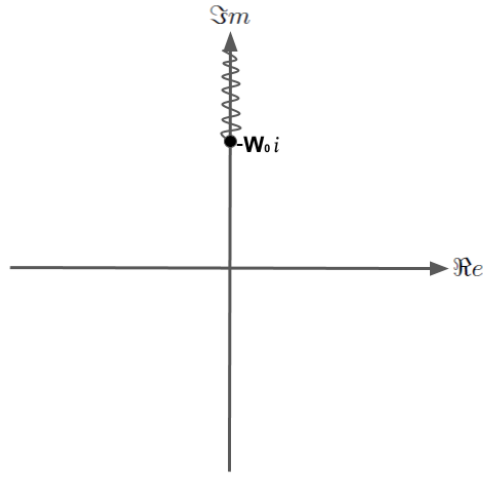


Figura 4.7 – Ponto de ramificação.

Como o que interessa é a parte real, pode-se escrever:

$$\begin{aligned}\mathbf{F}_{0,j}^{-,[l]}(t) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^0 \frac{(\mathbf{F}_{2,j}^{-,[l]} + \mathbf{W}_1^{[l]} \mathbf{F}_{0,j-1}^{-,[l]}) \exp(ist)}{(Is - \mathbf{W}_0^{[l]})} ds, \\ \mathbf{F}_{0,j}^{+,[l]}(t) &= \frac{1}{2\pi} \int_0^{\infty} \frac{(\mathbf{F}_{2,j}^{+,[l]} + \mathbf{W}_1^{[l]} \mathbf{F}_{0,j-1}^{+,[l]}) \exp(ist)}{(Is - \mathbf{W}_0^{[l]})} ds.\end{aligned}\quad (4.44)$$

Deste modo, para cada recursão do Método da Decomposição, constrói-se um sistema linear para as equações (+) e outro para as (-), relembando que:

$$\mathbf{F} = \mathbf{F}^- + \mathbf{F}^+ \quad (4.45)$$

e assim, esta solução determina os coeficientes da série de Taylor truncada dependentes do tempo.

No entanto, as soluções das integrais nas Equações apresentadas em 4.44 é a chamada exponencial integral ($E_i(ist)$), e esta função se comporta da seguinte maneira nos limites de integração: $E_i(-\infty) \rightarrow 0$, $E_i(0) \rightarrow -\infty$ e $E_i(\infty) \rightarrow \infty$, que pode ser visuali-

zado na Figura 4.8. Deste modo, não é possível determinar os fluxos e as concentrações de precursores de nêutrons atrasados porque a solução converge para infinito nas recursões da Decomposição.

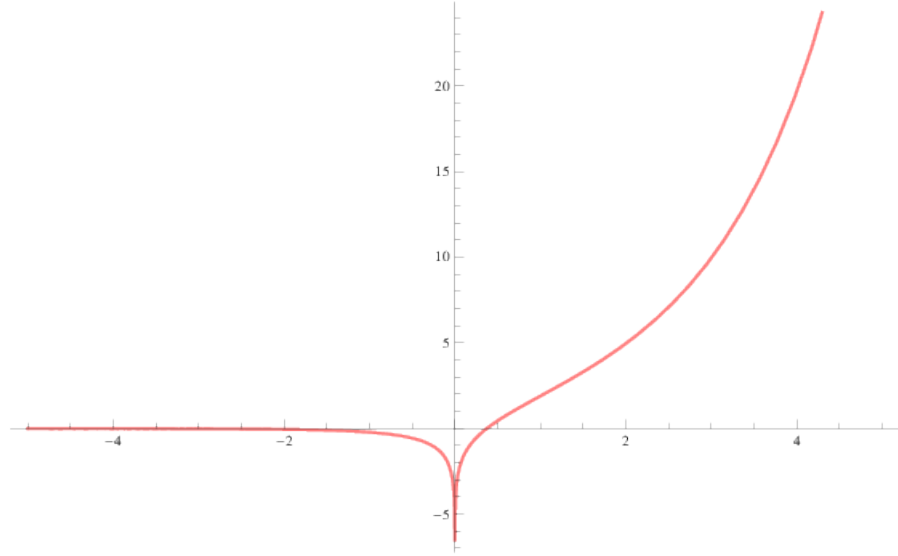


Figura 4.8 – Função Exponencial Integral $Ei(x)$.

4.3.3 Sistema linear com as condições de contorno e interface

Para assegurar a continuidade de fluxo e de corrente de nêutrons nas interfaces, uma das alternativas testadas foi construir um sistema linear de tamanho $6L \times 6L$, sendo L o número total de células no espaço de tamanho $2\Delta x$, constituído das seguintes equações: solução da EDO para o fluxo rápido e térmico com $n=0$ (referente à série de Taylor) e expansão em série de Taylor das condições de contorno e interfaces de cada fluxo, respectivamente de cada célula espacial.

Deste modo, compõem o sistema linear as soluções das seguintes EDO's para o fluxo rápido e térmico, respectivamente (construção das soluções descritas no Capítulo 3):

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} A_{0,j}^{[l]}(t) - A_{0,j}^{[l]}(t)(-\Sigma_{r1}^{[l]}v_1 + (1-\beta)\nu_1\Sigma_{f1}^{[l]}v_1) &= B_{0,j-1}^{[l]}(t)((1-\beta)\nu_2\Sigma_{f2}^{[l]}v_1) \\ &+ C_{i,0,j-1}^{[l]}(t)(v_1 \sum_{i=1}^6 \lambda_i) + A_{2,j}^{[l]}(t)(2D_1^{[l]}v_1), \\ \frac{d}{dt} B_{0,j}^{[l]}(t) - B_{0,j}^{[l]}(t)(-\Sigma_{a2}^{[l]}v_2) &= A_{0,j-1}^{[l]}(t)(\Sigma_{s12}^{[l]}v_2) + B_{2,j}^{[l]}(t)(2D_2^{[l]}v_2), \end{aligned} \quad (4.46)$$

Primeiramente, reescreve-se o sistema de EDO's (Equação 3.41) considerando as

células espaciais, pois os parâmetros nucleares tem diferentes valores em cada região:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{X}_0^{[l]}(t) - \mathbf{W}_0^{[l]}\mathbf{X}_0^{[l]}(t) = \mathbf{Q}^{[l]}(t). \quad (4.47)$$

e a solução:

$$\mathbf{X}_0^{[l]}(t) = \exp(\mathbf{W}_0^{[l]}t)\mathbf{X}_0^{[l]}(0) + \exp(\mathbf{W}_0^{[l]}t) * \mathbf{Q}^{[l]}(t), \quad (4.48)$$

As condições de contorno e interfaces, respectivamente de cada célula espacial, são dadas por:

- Na primeira célula, aplica-se a condição de contorno do tipo fluxo nulo e na interface a continuidade da densidade de corrente:

$$\begin{aligned} A_{2,j}^{[1]}(t)(\Delta x)^2 - A_{1,j}^{[1]}(t)(\Delta x) + A_{0,j}^{[1]}(t) &= 0, \\ -D_1^{[1]}(2A_{2,j}^{[1]}(t)(\Delta x) + A_{1,j}^{[1]}(t)) &= -D_1^{[2]}(2A_{2,j}^{[2]}(t)(\Delta x) - A_{1,j}^{[2]}(t)), \\ B_{2,j}^{[1]}(t)(\Delta x)^2 - B_{1,j}^{[1]}(t)(\Delta x) + B_{0,j}^{[1]}(t) &= 0, \\ -D_1^{[1]}(2B_{2,j}^{[1]}(t)(\Delta x) + B_{1,j}^{[1]}(t)) &= -D_1^{[2]}(2B_{2,j}^{[2]}(t)(\Delta x) - B_{1,j}^{[2]}(t)), \end{aligned} \quad (4.49)$$

onde os índices superiores indicam o número da célula, Δx é a distância entre x e x_0 .

- Nas células subsequentes até a célula $L-1$, onde L é o número total de células, aplica-se na interface esquerda continuidade de fluxo e na interface direita conservação da densidade de corrente:

$$\begin{aligned} A_{2,j}^{[l-1]}(t)(\Delta x)^2 + A_{1,j}^{[l-1]}(t)(\Delta x) + A_{0,j}^{[l-1]}(t) &= A_{2,j}^{[l]}(t)(\Delta x)^2 - A_{1,j}^{[l]}(t)(\Delta x) + A_{0,j}^{[l]}(t), \\ -D_1^{[l]}(2A_{2,j}^{[l]}(t)(\Delta x) + A_{1,j}^{[l]}(t)) &= -D_1^{[l+1]}(2A_{2,j}^{[l+1]}(t)(\Delta x) - A_{1,j}^{[l+1]}(t)), \\ B_{2,j}^{[l-1]}(t)(\Delta x)^2 + B_{1,j}^{[l-1]}(t)(\Delta x) + B_{0,j}^{[l-1]}(t) &= B_{2,j}^{[l]}(t)(\Delta x)^2 - B_{1,j}^{[l]}(t)(\Delta x) + B_{0,j}^{[l]}(t), \\ -D_1^{[l]}(2B_{2,j}^{[l]}(t)(\Delta x) + B_{1,j}^{[l]}(t)) &= -D_1^{[l+1]}(2B_{2,j}^{[l+1]}(t)(\Delta x) - B_{1,j}^{[l+1]}(t)). \end{aligned} \quad (4.50)$$

- Na última célula, aplica-se na interface continuidade de fluxo e no contorno a condição de fluxo nulo:

$$\begin{aligned} A_{2,j}^{[L-1]}(t)(\Delta x)^2 + A_{1,j}^{[L-1]}(t)(\Delta x) + A_{0,j}^{[L-1]}(t) &= A_{2,j}^{[L]}(t)(\Delta x)^2 - A_{1,j}^{[L]}(t)(\Delta x) + A_{0,j}^{[L]}(t), \\ A_{2,j}^{[L]}(t)(\Delta x)^2 + A_{1,j}^{[L]}(t)(\Delta x) + A_{0,j}^{[L]}(t) &= 0, \\ B_{2,j}^{[L-1]}(t)(\Delta x)^2 + B_{1,j}^{[L-1]}(t)(\Delta x) + B_{0,j}^{[L-1]}(t) &= B_{2,j}^{[L]}(t)(\Delta x)^2 - B_{1,j}^{[L]}(t)(\Delta x) + B_{0,j}^{[L]}(t), \\ B_{2,j}^{[L]}(t)(\Delta x)^2 + B_{1,j}^{[L]}(t)(\Delta x) + B_{0,j}^{[L]}(t) &= 0. \end{aligned} \quad (4.51)$$

Desta maneira, os coeficientes constantes são determinados pelo sistema de EDO's com $n = 0$ e o coeficiente linear e quadrático, através das condições de contorno e interface, que formam um sistema linear a ser resolvido em cada recursão da Decomposição. Ou seja, os coeficientes constantes são colocados no vetor coluna e os lineares e quadráticos são as incógnitas, sendo duas para cada célula espacial. Vale lembrar que um grau de liberdade no espaço é fixado com a condição inicial da solução estacionária da referência Ceolin, 2014.

A Figura 4.9 mostra o comportamento do fluxo rápido com a solução da Equação 4.48 para o instante $t = 4$ s e com $J = 100$ termos, já a Figura 4.10 mostra a contribuição de cada recursão do Método da Decomposição modificado para os coeficientes (constante, linear e quadrático) do fluxo rápido, na posição $x = 1$ cm. Pode-se notar que não ocorre convergência da solução, pois as contribuições das recursões aumentam com o crescer de J e observa-se que ocorre uma divergência ainda mais discrepante na proximidade das interfaces, devido à diferença dos parâmetros físicos dos materiais. Cabe dizer que somente são apresentados os resultados para o fluxo rápido, pois as outras variáveis têm comportamento análogo.

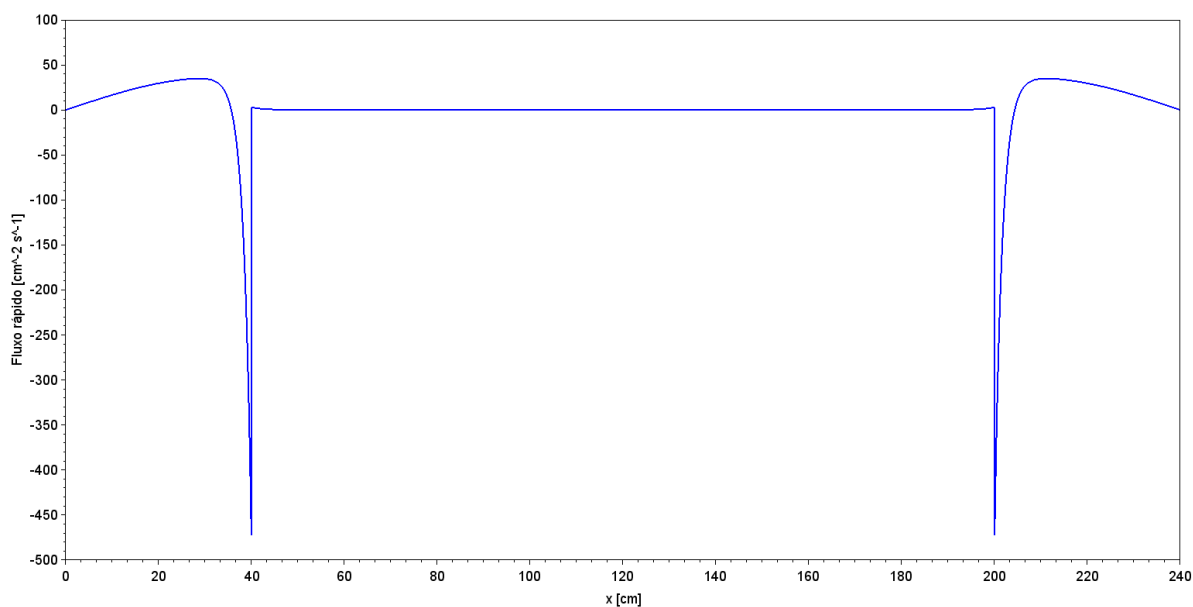
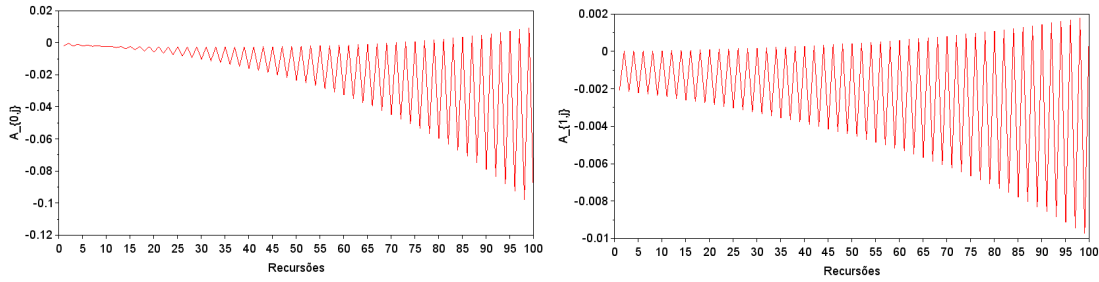
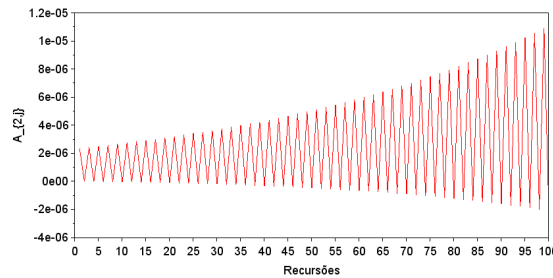


Figura 4.9 – Comportamento do fluxo rápido com a solução da Equação 4.48 para o instante $t = 4$ s e com $J = 100$ termos.



(a) Coeficiente constante.

(b) Coeficiente linear.



(c) Coeficiente quadrático.

Figura 4.10 – Contribuição de cada recursão do Método da Decomposição modificado para os coeficientes constante, linear e quadrático do fluxo rápido com a solução da Equação 4.48, para o instante $t = 4$ s e na posição $x = 1$ cm.

O **APÊNDICE A** mostra diferentes procedimentos aplicados, divididos em 9 seções, com a finalidade de se obter a convergência da solução com a última abordagem apresentada para aplicação das condições de contorno e interface. Outra observação é que primeiramente realizaram-se testes considerando $\Sigma_{a,1}(t) = 0$, que é um caso mais simples para ser resolvido.

A primeira tentativa consiste em uma pequena mudança nas matrizes dos coeficientes das EDO's resultantes, levando o termo que representa as contribuições por fissão do grupo rápido para a fonte do sistema de EDO's. Desta maneira, as contribuições por fissão do grupo rápido passam a ser corrigidas através da solução da recursão anterior da Decomposição. As novas matrizes e os resultados obtidos são apresentados na seção do **APÊNDICE A.1**.

A segunda ideia resume-se em transformar as unidades de medida do tempo de segundos para centésimos de segundos, com o intuito de diminuir as escalas de grandeza dos elementos que compõem as matrizes, pois elas contém exponenciais e elementos de valor grande na fonte para corrigir as recursões. Espera-se com esse artifício, melhorar a

convergência aritmética computacional do problema. As transformações e resultados são apresentados na seção do **APÊNDICE A.2**.

A terceira solução apresentada tem por objetivo não zerar as duas primeiras linhas da exponencial da matriz, referentes aos fluxos de nêutrons, através de um relaxamento da matriz \mathbf{W}_0 , dividindo as duas primeiras linhas por um fator e compensando na fonte o balanço. Os resultados obtidos e a apresentação da metodologia são exibidos na seção do **APÊNDICE A.3**.

Na quarta seção, tem-se o intuito de atrasar as correções feitas pela fonte das EDO's. Isto é feito dividindo o termo fonte em pequenas parcelas que são introduzidas aos poucos nas recursões. Deste modo, pode-se analisar o comportamento dos termos situados na fonte, ou seja, se a correção que é feita em cada recursão é muito grande, gerando afastamento da solução exata e oscilações, e conseqüentemente a divergência da solução. O esquema de parcelamento e os resultados são apresentados na seção do **APÊNDICE A.4**.

A quinta abordagem baseia-se na ideia desenvolvida por Ceolin et al., 2011, onde o problema original de difusão é homogeneizado na recursão de inicialização da Decomposição. A técnica consiste em fazer uma média ponderada dos parâmetros nucleares na inicialização e as correções subseqüentes introduzem a atualização dos parâmetros heterogêneos. Utilizam-se as funções Heaviside na fonte referentes a cada fronteira das regiões e a solução é melhorada recursivamente para uma heterogênea. A construção do procedimento e os resultados são apresentados na seção do **APÊNDICE A.5**.

A sexta solução apresentada na seção do **APÊNDICE A.6** consiste na modificação da ordem de truncamento da série de Taylor. Ao invés de utilizar uma expansão quadrática para representar a solução dos fluxos e as concentrações de precursores, truncou-se a série no quarto termo, obtendo um polinômio cúbico. Apesar de já se ter afirmado através dos trabalhos publicados por Ceolin et al., 2014; Tumelero, 2015; Schramm, 2016 que um polinômio de ordem quadrática é eficiente para representar a solução local em cada célula espacial, o objetivo deste teste foi verificar se incluindo um novo termo e conseqüentemente realizando a conexão de mais coeficientes através das EDO's obtidas com os respectivos termos fonte, adicionaria mais contribuições às recursões que causariam a convergência desejada. A justificativa é que como espaço-tempo são acoplados, o truncamento na variável espacial leva um espaço incompleto para a parte temporal

que pode se manifestar na solução. Os resultados são apresentados na seção citada.

No sétimo teste efetua-se um desacoplamento nas equações dos fluxos e as concentrações de precursores de nêutrons atrasados. As equações que descrevem o comportamento das concentrações dos precursores de nêutrons atrasados são relativamente fáceis de se lidar numericamente, pois não possuem termos de grande escala multiplicando nos seus elementos, como ocorre para os fluxos com as velocidades. O processamento das suas exponenciais é despreocupante. Deste modo, separar as equações dos fluxos e as concentrações de precursores pode ser uma boa alternativa por reduzir o tamanho das matrizes, pois com o desacoplamento as matrizes para os fluxos geradas são 2×2 e para os precursores pode-se resolver diretamente sem a necessidade da representação matricial. Assim, pode-se melhorar o condicionamento das matrizes e a aritmética computacional do problema. Para visualizar o desacoplamento ver a seção do **APÊNDICE A.7**. Desta maneira, a atualização dos precursores entra na fonte das equações dos fluxos e vice-versa. Os resultados são apresentados na seção citada.

Já na seção do **APÊNDICE A.8**, descreve-se o integrando de cada recursão por uma parametrização com funções racionais. O objetivo é, através dessa parametrização, escrever o integrando de uma forma mais simples carregando a dependência do tempo das recursões anteriores, de forma que a resolução da integral se torne mais fácil e na tentativa de que ocorra convergência na sua resolução. Para este fim, utilizam-se aproximantes de Padé para descrever o integrando, formando um sistema de equações que determinam os coeficientes dos polinômios do numerador e denominador. Para solucionar o sistema encontrado, utiliza-se o algoritmo de Levenberg-Marquardt que reúne as principais vantagens de dois conhecidos métodos: Gauss-Newton e Gradiente. O primeiro possui forte taxa de convergência, mas somente quando está próximo de um mínimo da função custo. No entanto, por utilizar a inversão de matrizes, pode conduzir a matrizes singulares ocasionando a divergência da solução. O segundo possui relativamente baixa taxa de convergência, ou seja, necessitam-se de bastante iterações para se obter a solução desejada. Entretanto, possui uma estabilidade notória, dispensando inversões matriciais. Devido a um parâmetro escalar característico do algoritmo, o Método de Levenberg-Marquardt possui a velocidade do método de Gauss-Newton com a estabilidade do método do Gradiente. Todo desenvolvimento da metodologia para aplicar os aproximantes de Padé para descrever o integrando de cada recursão da Decomposição

do problema da presente tese e detalhes sobre o método de Levenberg-Marquardt são apresentados na seção do **APÊNDICE A.8**.

Na última abordagem, apresentada na seção do **APÊNDICE A.9**, realizou-se uma mudança na estrutura das EDO's. O objetivo é testar uma solução para as equações ordinárias onde as exponenciais de matrizes não estejam presentes, pois na aritmética computacional nas duas primeiras linhas obtém-se o valor zero, como pode ser visto na Figura 4.5. Para este fim, coloca-se a matriz dos coeficientes das equações diferenciais cheia (todos termos) na fonte. Os resultados obtidos, com gráficos e valores para os coeficientes, são apresentados na mesma seção.

4.4 Análise de sensibilidade de convergência da metodologia: Perturbação dos parâmetros nucleares

Esta seção tem por objetivo analisar a sensibilidade de convergência da metodologia proposta nesta tese, diante dos diferentes parâmetros nucleares. Para isso, fez-se simulações variando-os e observando a contribuição dos coeficientes da série de Taylor. Para exibir os resultados obtidos, apresentam-se gráficos somente para o coeficiente constante do fluxo rápido, pois este é o que mais adiciona correções durante as recursões. Todos os testes foram realizados originalmente em uma região caracterizada pelos parâmetros do Problema 1 homogêneo (Tabela 3.1), em que foi obtida convergência da solução, e variou-se cada uma das constantes nucleares separadamente.

O primeiro parâmetro físico a ser analisado é a seção de choque de remoção do grupo rápido. A Figura 4.11 mostra as contribuições das recursões do coeficiente constante do fluxo rápido, variando a seção de choque de remoção do grupo rápido, com $J = 100$. Pode-se perceber que ocorre convergência do coeficiente a partir do valor $\Sigma_{r1} = 0,019$. Valores comumente encontrados na literatura são os casos das Subfiguras 4.11f ($\Sigma_{r1} = 0,02$) e 4.11g ($\Sigma_{r1} = 0,026$) [Nagaya e Kobayashi, 1995].

O segundo parâmetro nuclear analisado é a seção de choque de remoção do grupo térmico. A Figura 4.12 exibe as contribuições das recursões do coeficiente constante do fluxo rápido, variando a seção de choque de remoção do grupo térmico, com $J = 100$. Pode-se perceber que ocorre convergência do coeficiente a partir do valor $\Sigma_{r2} = 0,075$. Valores correntemente vistos na literatura são os casos das Subfiguras 4.12a ($\Sigma_{r2} = 0,0186$), 4.12f ($\Sigma_{r2} = 0,08$) e 4.12g ($\Sigma_{r2} = 0,18$) [Nagaya e Kobayashi, 1995], ou seja,

para $\Sigma_{r2} = 0,0186$ a metodologia diverge.

A terceira constante nuclear analisada é a seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo térmico. A Figura 4.13 mostra as contribuições das recursões do coeficiente constante do fluxo rápido, variando a seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo térmico, com $J = 100$. Nota-se que ocorre convergência do coeficiente para os casos com valor menor e igual que $\Sigma_{s12} = 0,011$. Frequentemente, vê-se na literatura os casos das Subfiguras 4.13c ($\Sigma_{s12} = 0,01$), 4.13f ($\Sigma_{s12} = 0,015$) e 4.13h ($\Sigma_{s12} = 0,02201$) [Nagaya e Kobayashi, 1995], ou seja, dentre estes para $\Sigma_{s12} = 0,015$ e $\Sigma_{s12} = 0,02201$ a metodologia não converge.

O quarto parâmetro analisado é o termo que representa a fissão do grupo rápido $\nu\Sigma_{f1}$. A Figura 4.14 mostra as contribuições das recursões do coeficiente constante do fluxo rápido, variando $\nu\Sigma_{f1}$, com $J = 100$. Observa-se que ocorre convergência do coeficiente para os casos com valor menor e igual que $\nu\Sigma_{f1} = 0,006$. Valores usualmente utilizados na literatura são os casos das Subfiguras 4.14b ($\nu\Sigma_{f1} = 0,0034164$), 4.14d ($\nu\Sigma_{f1} = 0,005$) e 4.14h ($\nu\Sigma_{f1} = 0,01$) [Nagaya e Kobayashi, 1995], ou seja, destes para $\nu\Sigma_{f1} = 0,01$ a metodologia diverge.

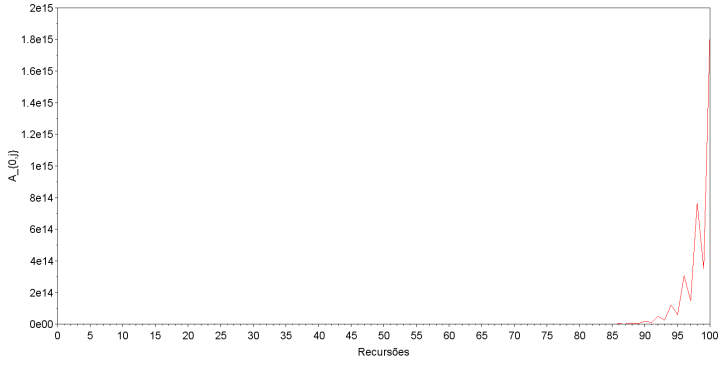
O quinto parâmetro nuclear analisado é o termo que representa a fissão do grupo térmico $\nu\Sigma_{f2}$. A Figura 4.15 expõe as contribuições das recursões do coeficiente constante do fluxo rápido, variando $\nu\Sigma_{f2}$, com $J = 100$. Constata-se que ocorre convergência do coeficiente para os casos com valor menor e igual que $\nu\Sigma_{f2} = 0,1$. Geralmente, encontra-se na literatura os casos das Subfiguras 4.15a ($\nu\Sigma_{f2} = 0$), 4.15c ($\nu\Sigma_{f2} = 0,099$), 4.15e ($\nu\Sigma_{f2} = 0,13933$) e 4.15f ($\nu\Sigma_{f2} = 0,2$) [Nagaya e Kobayashi, 1995], ou seja, destes para $\nu\Sigma_{f2} = 0,13933$ e $\nu\Sigma_{f2} = 0,2$ a metodologia não converge.

Para o coeficiente de difusão, a análise perturbativa nesse parâmetro não gerou alteração nos resultados dos coeficientes da série de Taylor. À primeira vista, parece ser uma boa resposta às perturbações inseridas. No entanto, investigando mais profundamente o algoritmo numérico, constatou-se que os arredondamentos computacionais nas exponenciais da matriz \mathbf{W}_0 para zero faz com que se percam as correções referentes às fugas no decorrer das recursões do método da Decomposição.

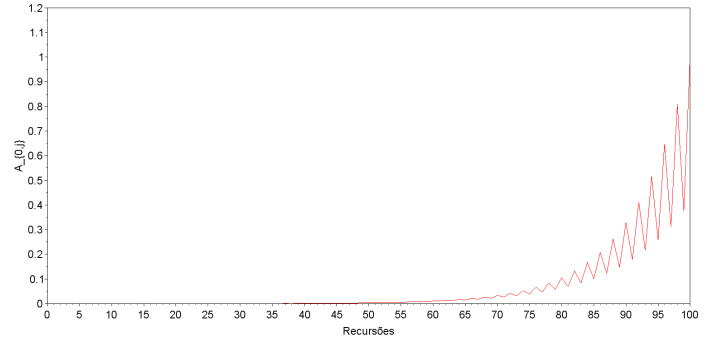
Diante desses resultados, pode-se afirmar que a metodologia proposta nesta tese não converge para todos conjuntos de parâmetros nucleares. Ao examinar a Tabela 4.1 referente às constantes físicas do problema heterogêneo, encontram-se vários parâmetros

com valores que causam a divergência da solução: Σ_{s12} , $\nu\Sigma_{f1}$ e $\nu\Sigma_{f2}$ nas regiões 1 e 3.

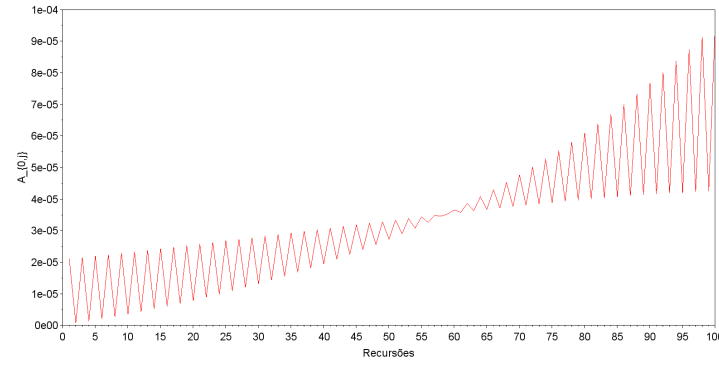
É inerente que a sensibilidade é causada devido à aritmética computacional ao computar as exponenciais de matrizes. Um valor muito pequeno arredondado para zero computacionalmente pode causar a perda das correções necessárias para tender os coeficientes da série de Taylor à zero com o crescer das recursões da Decomposição. Portanto, regiões como refletores em que Σ_{r1} e Σ_{r2} são baixas, ou então, em núcleos onde Σ_{s12} , $\nu\Sigma_{f1}$ e $\nu\Sigma_{f2}$ são grandes, a metodologia não converge. Cabe destacar que é possível combinar diferentes conjuntos de parâmetros e a análise feita aqui, apesar de englobar diversos tipos de casos, não abrange todas possibilidades, somente casos julgados mais oportunos foram apresentados.



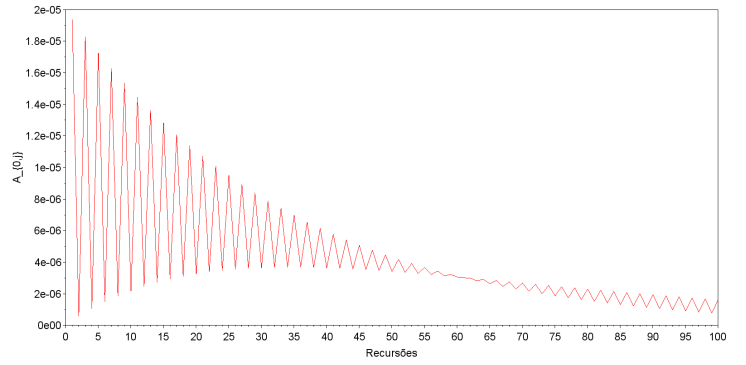
(a) $\Sigma_{r1} = 0,01.$



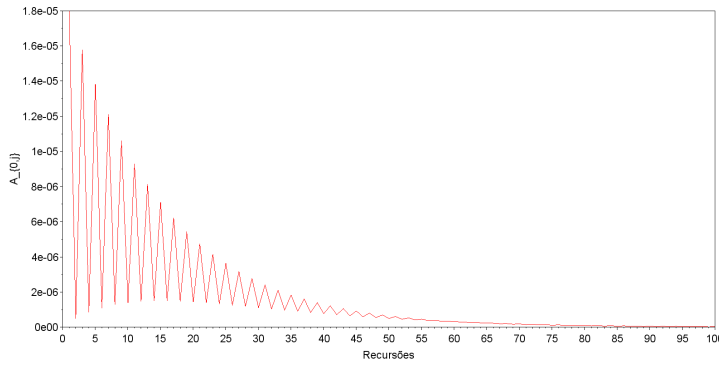
(b) $\Sigma_{r1} = 0,015.$



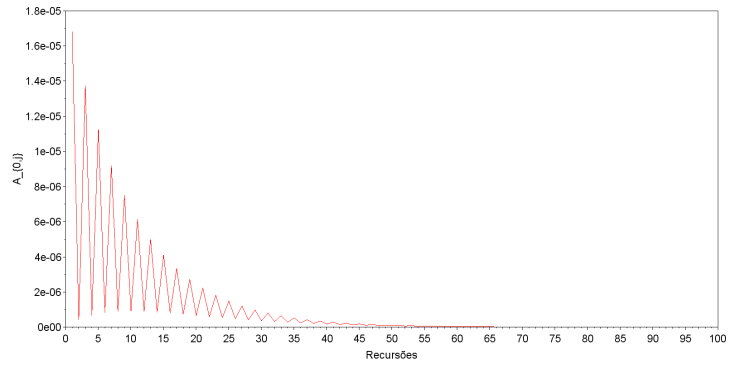
(c) $\Sigma_{r1} = 0,017.$



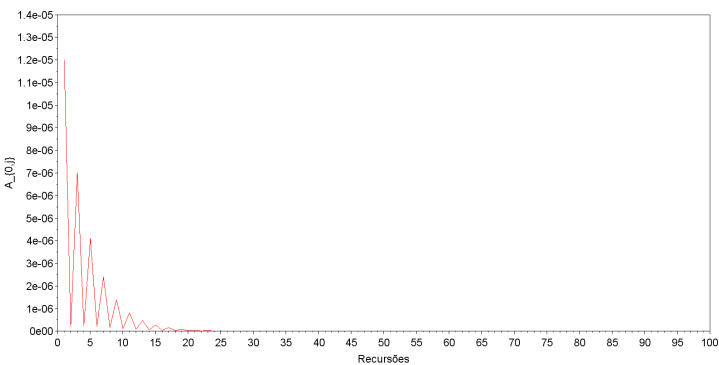
(d) $\Sigma_{r1} = 0,018.$



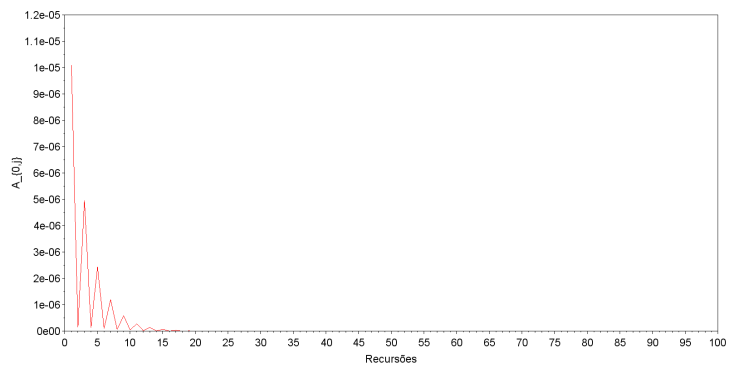
(e) $\Sigma_{r1} = 0,019.$



(f) $\Sigma_{r1} = 0,02.$

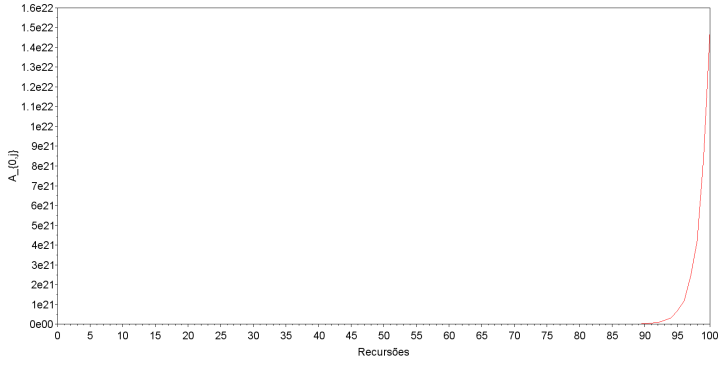


(g) $\Sigma_{r1} = 0,026.$

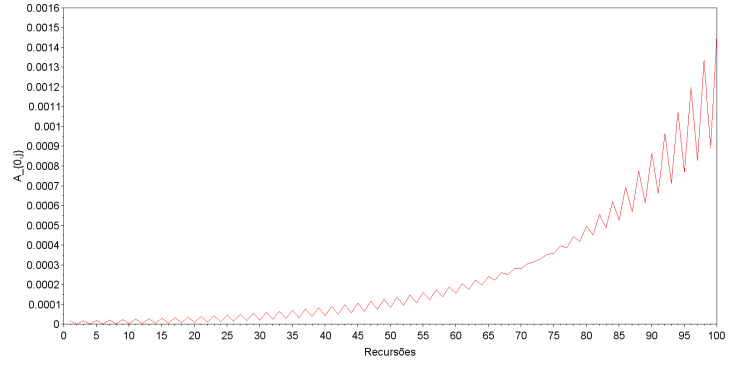


(h) $\Sigma_{r1} = 0,03.$

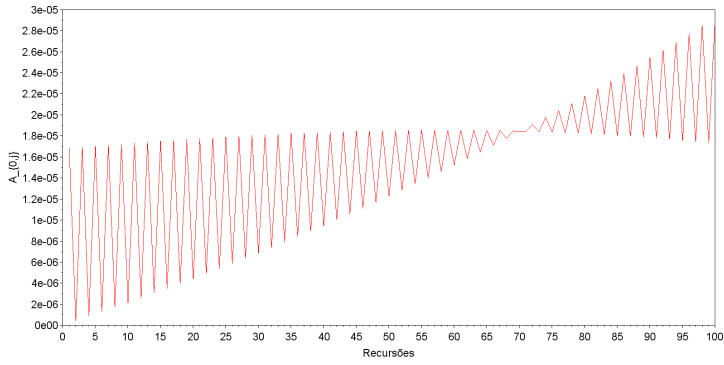
Figura 4.11 – Contribuições das recursões do coeficiente constante do fluxo rápido, variando a seção de choque de remoção do grupo rápido.



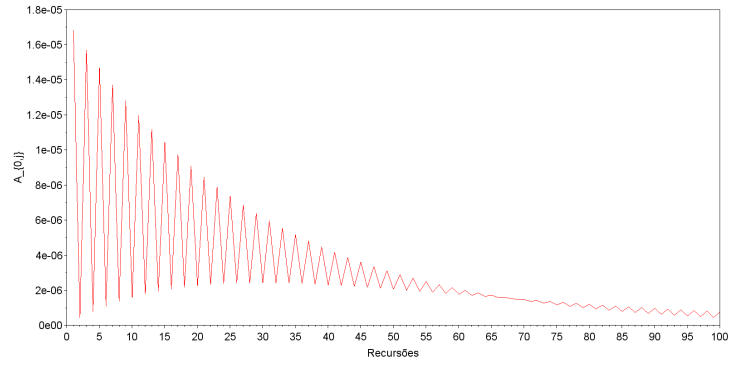
(a) $\Sigma_{r2} = 0,0186$.



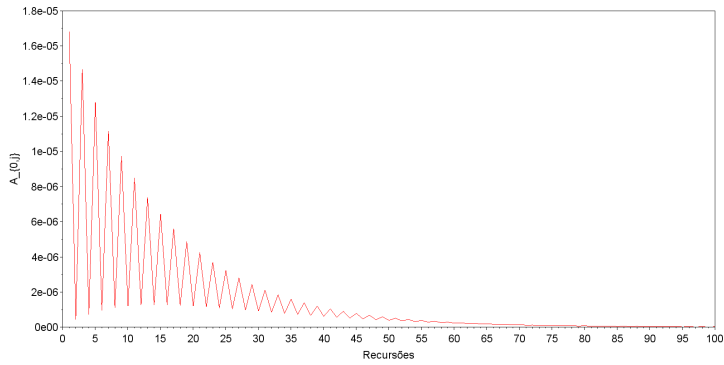
(b) $\Sigma_{r2} = 0,06$.



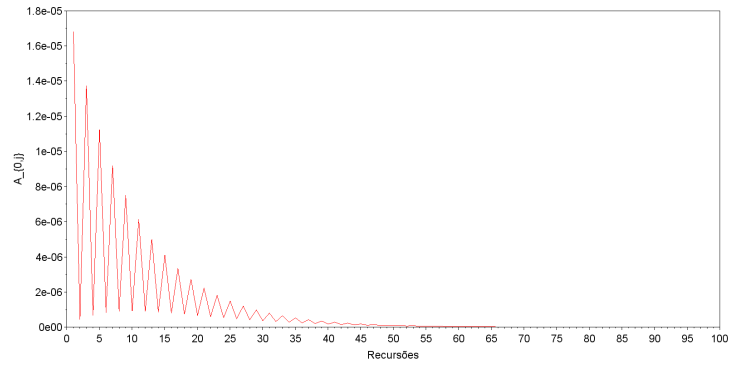
(c) $\Sigma_{r2} = 0,065$.



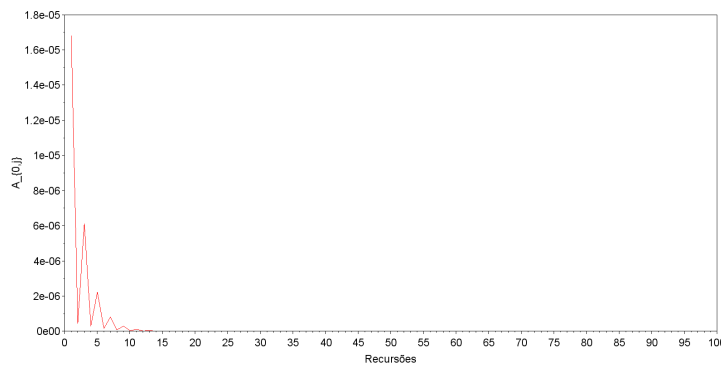
(d) $\Sigma_{r2} = 0,07$.



(e) $\Sigma_{r2} = 0,075$.



(f) $\Sigma_{r2} = 0,08$.



(g) $\Sigma_{r2} = 0,18$.

Figura 4.12 – Contribuições das recursões do coeficiente constante do fluxo rápido, variando a seção de choque de remoção do grupo térmico.

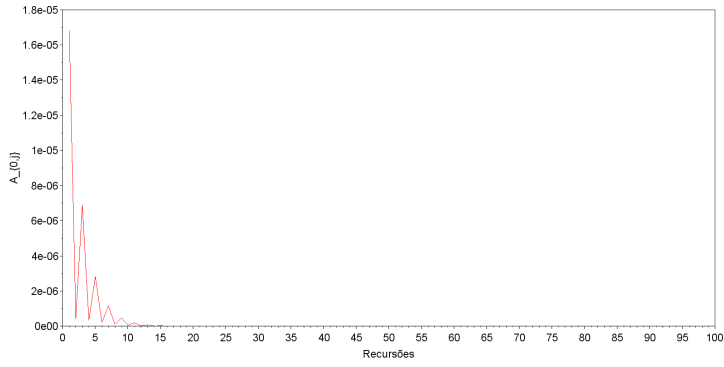
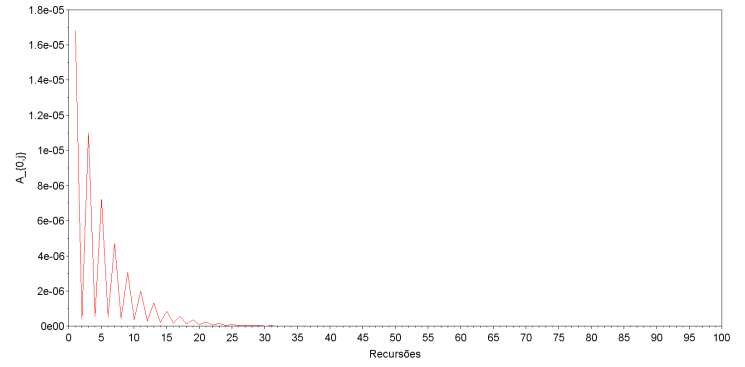
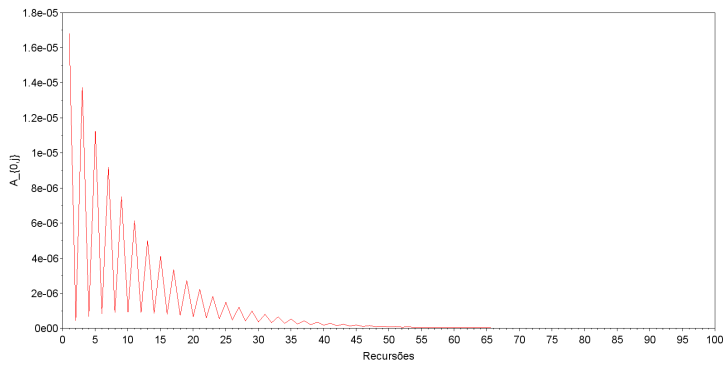
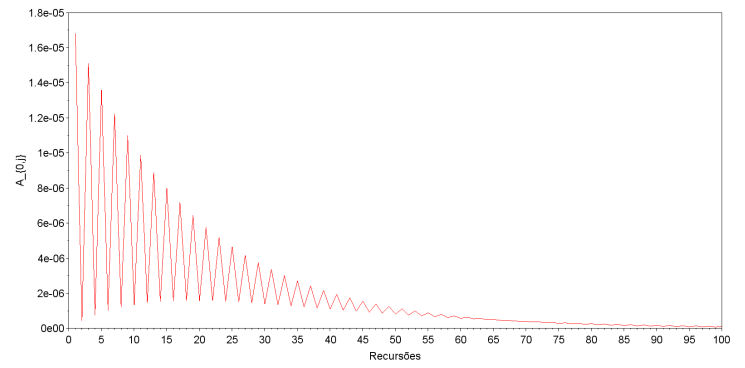
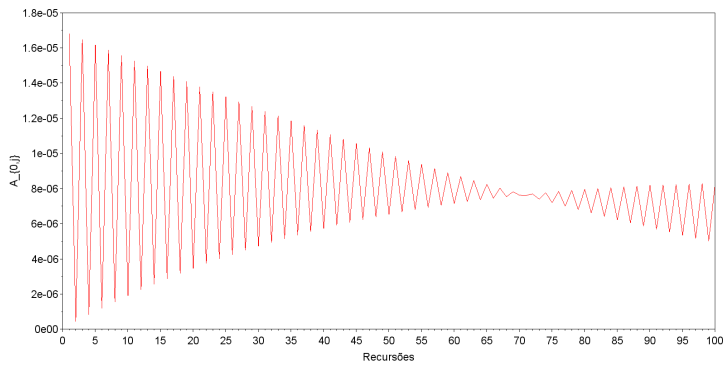
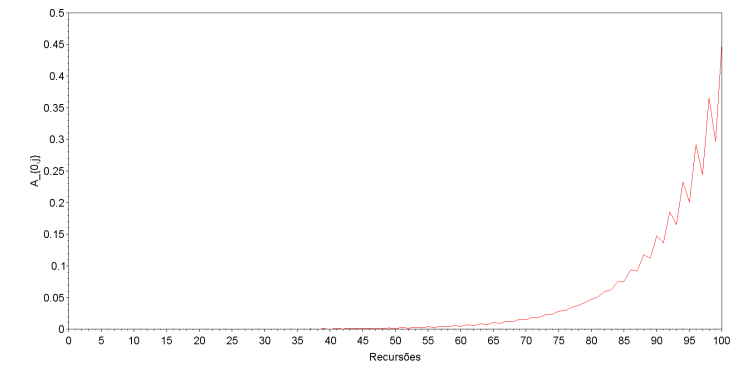
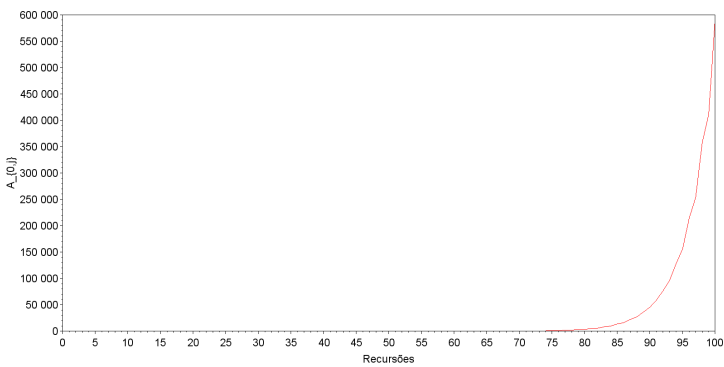
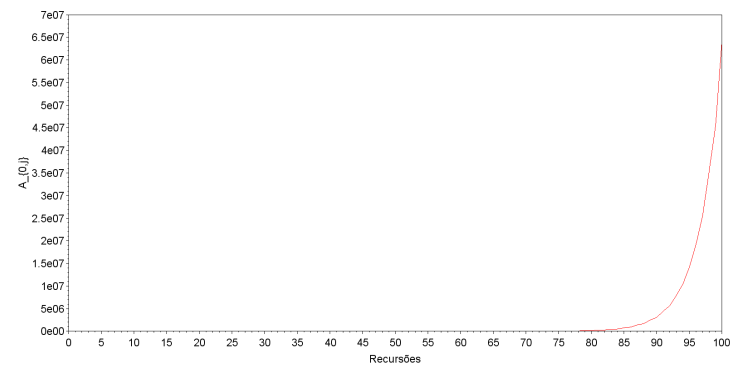
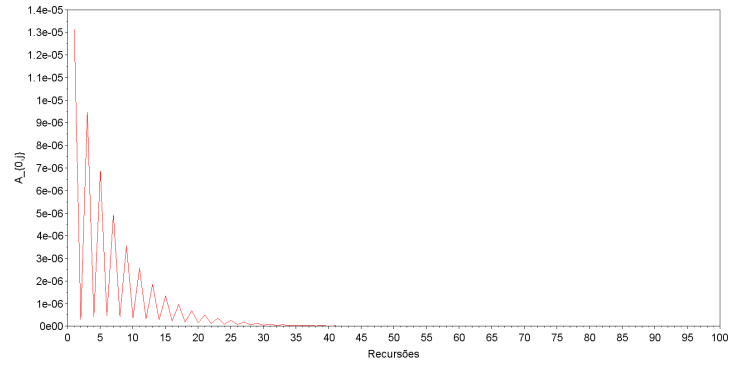
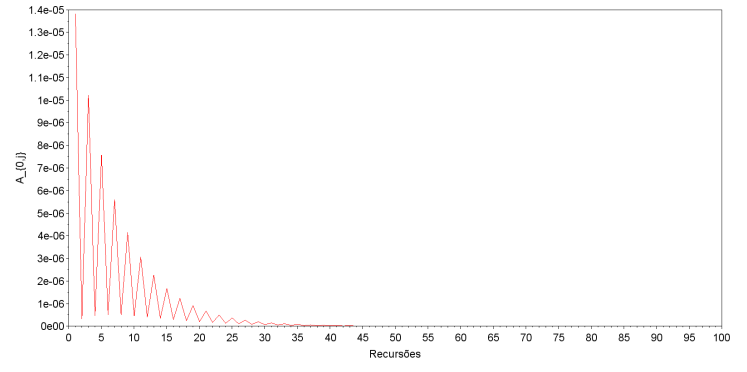
(a) $\Sigma_{s12} = 0,005$.(b) $\Sigma_{s12} = 0,008$.(c) $\Sigma_{s12} = 0,01$.(d) $\Sigma_{s12} = 0,011$.(e) $\Sigma_{s12} = 0,012$.(f) $\Sigma_{s12} = 0,015$.(g) $\Sigma_{s12} = 0,02$.(h) $\Sigma_{s12} = 0,02201$.

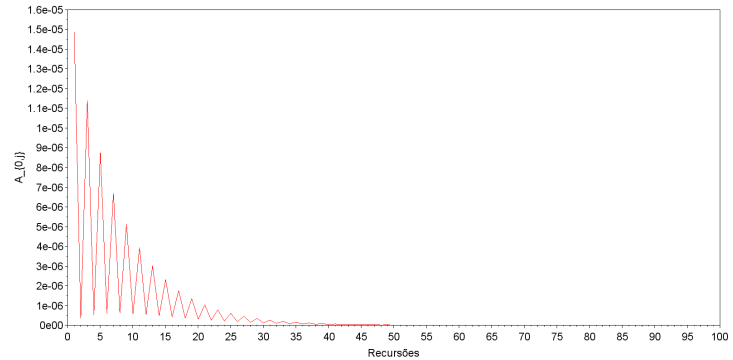
Figura 4.13 – Contribuições das recursões do coeficiente constante do fluxo rápido, variando a seção de choque de espalhamento do grupo rápido para o grupo térmico.



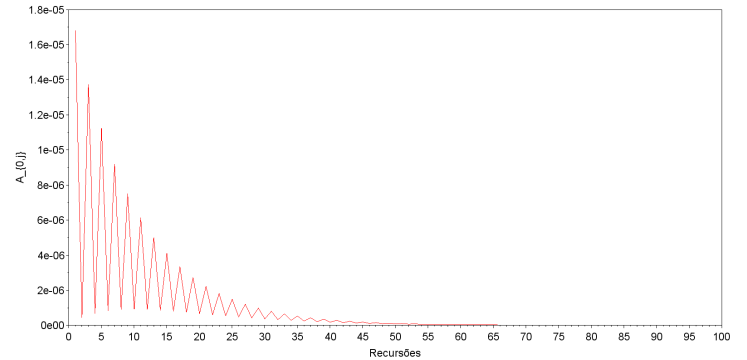
(a) $\nu\Sigma_{f1} = 0,003.$



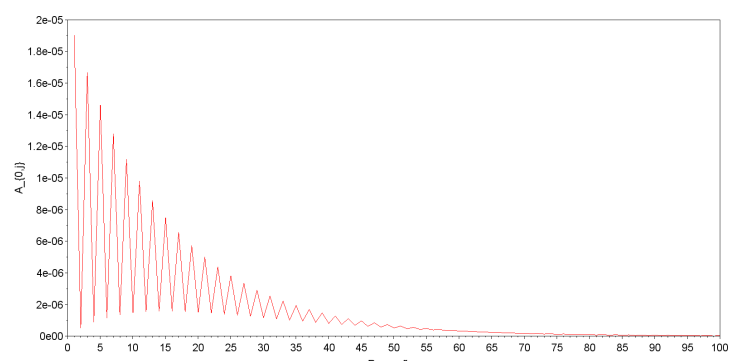
(b) $\nu\Sigma_{f1} = 0,034164.$



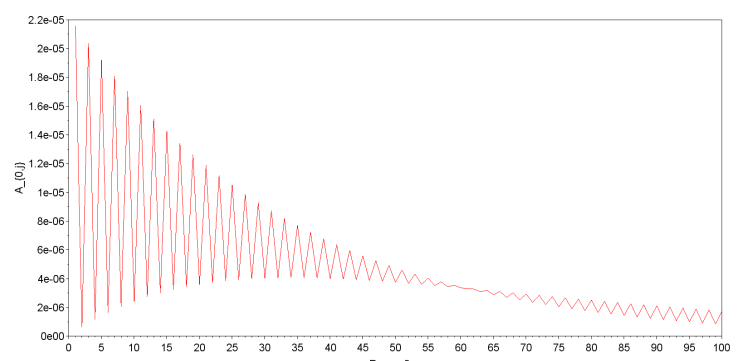
(c) $\nu\Sigma_{f1} = 0,004.$



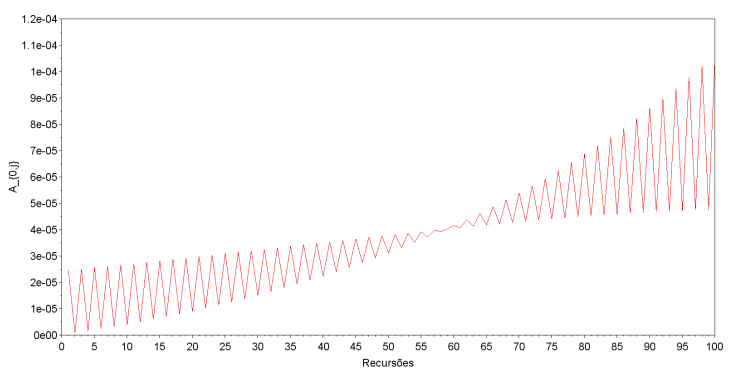
(d) $\nu\Sigma_{f1} = 0,005.$



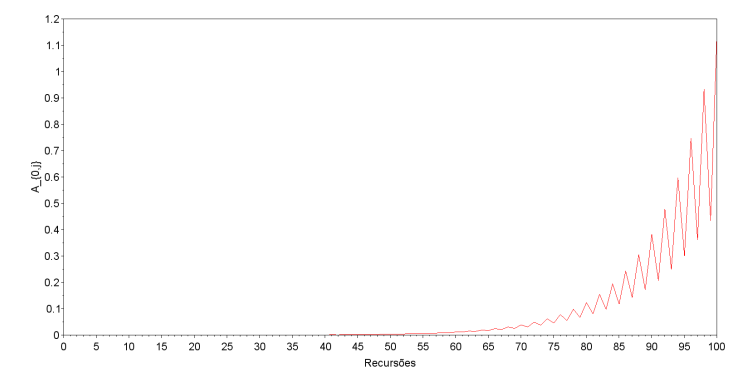
(e) $\nu\Sigma_{f1} = 0,006.$



(f) $\nu\Sigma_{f1} = 0,007.$

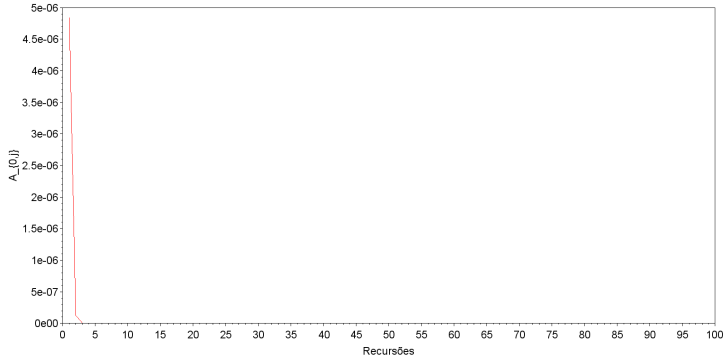


(g) $\nu\Sigma_{f1} = 0,008.$

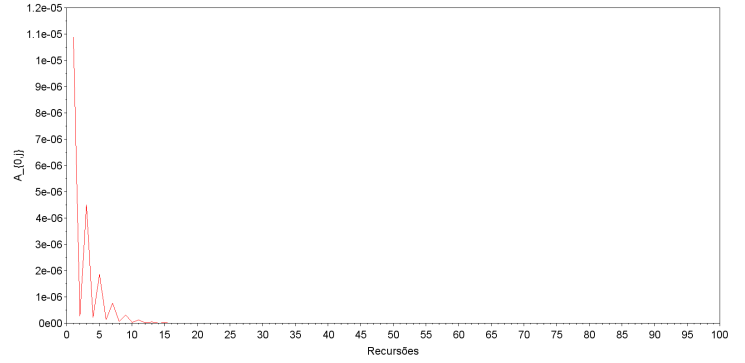


(h) $\nu\Sigma_{f1} = 0,01.$

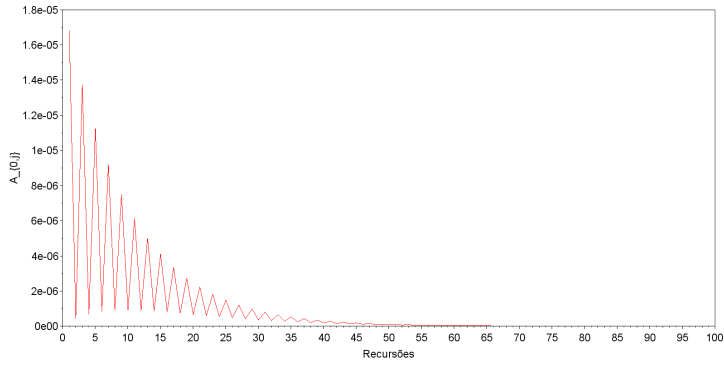
Figura 4.14 – Contribuições das recursões do coeficiente constante do fluxo rápido, variando o termo de fissão do grupo rápido.



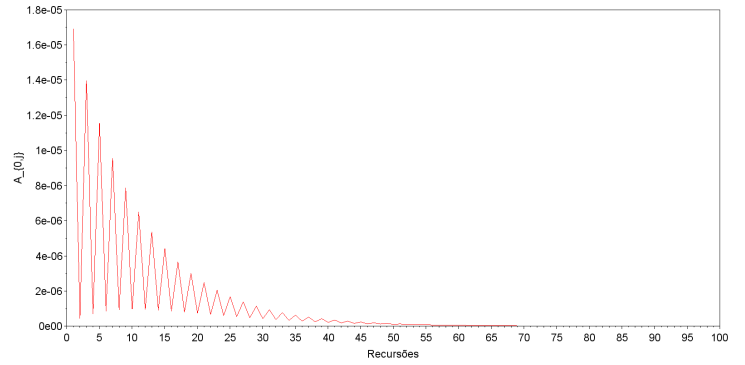
(a) $\nu\Sigma_{f2} = 0$.



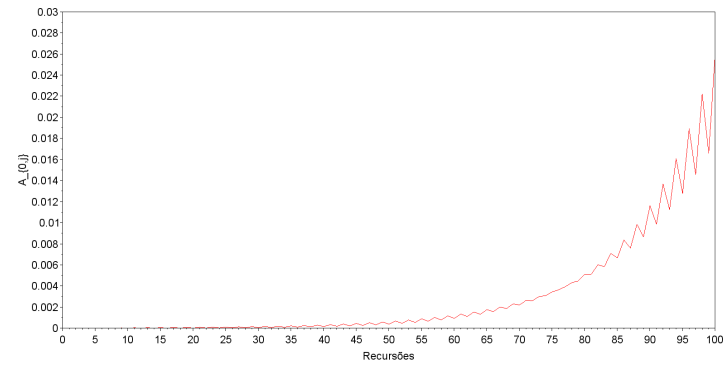
(b) $\nu\Sigma_{f2} = 0,05$.



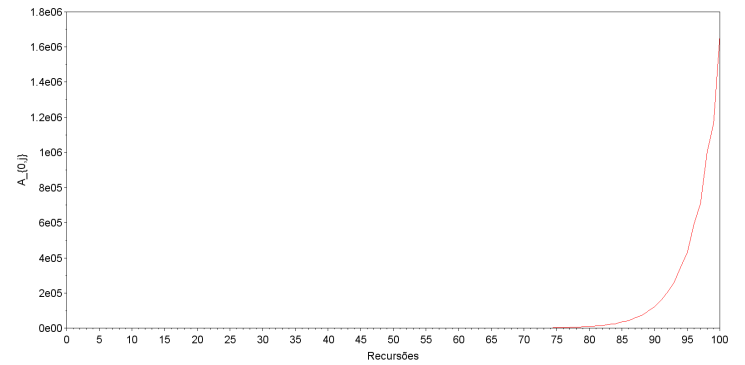
(c) $\nu\Sigma_{f2} = 0,099$.



(d) $\nu\Sigma_{f2} = 0,1$.



(e) $\nu\Sigma_{f2} = 0,13933$.



(f) $\nu\Sigma_{f2} = 0,2$.

Figura 4.15 – Contribuições das recursões do coeficiente constante do fluxo rápido, variando o termo de fissão do grupo térmico.

4.5 Considerações sobre os testes

Levando em consideração as abordagens para a aplicação das condições de contorno e interface, as estruturas de soluções empregadas e a análise de sensibilidade de convergência variando os parâmetros nucleares característicos do problema, pode-se inferir que a metodologia possui contratempos na convergência para a solução exata, causada por arredondamentos aritméticos computacionais. Mais especificamente, nas exponenciais matriciais com o arredondamento aritmético computacional para zero nas duas primeiras linhas ocorre perda de informações nas correções necessárias para convergência dos coeficientes da série de Taylor, fazendo que com o aumentar das recursões da Decomposição os coeficientes cresçam sem controle. Todas as tentativas de solução apresentadas, transformando as matrizes, fazendo relaxamento, parcelamentos, entre outros, não auxiliaram para a resolução deste empecilho. Outro fato a ser destacado é que através dos testes das transformações de unidades e do parcelamento da fonte, pode-se reforçar a afirmação de que a dificuldade está na exponencial da matriz, pois estes dois procedimentos retardaram as correções e/ou tornaram mais pequenas e mesmo assim a solução divergiu. Isto posto, não se pode afirmar categoricamente que as propostas de aplicação das condições de contorno e interface funcionam ou não, pois primeiramente precisa-se da convergência da solução para investigar isto a fundo.

5 CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS FUTURAS

Neste trabalho é apresentada uma solução com representação analítica para as Equações de Cinética Espacial da teoria de Difusão de Nêutrons, considerando dois grupos de energia, seis grupos de precursores de nêutrons atrasados, em geometria cartesiana unidimensional e domínio homogêneo. Além disso, comparam-se as soluções obtidas com resultados da literatura e realiza-se um estudo de convergência da solução encontrada para os problemas estudados, bem como do controle do erro utilizando a própria equação diferencial como estimativa. Ademais, apresentam-se os resultados da aplicação da metodologia com diferentes abordagens para o problema heterogêneo, inclusive para impor as condições de continuidade de fluxo e de corrente de nêutrons entre as interfaces das regiões.

A expansão em séries de Taylor carregando a dependência temporal nos coeficientes dessa série é uma novidade diante da literatura existente. A aplicação da expansão até o terceiro termo implica a segmentação do domínio original em subdomínios. O tamanho do subdomínio é escolhido de tal forma que o polinômio se aproxima da solução atingindo uma precisão prescrita. Com a aplicação da expansão assim definida, obtém-se um conjunto de sistemas recursivos de equações diferenciais ordinárias dependentes do tempo. Destaca-se que o estudo da estimativa de convergência demonstra que as maiores contribuições são dadas pelos primeiros termos e decresce sua importância com o aumento da ordem do polinômio. Percebe-se, através dessa análise, que a contribuição do termo de ordem quadrática é suave. Assim, a ordem escolhida é suficiente e bem definida, em vista de que polinômios de ordens mais elevadas poderiam gerar mais erros de máquina na execução do algoritmo numérico.

A mudança na expansão da série de Taylor, deixando os coeficientes com a dependência temporal, propiciou a utilização do Método da Decomposição modificado resultando em um sistema recursivo. Esse, por sua vez, com o simples artifício aritmético computacional, que consiste na decomposição da matriz dos coeficientes em duas, uma diagonal com elementos constantes e a outra, inserida na fonte, carregando os termos restantes e a dependência temporal (caso exista), contorna a característica de rigidez do problema. A inicialização das recursões considera apenas a matriz diagonal constante, desacoplando contribuições com constantes de tempo de diferentes ordens de magnitude.

Todas as recursões subsequentes consideram os termos dependentes do tempo e fora da diagonal da matriz original, utilizando os resultados determinados nas recursões anteriores. Esse procedimento evita a utilização da continuação analítica, ou seja, a integração em cada intervalo de tempo. Deste modo, a solução obtida é calculada para o instante de tempo desejado, sem a necessidade de resolver os anteriores. Cada recursão capta e corrige simultaneamente a evolução temporal da curva em todos os tempos precedentes. Em consequência disso, geram-se menos erros de arredondamento e de máquina, pois métodos que empregam continuação analítica acumulam esses erros no decorrer das iterações temporais. Cabe destacar que devido a esse fato, o esforço computacional é pequeno. Para instantes de tempo baixos não há significativos ganhos computacionais, mas à medida que se aumenta o momento pretendido atingem-se benefícios expressivos. Portanto, ressalta-se a contribuição do método proposto com representação analítica para problemas aplicados à física de reatores nucleares, em virtude de solucionar equações rígidas, caracterizadas pela grande diferença de escala de tempo entre os nêutrons prontos e atrasados. Em equações desse tipo, normalmente com transientes de curta duração, obtêm-se soluções somente com a utilização de métodos numéricos A-estáveis.

A solução para as Equações de Cinética Espacial de Difusão apresentada tem representação analítica não rígida, tendo em vista que nenhuma aproximação é feita ao longo do desenvolvimento da metodologia, a não ser o truncamento das expansões em séries. Além disso, a abordagem matricial da solução é conveniente para problemas de matrizes de ordem elevada advinda do número de precursores de nêutrons atrasados, grupos de energia e número de regiões.

A metodologia de solução proposta é simples e robusta diante das abordagens através de métodos numéricos, os quais normalmente requerem a interpolação entre passos subsequentes, devido à discretização do domínio. No entanto, o emprego de polinômios para as variáveis espaço-temporal descrevem continuamente a solução.

Os resultados obtidos para conhecidos *benchmarks* para o problema homogêneo, juntamente com o estudo de convergência e a estimativa do controle do erro, mostram a precisão, estabilidade e convergência da metodologia. A abordagem desenvolvida acerca deste estudo foi além de elementares critérios de parada, apesar de não terem sido desenvolvidas provas matematicamente rigorosas. Deste modo, além de apresentar o número de recursões necessárias para atingir determinado número de dígitos significativos, mostra-se

um critério para estimativa de erro, convergência e estabilidade, calculando os termos residuais gerados com a variação espaço-tempo utilizando a própria equação diferencial como estimativa pela norma máxima. Assim, obtiveram-se termos residuais pequenos e a solução mostrou-se estável diante de perturbações. Com essa análise, pode-se confirmar que a solução encontrada está próxima da solução verdadeira. Cabe ressaltar que a maioria das abordagens presentes na literatura utilizam apenas critérios de parada com as soluções obtidas para dois passos consecutivos, os quais são insuficientes para afirmar que o método converge.

Em vista da anterior discussão, o presente trabalho possui um estudo completo sob o ponto de vista matemático, pois apresenta resultados satisfatórios para o problema homogêneo, juntamente com uma análise de controle de erro, convergência e estabilidade. Assim, diante desses resultados satisfatórios, simplicidade do método e implementação do algoritmo, caráter analítico, nova proposta de expansão em série de Taylor com coeficientes dependentes da variável temporal e eliminação da rigidez do problema utilizando a Decomposição de Adomian modificado com o desacoplamento das diferentes escalas temporais, ressalta-se a relevância do método proposto na solução de problemas em cinética de reatores nucleares.

Já para os resultados obtidos para o problema heterogêneo, tendo em vista as abordagens para assegurar o cumprimento das condições de contorno e interface, o tratamento das estruturas de soluções empregadas e a análise de sensibilidade de convergência por meio da variação dos parâmetros nucleares das Equações Cinéticas de Difusão, pode-se afirmar que a metodologia possui dificuldades na convergência para a solução exata diante de diferentes conjuntos de constantes físicas características. Constatou-se que arredondamentos aritméticos computacionais nas exponenciais matriciais causam perda de informações nas correções necessárias para convergência dos coeficientes da série de Taylor, fazendo que com o aumentar das recursões da Decomposição os coeficientes cresçam descontroladamente. As estruturas de solução e procedimentos apresentados com o intuito de induzir à convergência, transformando as matrizes, fazendo relaxamento, parcelamentos da fonte, entre outros, não auxiliaram para a resolução deste empecilho. Diante disso, os procedimentos apresentados para a imposição das condições de contorno e interface não podem ser julgados categoricamente se funcionam ou não para o caso da presente tese, pois isto só seria possível afirmar se a convergência da solução tivesse sido alcançada

para o conjunto de parâmetros que caracterizam o *benchmark* heterogêneo testado.

As perspectivas futuras consistem em procurar uma abordagem menos sensível à particularidades como parâmetros nucleares e com convergência aprimorada, para resolver o problema em uma e duas dimensões em domínio heterogêneo, bem como calcular a estimativa de convergência, estabilidade e controle do erro, analogamente aos casos já elaborados.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Aboanber, A. E. e Hamada, Y. M. Generalized Runge–Kutta method for two– and three–dimensional space–time diffusion equations with a variable time step, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 35(6), p. 1024–1040, 2007.

Aboanber, A. E. e Nahla, A. A. Generalization of the analytical inversion method for the solution of the point kinetics equations, **Journal of Physics A: Mathematical and General**, vol. 35, p. 3245–3263, 2002a.

Aboanber, A. E. e Nahla, A. A. Solution of the point kinetics equations in the presence of Newtonian temperature feedback by Padé approximations via the analytical inversion method, **Journal of Physics A: Mathematical and General**, vol. 35, p. 9609–9627, 2002b.

Adomian, G. A review of the decomposition method in applied mathematics, **Journal of Mathematical Analysis and Applications**, vol. 135(2), p. 501–544, 1988.

Adomian, G. **Solving Frontier Problems of Physics: The Decomposition Method**. 60. Springer Netherlands, 1994.

Adominan, G. e Rach, R. Modified Adomian polynomials, **Mathematical and Computer Modelling**, vol. 24(11), p. 39–46, 1996.

Altino, H. O. N., Romanielo, L. L., e Arvelos, S. **Rotas reacionais e análise termodinâmica da reação de oxidesidratação do glicerol em ácido acrílico**. Fortaleza, CE, Brasil. Anais do XXI Congresso Brasileiro de Engenharia Química, 2016.

Barros, R. C., Alves, Filho, H., Orellana, E. T. V., Silva, F. C., Couto, N., Dominguez, D. S., e Hernández, C. R. G. The application of spectral nodal methods to discrete ordinates and diffusion problems in Cartesian geometry for neutron multiplying systems, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 42(4), p. 385–426, 2003.

Ceolin, C. **Solução Analítica da Equação Cinética de Difusão Multigrupo de Nêutrons em Geometria Cartesiana Unidimensional Pela Técnica da Transformada Integral**. Dissertação de mestrado, UFRGS, Porto Alegre/RS, 2010.

Ceolin, C. **A equação unidimensional de difusão de nêutrons com modelo multigrupo de energia e meio heterogêneo: avaliação do fluxo para problemas estacionários e de cinética**. Tese de doutorado, UFRGS, Porto Alegre/RS, 2014.

Ceolin, C., Schramm, M., Bodmann, B. E. J., e Vilhena, M. T. **On progress of the solution of the stationary 2–dimensional neutron diffusion equation: A polynomial approximation method with error analysis**. São Paulo, SP, Brasil. Anais do International Nuclear Atlantic Conference – INAC 2015, 2015a.

Ceolin, C., Schramm, M., Bodmann, B. E. J., Vilhena, M. T., e Leite, D. Q. On an analytical evaluation of the flux and dominant eigenvalue problem for the steady state multi–group multi–layer neutron diffusion equation, **Kerntechnik**, vol. 79(5), p. 430–435, 2014.

Ceolin, C., Schramm, M., Vilhena, M. T., e Bodmann, B. E. J. 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**, vol. 76, p. 271–282, 2015b.

Ceolin, C., Schramm, M. and Vilhena, M. T., e Bodmann, B. E. J. **On an evaluation of the continuous flux and dominant eigenvalue problem for the steady state multi-group multi-layer neutron diffusion equation**. Recife, PE. Anais do International Nuclear Atlantic Conference – INAC 2013, 2013.

Ceolin, C., Vilhena, M. T., Bodmann, B. E. J., e Alvim, A. C. M. **On the Analytical Solution of the Multi Group Neutron Diffusion Kinetic Equation in a Multilayered Slab**. Belo Horizonte, MG, Brasil. Anais do International Nuclear Atlantic Conference – INAC 2011, 2011.

Chapra, S. e Canalle, R. **Métodos Numéricos para Engenharia**. McGraw Hill, Brasil, 5ed edition, 2008.

Contributors, N. P. **Shutdown Margin – SDM**. <https://www.nuclear-power.net/nuclear-power/reactor-physics/reactor-operation/shutdown-margin-sdm/>, 2018.

Corno, S. E., Dulla, S., Picca, P., e Ravetto, R. Analytical approach to the neutron kinetics of the non-homogeneous reactor, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 50(8), p. 847–865, 2008.

Crighton, D., Dowling, A., Ffowcs Williams, J., Heckl, M., e Leppington, F. **Modern Methods in Analytical Acoustics**. Springer-Verlag London, London, 1988.

Da Silva, M. W. **Representação Analítica da Solução da Equação de Cinética Pontual para a Reatividade Variável no Tempo Livre de Rigidez**. Dissertação de mestrado, UFRGS, Porto Alegre/RS, 2013.

Da Silva, M. W., Leite, S. B., Vilhena, M. T., e Bodmann, B. E. J. On an analytical representation for the solution of the neutron point kinetics equation free of stiffness, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 71, p. 97–102, 2014.

Dahmani, M., Baudron, A. M., Lautard, J. J., e Erradi, L. A 3D nodal mixed dual method for nuclear reactor kinetics with improved quasistatic model and a semi-implicit scheme to solve the precursor equations, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 28(8), p. 805–824, 2001.

Duderstadt, J. e Hamilton, L. **Nuclear Reactor Analysis**. John Wiley & Sons, New York, 1976.

Facco, W. G. **Tratamento de descontinuidade de material no Método dos Elementos Finitos Generalizado**. Tese de doutorado, UFMG, Belo Horizonte/MG, 2012.

França, J. A., França, M. B. M., Koyama, M. H., e Silva, T. P. Uma implementação do algoritmo Levenberg-Marquart dividido para aplicações em visão computacional, **Semina: Ciências Exatas e Tecnológicas**, vol. 30, p. 51–62, 2009.

Ganapol, B. D. A highly accurate algorithm for the solution of the point kinetics equations, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 62, p. 564–571, 2013.

Garland, W. J. **The Essential CANDU, A Textbook on the CANDU Nuclear Power Plant Technology**. University Network of Excellence in Nuclear Engineering (UNENE), 2014.

Gomes, H. C. **Método dos Elementos Finitos com Fronteiras Imersas aplicado a Problemas de Dinâmica dos Fluidos e Interação Fluido-Estrutura**. Tese de doutorado, USP, São Paulo/SP, 2013.

Guyot, M. e Gubernatis, P. Space–time effects in the initiating phase of sodium fast reactors and their evaluation using a three–dimensional neutron kinetics model, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 85, p. 115–126, 2015.

Heinen, I. R. **Soluções Analíticas da Equação de Difusão de Nêutrons Geralpor Técnicas de Transformadas Integrais**. Tese de doutorado, UFRGS, Porto Alegre/RS, 2009.

Jagannathan, V. An analysis of multidimensional reactor transients using reduced integration techniques in the finite–element method, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 13(7), p. 379–390, 1985.

Kaplan, S. Some New Methods of Flux Synthesis, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 13(1), p. 22–31, 1962.

Keepin, G. R. **Physics of Nuclear Kinetics**. Addison-Wesley Publishing Company, Massachusetts, 1965.

Koclas, J. Comparisons of the different approximations leading to mesh centered finite differences starting from the analytic nodal method, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 25(11), p. 821–838, 1998.

Kremer, G. M. e Liu, I. Termodinâmica de Misturas Fluido-Sólido, **Revista Brasileira de Física**, vol. 10(2), p. 275–292, 1980.

Ladeia, C. A., Bodmann, B. E. J., e Vilhena, M. T. The radiative conductive transfer equation in cylinder geometry: Semi-analytical solution and a point analysis of convergence, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 217, p. 338–352, 2018.

Ladeia, C. A., Bodmann, B. E. J., e Vilhena, M. T., **On the Integro-Differential Radiative Conductive Transfer Equation: A Modified Decomposition Method**, p. 197–210. *Integral Methods in Science and Engineering*. Birkhäuser, Cham, 2019.

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

Lawrence, R. D. e Dorning, J. J. A Nodal Green’s Function Method for Multi-dimensional Neutron Diffusion Calculations, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 76(2), p. 218–231, 1980.

Lemos, R. S. M. **Solução Analítica das Equações Difusivas da Teoria Geral de Perturbação pelo Método da Transformada de Laplace**. PhD thesis, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica – PROMEC/UFRGS, Porto Alegre, RS, Brasil, 2005.

Lemos, R. S. M., Vilhena, M. T., Silva, F. C., e Segatto, C. F. **Solution of the Diffusion Equation in the GPT Theory by the Laplace Transform Technique**. Anais do XXVIII ICTT, 2003.

Lemos, R. S. M., Vilhena, M. T., Silva, F. C., e Zabadal, J. **Utilização da Transformada de Laplace na Teoria de Perturbação Generalizada**. Anais do XIII ENFIR, 2002.

Levenberg, K. A method for the solution of certain non-linear problems in least squares, **Quarterly of Applied Math**, vol. 2, p. 164–168, 1944.

Lewis, E. E. **Fundamentals of Nuclear Reactor Physics**. Elsevier's Science and Technology, Oxford, 2008.

Marquardt, D. W. An algorithm for least-squares estimation of nonlinear parameters, **Journal of the Society for industrial and Applied Mathematics**, vol. 11, p. 431–441, 1963.

Molery, C. e Loanz, C. V. Nineteen Dubious Ways to Compute the Exponential of a Matrix, Twenty-Five Years Later, **SIAM Review**, vol. 45, p. 3–49, 2003.

Nagaya, Y. e Kobayashi, K. Solution of 1-D multi-group time-dependent diffusion using the coupled reactors theory, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 22, p. 421–440, 1995.

Nahla, A. A. Generalization of the analytical exponential model to solve the point kinetics equations of Be- and D₂O-moderated reactors, **Nuclear Engineering and Design**, vol. 238, p. 2648–2653, 2008.

Nahla, A. A. Taylor's series method for solving the nonlinear point kinetics equations, **Nuclear Engineering and Design**, vol. 241, p. 1592–1595, 2011.

Nahla, A. A., Al-Malki, F. A., e Rokaya, M. Numerical Techniques for the Neutron Diffusion Equations in the Nuclear Reactors, **Advanced Studies in Theoretical Physics**, vol. 6(14), p. 649–664, 2012.

Nahla, A. A. e Zayed, E. M. E. Solution of the nonlinear point nuclear reactor kinetics equations, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 52, p. 743–746, 2010.

Navarro, M. C. K. A., Aguilera-Navarro, V. C., Teramon, N., e Ferreira, R. C. Os aproximantes de Padé, **Revista Matemática Universitária**, vol. 26/27, p. 49–66, 1999.

Noble, B. **Method based on the Wiener-Hopf technique**. Chelsea Publishing Company, New York, 1988.

Oliveira, F. R. **Solução Analítica da Equação de Multigrupo de Cinética de Nêutrons em Geometria Cartesiana e Cilíndrica Unidimensionais**. Dissertação de mestrado, PPGMAP - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/RS, 2013.

Ott, K. O. e Madell, J. T. Quasistatic treatment of spatial phenomenon in reactor dynamics, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 26, 1966.

Ott, K. O. e Meneley, D. A. Accuracy of the Quasistatic Treatment of Spatial Reactor Kinetics, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 36(3), p. 402–411, 1969.

Petersen, C. Z. **Solução Analítica das equações da Cinética Pontual e Espacial da Teoria de Difusão de Nêutrons pelas técnicas da GITT e Decomposição**. Tese de doutorado, UFRGS, Porto Alegre/RS, 2011.

Petersen, C. Z., Dulla, S., Vilhena, M. T., Ravetto, P., e Bodmann, B. **On the Analytical Solution of the Multigroup Neutron Kinetics Diffusion Equations in Homogeneous Parallelepiped**. Belo Horizonte, MG, Brasil. Anais do International Nuclear Atlantic Conference – INAC 2011, 2011a.

Petersen, C. Z., Dulla, S., Vilhena, M. T. B., e Ravetto, P. An analytical solution of the point kinetics equations with time-variable reactivity by the decomposition method, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 53, p. 1091–1094, 2011b.

Picca, P. e Furfaro, R. Neutron inverse kinetics via Gaussian Processes, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 47, p. 146–154, 2012.

Rokrok, B., Minucmehr, H., e Zolfaghari, A. Element-free Galerkin modeling of neutron diffusion equation in X–Y geometry, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 43, p. 39–48, 2012.

Schramm, M. **Análise do Modelo Fracionário de Cinética Pontual de Nêutrons pelo Método da Decomposição**. Dissertação de mestrado, UFRGS, Porto Alegre/RS, 2013.

Schramm, M. **An algorithm to multi-group two-dimensional neutron diffusion kinetics in nuclear reactors cores**. PhD thesis, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica – PROMEC/UFRGS, Porto Alegre, RS, 2016.

Shober, R. A., Sims, R. N., e Henry, A. F. Two Nodal Methods for Solving Time-Dependent Group Diffusion Equations, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 64(2), p. 582–592, 1977.

Soares, H. V. **Avaliações de segurança do reator multipropósito brasileiro**. Tese de doutorado, Universidade Federal de Minas Gerais, Escola de Engenharia, Belo Horizonte, MG, 2014.

Tavares, M. G. **Solução das Equações de Cinética Espacial da Teoria Multigrupo de Difusão de Nêutrons em Geometria Cartesiana por um Método Iterativo de Fonte**. Dissertação de mestrado, Universidade Federal de Pelotas - UFPel, Programa de Pós Graduação em Modelagem Matemática, Pelotas, Brasil, 2018.

Tumelero, F. **Solução das equações da cinética pontual de nêutrons com e sem retroalimentação de temperatura pelo método da aproximação polinomial**. Dissertação de mestrado, UFPel, Pelotas/RS, 2015.

Tumelero, F., Petersen, C. Z., Gonçalves, G. A., e Schramm, M. Polynomial approach method to solve the neutron point kinetics equations with use of the analytic continuation, **Kerntechnik**, vol. 81, p. 662–670, 2016.

Utku, H. e Christenson, J. M. An Investigation of the Temporal Subdomain Method for Solving the Finite Element Formulation of the Space–Time Reactor Kinetics Equations, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 116(1), p. 55–56, 1994.

Vilhena, M. T. M. B., Heinen, I. R., e Bodmann, B. An analytical solution for the general perturbative diffusion equation by integral transform techniques, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 35(12), p. 2410–2413, 2008.

Watt, B. E. Energy spectrum of neutrons from thermal fission of U-235, **Physical Review**, vol. 87, p. 1037–1041, 1952.

Wright, M. C. M. **Lecture Notes on the Mathematics of Acoustics: The Wiener–Hopf Technique**. Imperial College Press, London, 2004.

Yasinsky, J. B. e Henry, F. Some Numerical Experiments Concerning Space–Time Reactor Kinetics Behavior, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 22(2), p. 171–181, 1965.

Zanette, R. **Solução da Equação de Difusão de Nêutrons Multigrupo Multirregião Estacionária em Geometria Cartesiana pelo Método da Potência via Fronteiras Fictícias**. Dissertação de mestrado, Universidade Federal de Pelotas - UFPel, Programa de Pós Graduação em Modelagem Matemática, Pelotas, Brasil, 2017.

Zienkiewicz, O. e Taylor, R. **The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals**. Elsevier Science, 2005.

APÊNDICE A – Técnicas aplicadas para induzir a convergência da solução

A.1 Solução 1: Seção de choque de fissão na fonte do sistema

Com o intuito de testar se as recursões da Decomposição convergem, realizou-se uma pequena alteração nas matrizes $\mathbf{W}_0^{[l]}$ e $\mathbf{W}_1^{[l]}$: o termo que representa as contribuições por fissão para o grupo rápido foi transferido para a fonte. Desta maneira, não altera-se a ideia original da tese de desacoplar as equações com diferentes escalas de tempo, contornando a rigidez. Então, as novas matrizes ficam assim definidas:

$$\mathbf{W}_{0\text{new}}^{[l]} = \begin{bmatrix} -\Sigma_{r1}^{[l]}v_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Sigma_{a2}^{[l]}v_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\lambda_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_6 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.1})$$

$$\mathbf{W}_{1\text{new}}^{[l]} = \begin{bmatrix} (1-\beta)\nu_1\Sigma_{f1}^{[l]}v_1 & (1-\beta)\nu_2\Sigma_{f2}^{[l]}v_1 & \lambda_1v_1 & \lambda_2v_1 & \lambda_3v_1 & \lambda_4v_1 & \lambda_5v_1 & \lambda_6v_1 \\ \Sigma_{s12}^{[l]}v_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_1\nu_1\Sigma_{f1}^{[l]} & \beta_1\nu_2\Sigma_{f2}^{[l]} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_2\nu_1\Sigma_{f1}^{[l]} & \beta_2\nu_2\Sigma_{f2}^{[l]} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_3\nu_1\Sigma_{f1}^{[l]} & \beta_3\nu_2\Sigma_{f2}^{[l]} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_4\nu_1\Sigma_{f1}^{[l]} & \beta_4\nu_2\Sigma_{f2}^{[l]} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_5\nu_1\Sigma_{f1}^{[l]} & \beta_5\nu_2\Sigma_{f2}^{[l]} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \beta_6\nu_1\Sigma_{f1}^{[l]} & \beta_6\nu_2\Sigma_{f2}^{[l]} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.2})$$

Com esta nova configuração, a Figura A.1 mostra a solução para o fluxo rápido com $J = 100$ recursões, para $t = 4$ s. A Figura A.2 mostra a evolução das recursões para os coeficientes constante, linear e quadrático, respectivamente, na posição $x = 1$ cm (equivalente a célula 20, pois $l = 1/(2\Delta x)$). Pode-se perceber que a solução não converge, tende a crescer com o aumento das recursões. Os números de condicionamento das matrizes se mantêm aproximadamente os mesmos, no entanto a solução diverge para

um valor menor nas interfaces comparada às anteriores.

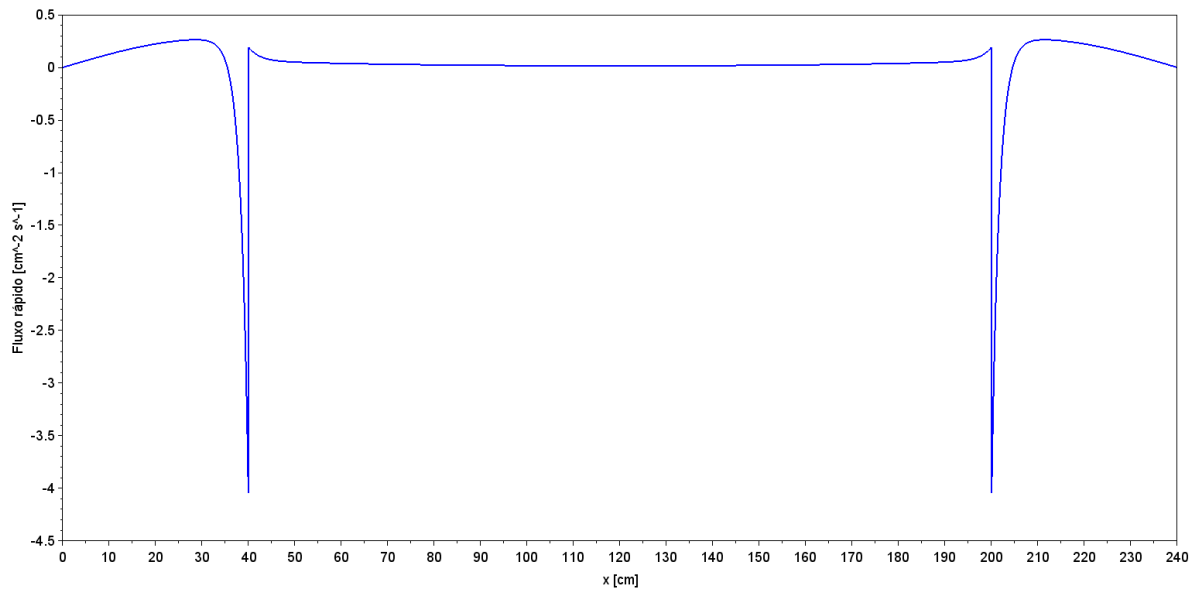
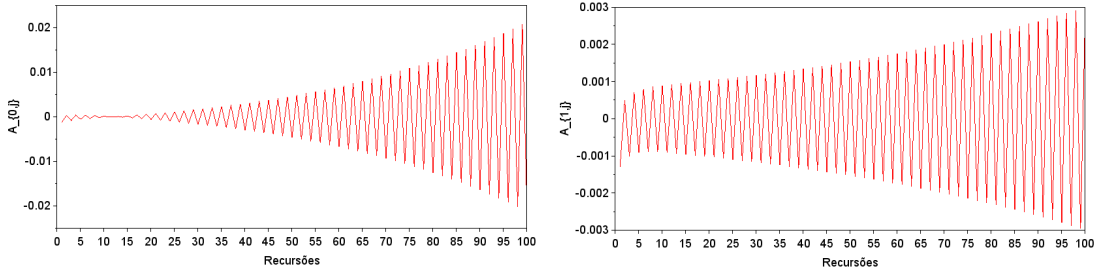
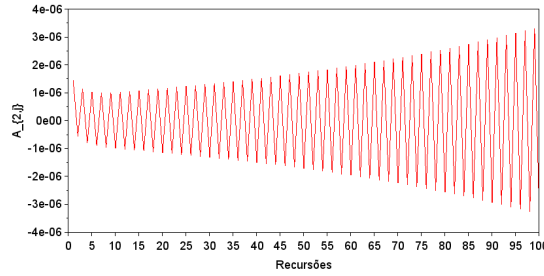


Figura A.1 – Comportamento do fluxo rápido com a configuração definida nas Equações A.1 e A.2 com $J = 100$ recursões, para $t = 4$ s.



(a) Coeficiente constante.

(b) Coeficiente linear.



(c) Coeficiente quadrático.

Figura A.2 – Contribuição dos coeficientes constante, linear e quadrático do fluxo rápido, respectivamente, com a configuração definida nas Equações A.1 e A.2, para $t = 4$ s e na posição $x = 1$ cm.

A.2 Solução 2: Transformação nas unidades de medida

Como trabalha-se com os elementos das matrizes de valores grandes, pensou-se em fazer uma transformação nas unidades do tempo para diminuí-los. Para a matriz $\mathbf{W}_0^{[l]}$, ao converter de segundos para centésimos de segundos, aplica-se a seguinte transformação em cada elemento da matriz:

$$\mathbf{W}_0^{[l]} = \begin{bmatrix} \left[\frac{1}{100cs}\right] & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \left[\frac{1}{100cs}\right] & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \left[\frac{1}{100cs}\right] & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \left[\frac{1}{100cs}\right] & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \left[\frac{1}{100cs}\right] & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \left[\frac{1}{100cs}\right] & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \left[\frac{1}{100cs}\right] & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \left[\frac{1}{100cs}\right] \end{bmatrix}. \quad (\text{A.3})$$

No entanto, para a matriz $\mathbf{W}_0^{[l]}$ não se obtêm benefícios com esta transformação, pois a exponencial da matriz multiplica por t no argumento ($\exp(\mathbf{W}_0^{[l]}t)$) e as unidades se simplificam. Porém, para a matriz $\mathbf{W}_1^{[l]}$ e a fonte das fugas, as duas primeiras linhas ficam divididas por um fator de 100 e 10000, e isso poderia ajudar na convergência por atualizar as recursões com valores menores.

$$\mathbf{W}_1^{[l]} = \begin{bmatrix} \left[\frac{1}{100cs} \right] & \left[\frac{1}{100cs} \right] & \left[\frac{1}{100cs} \frac{cm}{100cs} \right] & \left[\frac{1}{100cs} \frac{cm}{100cs} \right] & \left[\frac{1}{100cs} \frac{cm}{100cs} \right] \\ \left[\frac{1}{100cs} \right] & \left[\frac{1}{100cs} \right] & 0 & 0 & 0 \\ \left[\frac{1}{100cs} \right] & \left[\frac{1}{100cs} \right] & 0 & 0 & 0 \\ \left[\frac{1}{100cs} \right] & \left[\frac{1}{100cs} \right] & 0 & 0 & 0 \\ \left[\frac{1}{100cs} \right] & \left[\frac{1}{100cs} \right] & 0 & 0 & 0 \\ \left[\frac{1}{100cs} \right] & \left[\frac{1}{100cs} \right] & 0 & 0 & 0 \\ \left[\frac{1}{100cs} \right] & \left[\frac{1}{100cs} \right] & 0 & 0 & 0 \\ \left[\frac{1}{100cs} \right] & \left[\frac{1}{100cs} \right] & 0 & 0 & 0 \\ \left[\frac{1}{100cs} \frac{cm}{100cs} \right] & \left[\frac{1}{100cs} \frac{cm}{100cs} \right] & \left[\frac{1}{100cs} \frac{cm}{100cs} \right] & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.4})$$

Com esta modificação, contudo, os gráficos obtidos para o fluxo rápido e as recursões dos coeficientes são os mesmos das Figuras A.1 e A.2, indicando que não há a necessidade de realizar as transformações de unidades.

A.3 Solução 3: Relaxamento da matriz dos coeficientes

Com o intuito de não zerar as duas primeiras linhas da exponencial da matriz, fez-se um relaxamento na matriz $\mathbf{W}_0^{[l]}$, dividindo as duas primeiras linhas por uma determinada velocidade de nêutrons e colocando na fonte do sistema a compensação do balanço. A

nova matriz $\mathbf{W}_0^{[l]}$ fica assim definida:

$$\mathbf{W}_{0\text{relax}}^{[l]} = \begin{bmatrix} -\Sigma_{r1}^{[l]}/v_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -\Sigma_{a2}^{[l]}/v_0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\lambda_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -\lambda_2 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_3 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_5 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -\lambda_6 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.5})$$

e insere-se na matriz $\mathbf{W}_1^{[l]}$ os termos que conservam a igualdade:

$$\mathbf{W}_{1\text{relax}}^{[l]} = \begin{bmatrix} -\Sigma_{r1}^{[l]}(-v_0 + v_1) + (1 - \beta)\nu_1\Sigma_{f1}^{[l]}v_1 & (1 - \beta)\nu_2\Sigma_{f2}^{[l]}v_1 & \lambda_1v_1 \\ \Sigma_{s12}^{[l]}v_2 & -\Sigma_{a2}^{[l]}(-v_0 + v_2) & 0 \\ \beta_1\nu_1\Sigma_{f1}^{[l]} & \beta_1\nu_2\Sigma_{f2}^{[l]} & 0 \\ \beta_2\nu_1\Sigma_{f1}^{[l]} & \beta_2\nu_2\Sigma_{f2}^{[l]} & 0 \\ \beta_3\nu_1\Sigma_{f1}^{[l]} & \beta_3\nu_2\Sigma_{f2}^{[l]} & 0 \\ \beta_4\nu_1\Sigma_{f1}^{[l]} & \beta_4\nu_2\Sigma_{f2}^{[l]} & 0 \\ \beta_5\nu_1\Sigma_{f1}^{[l]} & \beta_5\nu_2\Sigma_{f2}^{[l]} & 0 \\ \beta_6\nu_1\Sigma_{f1}^{[l]} & \beta_6\nu_2\Sigma_{f2}^{[l]} & 0 \\ \lambda_2v_1 & \lambda_3v_1 & \lambda_4v_1 & \lambda_5v_1 & \lambda_6v_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}. \quad (\text{A.6})$$

onde v_0 é uma constante com unidades de velocidade [cm/s].

Cabe lembrar que ao modificar a estrutura das matrizes, não desacopla-se mais as equações com diferentes escalas de tempo. A Figura A.3 mostra o resultado para o fluxo rápido para $t = 4$ s com $J = 10$ recursões e a Figura A.4 mostra as contribuições das recur-

sões para os coeficientes constante, linear e quadrático, respectivamente, do fluxo rápido na posição $x = 1$ cm (equivalente a célula 20, pois $l = 1/(2\Delta x)$). Percebe-se que o fluxo rápido e os coeficientes divergem mais rapidamente que nos casos anteriores. Há muita contribuição a ser corrigida na fonte, o que dificulta a convergência da Decomposição.

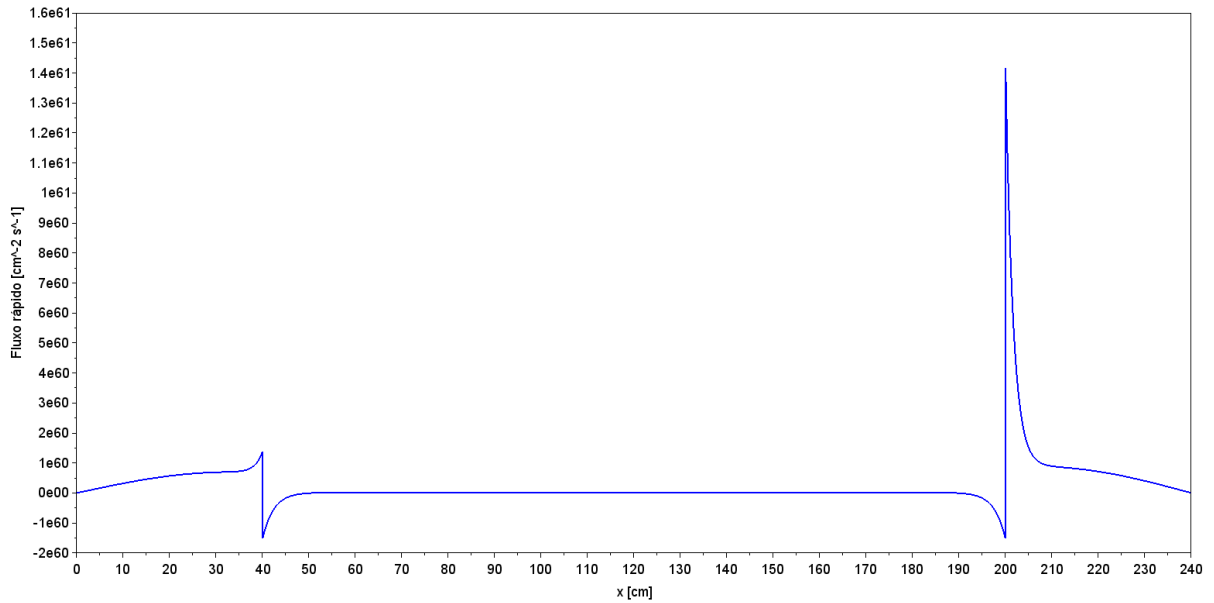


Figura A.3 – Solução para o fluxo rápido com o relaxamento da matriz \mathbf{W}_0 , para $t = 4$ s com $J = 10$ recursões.

--> A0(20,:)'	--> A1(20,:)'	--> A2(20,:)'
ans =	ans =	ans =
0.	0.	0.
366297.2972223479882814	307614.09564248996321112	-345.97310841691455607361
283292938878.61437988281	206911686114.03253173828	-232722025.70480489730835
220328677464846560.	143825168639133376.	-161767989701368.4375
1.706070768472404609D+23	1.010063847739536735D+23	-113607793240178540544.
1.312382310360130150D+29	7.115741575736378482D+28	-8.003499969208661444D+25
1.003020379006703520D+35	5.017653500942133306D+34	-5.643656765515447517D+31
7.621399775649196917D+40	3.539192407832749170D+40	-3.980743027068046857D+37
5.761622871497973559D+46	2.496575072922667699D+46	-2.808048551228107799D+43
4.336252394948292988D+52	1.761149335073181787D+52	-1.980870888823706493D+49
3.250694792673286130D+58	1.242370322934506469D+58	-1.397368845181933554D+55

(a) Coeficiente constante. (b) Coeficiente linear. (c) Coeficiente quadrático.

Figura A.4 – Contribuição de 10 recursões para os coeficientes constante, linear e quadrático do fluxo rápido, respectivamente, com relaxamento da matriz \mathbf{W}_0 , para $t = 4$ s na posição $x = 1$ cm.

A.4 Solução 4: Parcelamento da fonte

Em vista de atrasar a correção feita pelos termos que ficam na fonte das EDO's, divide-se o termo fonte em parcelas que são introduzidas aos poucos nas recursões para compor a solução [Ladeia et al., 2019]. Esse procedimento tem por objetivo introduzir valores de grandeza menor nas recursões corrigindo-as mais lentamente, pois as velocidades dos nêutrons são grandes e geram termos significantes a serem corrigidos nas duas primeiras linhas devido a brusca mudança de parâmetros entre as regiões materiais.

Para compreender como é feito o parcelamento da fonte e como são introduzidas nas recursões, apresenta-se um exemplo com originalmente $J = 4$ termos e o parcelamento da fonte (PF) também 4. Então, o novo número de iterações será $PF \cdot J = 16 = i$. Assim, cada recursão original é multiplicada por um fator $\frac{1}{(PF/2) \cdot J} = \frac{1}{12}$. A Tabela A.1 mostra como são introduzidas as recursões originais parceladas dentro das $i = 16$ iterações.

Cabe destacar que depois de terminar de introduzir as parcelas de determinada recursão, elas continuam a ser corrigidas nas próximas, a Tabela A.1 mostra somente a posição de inserção.

A Figura A.5 mostra a solução para o fluxo térmico com parcelamento da fonte, para o instante $t = 4$ s, com $J = 50$ termos e PF=1, 2, 4, 6, e 10. O parcelamento da fonte igual a um (PF=1) equivale a solução original e o resultado utilizando 50 termos é

Tabela A.1 – Distribuição das J=4 recursões da Decomposição com parcelamento da fonte.

i	j=1	j=2	j=3	j=4
1	⊗			
2	⊗	⊗		
3	⊗	⊗	⊗	
4	⊗	⊗	⊗	⊗
5	⊗	⊗	⊗	⊗
6	⊗	⊗	⊗	⊗
7	⊗	⊗	⊗	⊗
8	⊗	⊗	⊗	⊗
9	⊗	⊗	⊗	⊗
10	⊗	⊗	⊗	⊗
11	⊗	⊗	⊗	⊗
12	⊗	⊗	⊗	⊗
13		⊗	⊗	⊗
14			⊗	⊗
15				⊗
16				

diverso dos gráficos anteriores, pois para cada incremento na recursão da Decomposição, mais a solução diverge (pois ela aumenta ao invés de convergir para zero). À primeira vista, parece que as oscilações na interface estão diminuindo e que a solução aparenta melhorar. Porém, aumentando o parcelamento da fonte gradativamente, verifica-se que na verdade toda a curva está convergindo para zero. A multiplicação das recursões pelo fator $\frac{1}{(PF/2).J}$ torna-as tão pequenas que, pela aritmética computacional, perdem-se informações a serem corrigidas. Cabe destacar que foram testados diferentes valores para o PF, mas todos testes chegam no mesmo resultado.

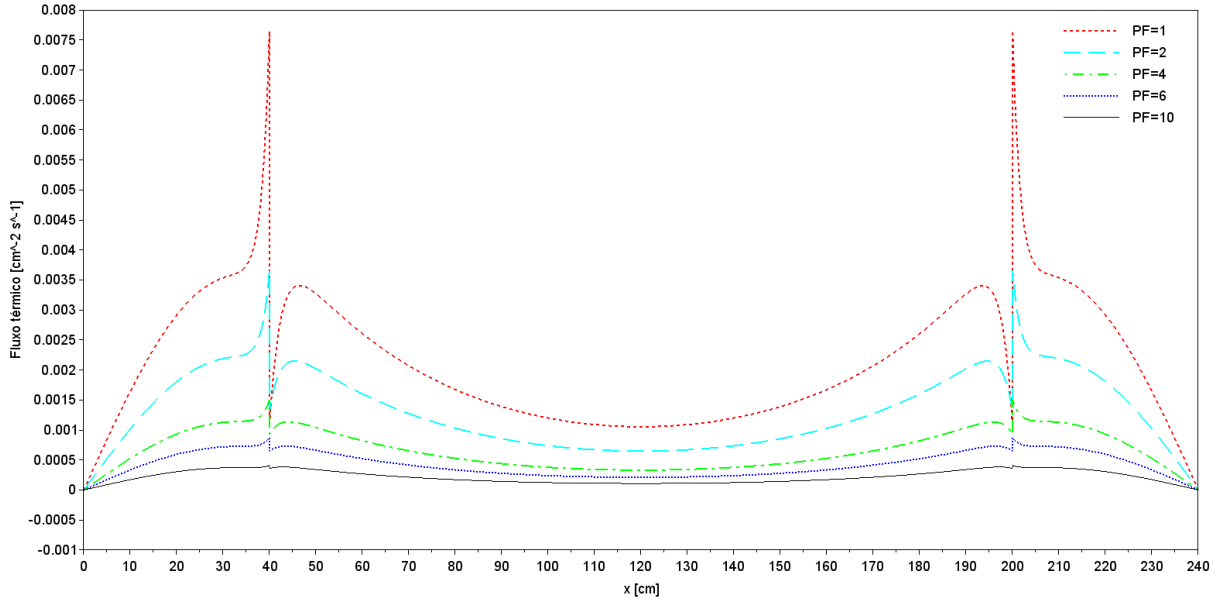


Figura A.5 – Solução para o fluxo térmico com parcelamento da fonte, para o instante $t = 4$ s, com $J = 50$ termos e $PF=1,2,4,6$, e 10.

A.5 Solução 5: Redução a um problema homogêneo corrigido recursivamente para um heterogêneo

Para superar os grandes degraus causados pela diferença dos parâmetros nucleares em materiais diferentes, uma das ideias foi realizar uma homogeneização da placa na recursão de inicialização da Decomposição de Adomian modificado. Para isso, faz-se uma média ponderada dos parâmetros (considerando o tamanho de cada região) e, em seguida, nas recursões posteriores, suas correções são introduzidas conectando à equação com o termo fonte, tornando o problema heterogêneo [Ceolin et al., 2011]. Em outras palavras, reduz-se o problema heterogêneo em um conjunto de problemas com parâmetros constantes em uma placa multirregião. Inclui-se a correção dos parâmetros nucleares como termo fonte nas equações, e as recursões melhoram a solução obtida para uma heterogênea.

Neste procedimento, considera-se o sistema de equações:

$$\frac{d}{dt} \mathbf{X}_{0,j}^{[l]}(t) - \mathbf{W}_0 \mathbf{X}_{0,j}^{[l]}(t) = \mathbf{W}_1(t) \mathbf{X}_{0,j-1}^{[l]}(t) + \mathbf{H}_0^{[l]}(t), \quad (\text{A.7})$$

onde \mathbf{W}_0 e \mathbf{W}_1 foram escritos sem o índice l , pois agora são compostos pelos mesmos parâmetros, mas com a média ponderada de cada um nas 3 regiões, ou seja, são constantes

nos diferentes materiais. O termo fonte correspondente às fugas $\mathbf{S}_j^{[l]}$ também é ponderado, por isso foi incluído no termo $\mathbf{H}_0^{[l]}$, que representa a atualização dos parâmetros heterogêneos. O novo termo fonte $\mathbf{H}_0^{[l]}$ é dado por:

$$\mathbf{H}_0^{[l]}(t) = \begin{bmatrix} Ha_0^{[l]}(t) \\ Hb_0^{[l]}(t) \\ Hc_{i,0}^{[l]}(t) \end{bmatrix}, \quad (\text{A.8})$$

com $i = 1 : 6$, onde:

$$\begin{aligned} Ha_0^{[l]}(t) = & v_1[(H(x - L_4) - H(x - L_3))((D_1^{R_1} - D_1^{R_m})A_{2,j}^{[l]}(t) \\ & - (\Sigma_{r1}^{R_1} - \Sigma_{r1}^{R_m})A_{0,j-1}^{[l]}(t) + (1 - \beta)(\nu_1\Sigma_{f1}^{R_1} - \nu_1\Sigma_{f1}^{R_m})A_{0,j-1}^{[l]}(t) \\ & + (1 - \beta)(\nu_2\Sigma_{f2}^{R_1} - \nu_2\Sigma_{f2}^{R_m})B_{0,j-1}^{[l]}(t)) \\ & + (H(x - L_3) - H(x - L_2))((D_1^{R_2} - D_1^{R_m})A_{2,j}^{[l]}(t) \\ & - (\Sigma_{r1}^{R_2} - \Sigma_{r1}^{R_m})A_{0,j-1}^{[l]}(t) + (1 - \beta)(\nu_1\Sigma_{f1}^{R_2} - \nu_1\Sigma_{f1}^{R_m})A_{0,j-1}^{[l]}(t) \\ & + (1 - \beta)(\nu_2\Sigma_{f2}^{R_2} - \nu_2\Sigma_{f2}^{R_m})B_{0,j-1}^{[l]}(t)) \\ & + (H(x - L_2) - H(x - L_1))((D_1^{R_3} - D_1^{R_m})A_{2,j}^{[l]}(t) \\ & - (\Sigma_{r1}^{R_3} - \Sigma_{r1}^{R_m})A_{0,j-1}^{[l]}(t) + (1 - \beta)(\nu_1\Sigma_{f1}^{R_3} - \nu_1\Sigma_{f1}^{R_m})A_{0,j-1}^{[l]}(t) \\ & + (1 - \beta)(\nu_2\Sigma_{f2}^{R_3} - \nu_2\Sigma_{f2}^{R_m})B_{0,j-1}^{[l]}(t))], \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

$$\begin{aligned} Hb_0^{[l]}(t) = & v_2[(H(x - L_4) - H(x - L_3))((D_2^{R_1} - D_2^{R_m})B_{2,j}^{[l]}(t) \\ & - (\Sigma_{a2}^{R_1} - \Sigma_{a2}^{R_m})B_{0,j-1}^{[l]}(t) + (\Sigma_{s12}^{R_1} - \Sigma_{s12}^{R_m})A_{0,j-1}^{[l]}(t)) \\ & + (H(x - L_3) - H(x - L_2))((D_2^{R_2} - D_2^{R_m})B_{2,j}^{[l]}(t) \\ & - (\Sigma_{a2}^{R_2} - \Sigma_{a2}^{R_m})B_{0,j-1}^{[l]}(t) + (\Sigma_{s12}^{R_2} - \Sigma_{s12}^{R_m})A_{0,j-1}^{[l]}(t)) \\ & + (H(x - L_2) - H(x - L_1))((D_2^{R_3} - D_2^{R_m})B_{2,j}^{[l]}(t) \\ & - (\Sigma_{a2}^{R_3} - \Sigma_{a2}^{R_m})B_{0,j-1}^{[l]}(t) + (\Sigma_{s12}^{R_3} - \Sigma_{s12}^{R_m})A_{0,j-1}^{[l]}(t))], \end{aligned} \quad (\text{A.10})$$

$$\begin{aligned} Hc_{i,0}^{[l]}(t) = & [(H(x - L_4) - H(x - L_3))((\beta_i)(\nu_1\Sigma_{f1}^{R_1} - \nu_1\Sigma_{f1}^{R_m})A_{0,j-1}^{[l]}(t) \\ & + (\beta_i)(\nu_2\Sigma_{f2}^{R_1} - \nu_2\Sigma_{f2}^{R_m})B_{0,j-1}^{[l]}(t)) \\ & + (H(x - L_3) - H(x - L_2))((\beta_i)(\nu_1\Sigma_{f1}^{R_2} - \nu_1\Sigma_{f1}^{R_m})A_{0,j-1}^{[l]}(t) \\ & + (\beta_i)(\nu_2\Sigma_{f2}^{R_2} - \nu_2\Sigma_{f2}^{R_m})B_{0,j-1}^{[l]}(t)) \\ & + (H(x - L_2) - H(x - L_1))((\beta_i)(\nu_1\Sigma_{f1}^{R_3} - \nu_1\Sigma_{f1}^{R_m})A_{0,j-1}^{[l]}(t) \\ & + (\beta_i)(\nu_2\Sigma_{f2}^{R_3} - \nu_2\Sigma_{f2}^{R_m})B_{0,j-1}^{[l]}(t))], \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

onde os índices R_1, R_2, R_3 e R_m representam as regiões 1, 2, 3 e com parâmetros mé-

dios ponderados, respectivamente; H denota a função Heaviside; L_4, L_3, L_2 e L_1 são as fronteiras de cada região, conforme Figura A.6.

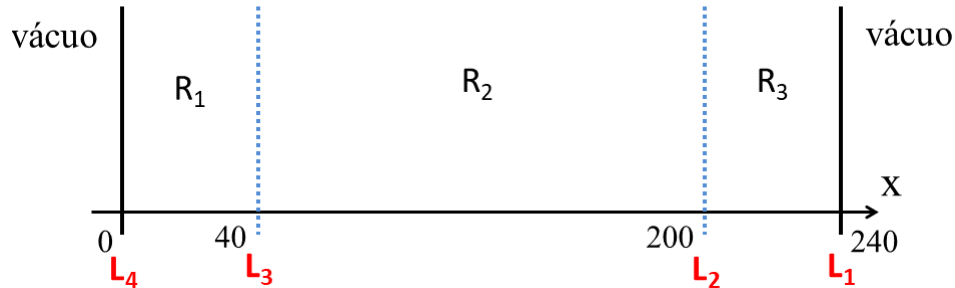


Figura A.6 – Fronteiras L_4, L_3, L_2 e L_1 referentes à função Heaviside.

Cabe destacar que como anteriormente, na recursão de inicialização, considera-se como condição inicial a solução do problema estacionário, e o resultado é dado somente pela placa com parâmetros médios ponderados, e as recursões seguintes corrigem o problema com a atualização dos parâmetros heterogêneos, tornando-o multirregião. Salienta-se também que com esse procedimento, continua-se a contornar a rigidez do problema, pois mantém-se o desacoplamento das escalas de tempo nas matrizes $\mathbf{W}_0^{[l]}$ e $\mathbf{W}_1^{[l]}$ como previamente.

A Figura A.7 exhibe o resultado para o fluxo rápido com a solução reduzida à um problema homogêneo, corrigido recursivamente para um heterogêneo, para o instante $t = 4$ s e com $J = 100$ (Figura A.7a) e $J = 200$ termos (Figura A.7b). Já a Figura A.8 apresenta a contribuição de cada recursão do Método da Decomposição modificado para os coeficientes do fluxo rápido, no mesmo instante, com $J = 200$ termos e na posição $x = 1$ cm. Porém, pelos resultados obtidos percebeu-se que conforme as recursões aumentam, as contribuições crescem sem controle e a solução diverge. No entanto, as oscilações nas trocas de interface não se pronunciam como anteriormente, apesar das recursões dos coeficientes não tenderem à zero como desejado.

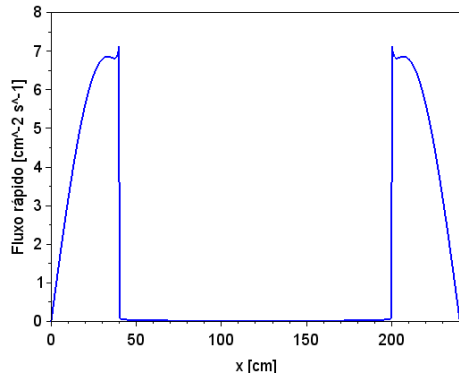
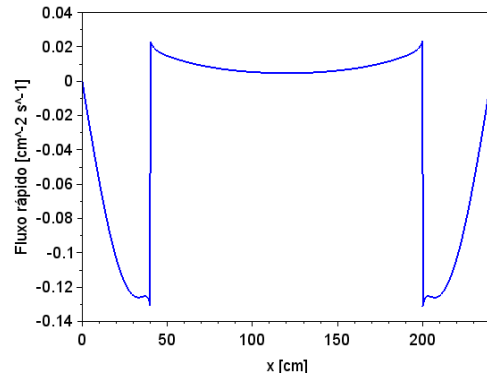
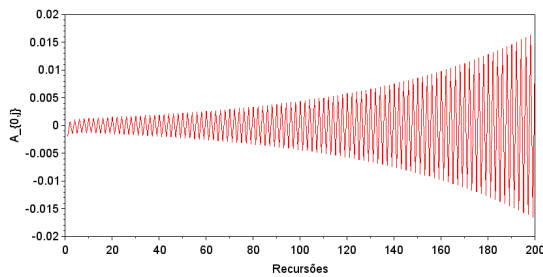
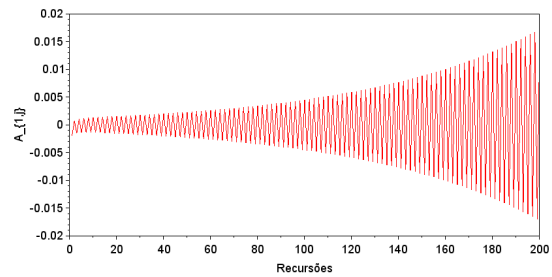
(a) $J = 100$ recursões(b) $J = 200$ recursões.

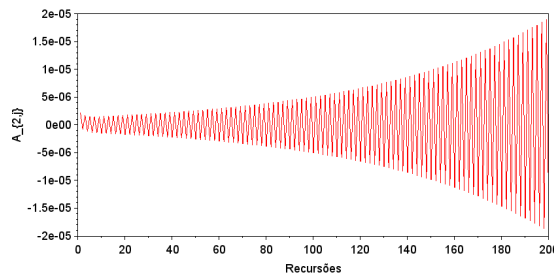
Figura A.7 – Comportamento do fluxo rápido com a solução reduzida à um problema homogêneo, corrigido recursivamente para um heterogêneo, para o instante $t = 4$ s e com $J = 100$ e $J = 200$ termos.



(a) Coeficiente constante.



(b) Coeficiente linear.



(c) Coeficiente quadrático.

Figura A.8 – Contribuição de cada recursão do Método da Decomposição modificado para os coeficientes do fluxo rápido com a solução reduzida à um problema homogêneo, corrigido recursivamente para um heterogêneo, para o instante $t = 4$ s, com $J = 200$ termos e na posição $x = 1$ cm.

A.6 Solução 6: Truncamento da série de Taylor

Em relação aos coeficientes de expansão das séries, o truncamento da série de Taylor no espaço em três termos traz a consequência de se perder contribuições para a solução. O truncamento na ordem quadrática gera três sistemas recursivos instantâneos de equações diferenciais ordinárias: no primeiro (para $n = 0$) há ligação entre os coeficientes de índice 0 e 2 (na fonte); o segundo para $n = 1$ é homogêneo, ficando com a fonte igual a zero (pois A_3 e B_3 são nulos); no terceiro, para $n = 2$, tem-se uma EDO homogênea também (ver Equação 3.25). Isto significa que conserva-se a paridade par da solução, pois em nenhum dos sistemas ocorre a ligação dos coeficientes para $n = 1$ com os demais. Portanto, observa-se que falta uma conexão dos coeficientes com $n = 1$ com os demais coeficientes que compõem a solução. Essa desconectividade pode causar um salto entre uma região e outra, causando uma descontinuidade da solução. Vale ressaltar que mesmo com ordens mais altas de truncamento, sempre existirão coeficientes que ficarão desconexos. Via equação diferencial, sabe-se que os coeficientes estão ligados entre si, porém as expansões tanto por Taylor, como por Decomposição, podem não conservar esta conexão. Outra questão, em relação ao truncamento, é que quando trunca-se a série de Taylor no espaço e depois aplica-se o Método da Decomposição para resolver a variável temporal, leva-se um espaço incompleto para a parte temporal, e como espaço-tempo são acoplados, a parte incompleta pode se manifestar na solução. De fato, como já foi mencionado, segundo Ceolin et al., 2014; Tumelero, 2015; Schramm, 2016 termos com ordens mais elevadas não contribuem significativamente para a melhora da solução. Cabe destacar que as equações referentes aos precursores de nêutrons atrasados não possuem nenhuma ligação dos coeficientes para $n = 0, 1$ e 2 , porém isso não é necessário, pois elas dependem diretamente do fluxo rápido e térmico.

A Figura A.9 mostra o gráfico do comportamento do fluxo rápido utilizando aproximação cúbica para a série de Taylor com $J = 100$ recursões e $t = 4$ s. Na Figura A.10, pode-se visualizar a contribuição dos coeficientes constante, linear, quadrático e cúbico, respectivamente, para a solução do fluxo rápido, para $t = 4$ s e na posição $x = 1$ cm. Comparando o resultado da aproximação cúbica (Figura A.9) com a quadrática (Figura A.1), percebe-se que a ordem da expansão não ocasiona melhoras na solução, pelo contrário, mais erros de aritmética computacional se acumularam nas trocas de interface, onde para a aproximação quadrática era de ≈ -4 nas posições $x = 40$ e 200 cm, na cúbica resultou

em $\approx -5,8$. Além disso, observa-se nos gráficos dos coeficientes que as contribuições não convergem para zero com o crescer das recursões.

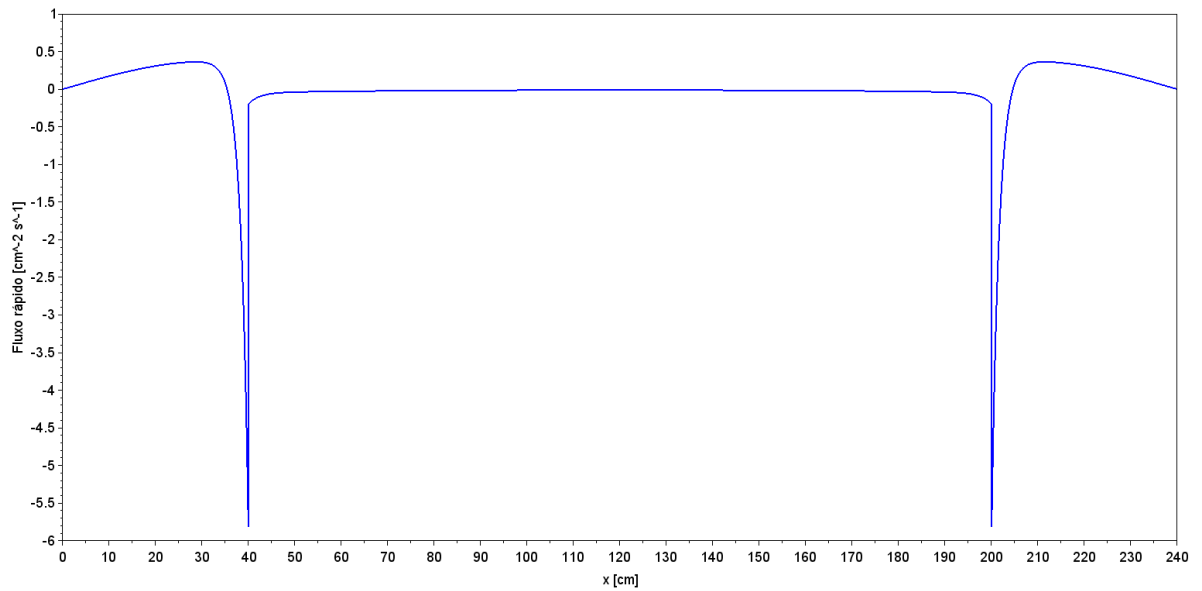


Figura A.9 – Solução para o fluxo rápido utilizando aproximação cúbica para a série de Taylor com $J = 100$ recursões, para $t = 4$ s.

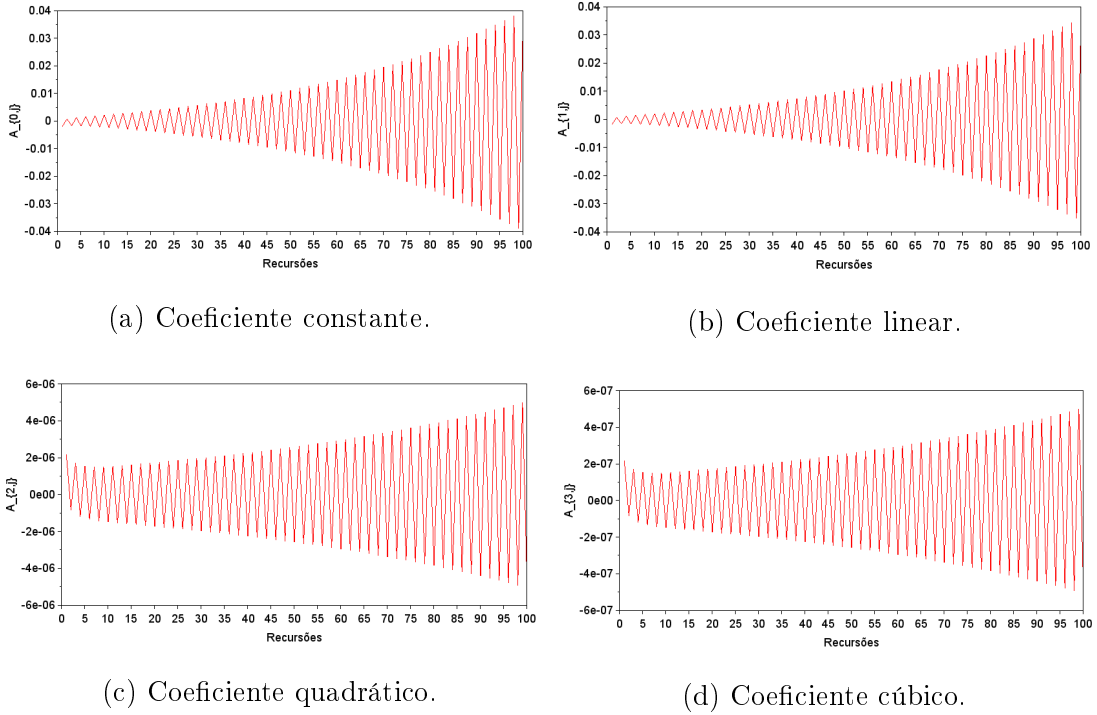


Figura A.10 – Solução para os coeficientes constante, linear, quadrático e cúbico, respectivamente, do fluxo rápido utilizando aproximação cúbica para a série de Taylor, para $t = 4$ s e na posição $x = 1$ cm.

A.7 Solução 7: Separação dos fluxos e precursores nas equações

Está claro que a sensibilidade do problema acerca dos parâmetros é principalmente causada pelos grandes valores das velocidades de nêutrons nas equações referentes ao fluxo. Uma pequena variação entre uma região e outra, multiplicada pelas velocidades, pode fazer com que as recursões tomem a direção errada e diverjam. As equações referentes aos precursores de nêutrons atrasados são relativamente fáceis de se lidar computacionalmente, apesar de dependerem diretamente dos fluxos, mas não apresentam esse problema tão pronunciado.

Para separar fluxos e concentrações de precursores, com o intuito de corrigir as suas respectivas recursões separadamente, pode-se construir dois sistemas de EDO's da seguinte maneira:

$$\begin{aligned}
 \frac{d}{dt} \mathbf{B}_{0,j}^{[l]}(t) - \mathbf{G}^{[l]} \mathbf{B}_{0,j}^{[l]}(t) &= \mathbf{V}_{0,j-1}^{[l]}(t) + \mathbf{S}_j^{[l]}(t), \\
 \frac{d}{dt} \mathbf{C}_{i,n,j}^{[l]}(t) &= -\lambda_i \mathbf{C}_{i,n,j}^{[l]}(t) + \beta_i \nu_1 \Sigma_{f1}^{[l]} A_{0,j}(t) + \beta_i \nu_2 \Sigma_{f2}^{[l]} B_{0,j}(t),
 \end{aligned}
 \tag{A.12}$$

onde $\mathbf{B}_{0,j}^{[l]}(t)$ é o vetor que contém os coeficientes da série de Taylor para o fluxo rápido e térmico ($A_{0,j}(t)$ e $B_{0,j}(t)$) e:

$$\mathbf{G}^{[l]} = \begin{bmatrix} -\Sigma_{r1}^{[l]}v_1 & 0 \\ 0 & -\Sigma_{a2}^{[l]}v_2 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.13})$$

$$\mathbf{V}_{0,j-1}^{[l]}(t) = \mathbf{K}^{[l]}\mathbf{B}_{0,j-1}^{[l]}(t) + \mathbf{O}^{[l]}\mathbf{C}_{0,j-1}^{[l]}(t), \quad (\text{A.14})$$

onde:

$$\mathbf{K}^{[l]} = \begin{bmatrix} (1-\beta)\nu_1\Sigma_{f1}^{[l]}v_1 & (1-\beta)\nu_2\Sigma_{f2}^{[l]}v_1 \\ \Sigma_{s12}^{[l]}v_2 & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.15})$$

$$\mathbf{O}^{[l]} = \begin{bmatrix} \lambda_1v_1 & \lambda_2v_1 & \lambda_3v_1 & \lambda_4v_1 & \lambda_5v_1 & \lambda_6v_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.16})$$

$$\mathbf{S}_j^{[l]}(t) = \begin{bmatrix} 2D_1^{[l]}v_1A_{2,j}(t) \\ 2D_2^{[l]}v_2B_{2,j}(t) \end{bmatrix}, \quad (\text{A.17})$$

Com esta estrutura, resolvem-se os fluxos com o sistema de EDO's definido na Equação A.12, aplicando a condição inicial do problema estacionário na recursão de inicialização como era feito até então e, em seguida, atualizam-se as concentrações de precursores de nêutrons atrasados. Nas próximas recursões, primeiro corrigem-se os fluxos e depois atualizam-se as concentrações de precursores com a condição inicial nula até a j -ésima recursão da Decomposição.

A Figura A.11 mostra a solução para o fluxo rápido com $J = 100$ recursões, para $t = 4$ s. A Figura A.12 mostra a evolução das recursões para os coeficientes constante, linear e quadrático, respectivamente, do fluxo rápido na posição $x = 1$ cm. Nota-se que o comportamento da contribuição das recursões dos coeficientes é diferente do que os casos anteriores, mas continua a divergir.

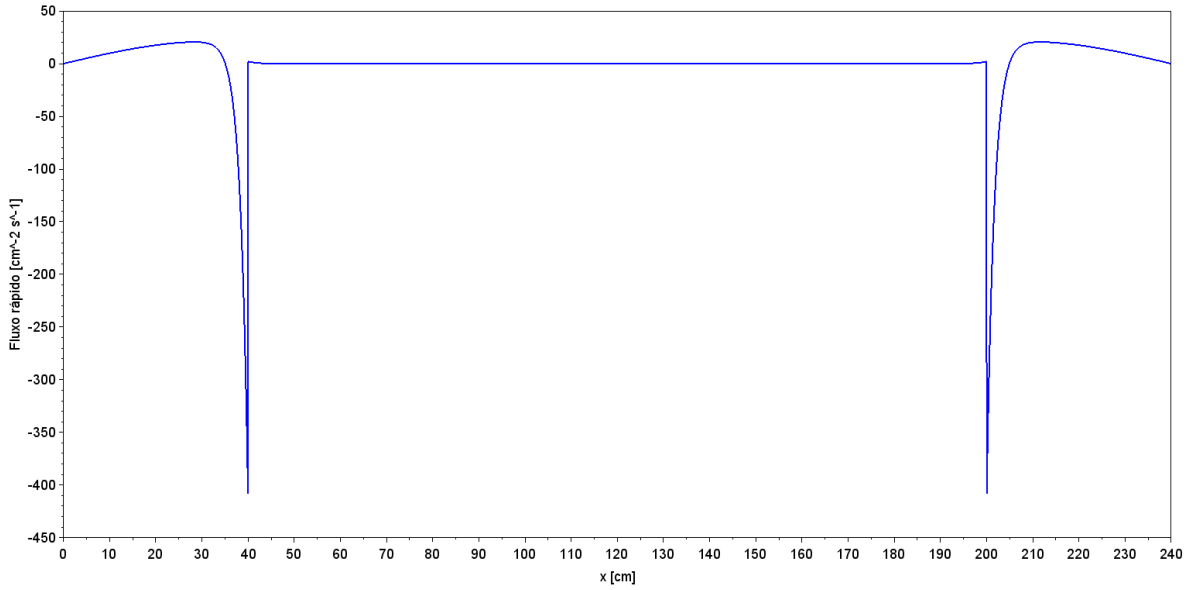
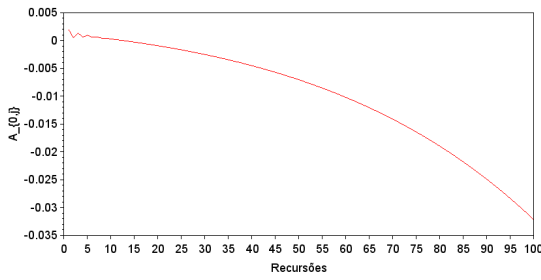
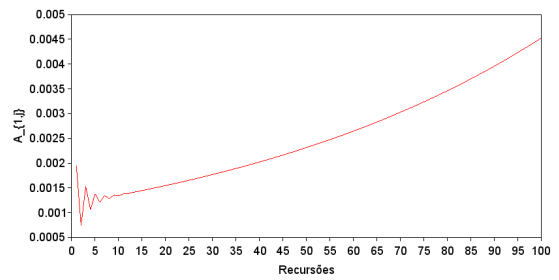


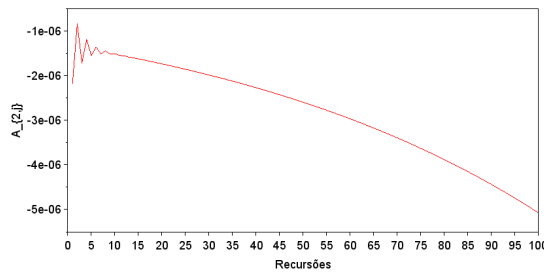
Figura A.11 – Solução para o fluxo rápido com a configuração definida na Equação A.12 com $J = 100$ recursões, para $t = 4$ s.



(a) Coeficiente constante.



(b) Coeficiente linear.



(c) Coeficiente quadrático.

Figura A.12 – Contribuição dos coeficientes constante, linear e quadrático, respectivamente, para o fluxo rápido com a configuração definida na Equação A.12, para $t = 4$ s na posição $x = 1$ cm.

A.8 Solução 8: Parametrização com funções racionais

Uma maneira de facilitar os cálculos da integral presente na Equação 4.48 é reescrever o integrando através de uma parametrização em funções racionais, pois assim cada recursão continua a carregar a dependência do tempo das precedentes e pode melhorar a convergência da integral. Para isso, pode-se utilizar aproximantes de Padé para construir funções que descrevem o integrando. Por exemplo, para determinar a recursão 3 (4º termo) analiticamente deve-se resolver:

$$\begin{aligned} \mathbf{X}_{0,3}^{[l]}(t) = \exp(\mathbf{W}_0^{[l]}t) * \{ \mathbf{W}_1^{[l]}(t) \{ \exp(\mathbf{W}_0^{[l]}t) * [\mathbf{W}_1^{[l]}(t) [\exp(\mathbf{W}_0^{[l]}t) * [\mathbf{W}_1^{[l]}(t) \\ [\exp(\mathbf{W}_0^{[l]}t) \mathbf{X}_0^{[l]}(0) + \exp(\mathbf{W}_0^{[l]}t) * \mathbf{S}_0^{[l]}(t)] + \mathbf{S}_1^{[l]}(t)] + \mathbf{S}_2^{[l]}(t)] + \mathbf{S}_3^{[l]}(t) \} \}. \end{aligned} \quad (\text{A.18})$$

Deste modo, através de funções racionais para descrever o integrando a partir da recursão 1, pode-se escrever genericamente uma expressão mais simples para resolução em cada recursão da Decomposição.

Para este fim, inicia-se considerando uma expansão do tipo [Navarro et al., 1999]:

$$\mathbf{R}(t) = \sum_{n=0}^N \mathbf{R}_n t^n, \quad (\text{A.19})$$

onde N não é necessariamente finito. Os aproximantes de Padé associados com a Equação A.19 são racionais, ou seja, quocientes de dois polinômios, que representam a expansão e são caracterizados por dois inteiros positivos L e M , graus do numerador e denominador da função racional (representados por $[L/M]_{\mathbf{R}(t)}$), respectivamente.

Então, o aproximante de Padé $[L/M]$ é definido por:

$$[L/M] = \frac{\mathbf{P}_L(t)}{\mathbf{Q}_M(t)}, \quad L, M \geq 0, \quad (\text{A.20})$$

onde $\mathbf{P}_L(t)$ representa o polinômio para o numerador e $\mathbf{Q}_M(t)$, para o denominador da aproximação de Padé, com:

$$\mathbf{P}_L(t) = \mathbf{p}_0 + \mathbf{p}_1 t + \mathbf{p}_2 t^2 + \dots + \mathbf{p}_L t^L \quad (\text{A.21})$$

e:

$$\mathbf{Q}_M(t) = \mathbf{q}_0 + \mathbf{q}_1 t + \mathbf{q}_2 t^2 + \dots + \mathbf{q}_M t^M. \quad (\text{A.22})$$

Sem perda de generalidade, toma-se q_0 igual a identidade:

$$\mathbf{Q}_M(t) = 1 + \mathbf{q}_1 t + \mathbf{q}_2 t^2 + \dots + \mathbf{q}_M t^M. \quad (\text{A.23})$$

Os coeficientes \mathbf{p}_l e \mathbf{q}_m das Equações A.21 e A.23, respectivamente, são determinados a partir de \mathbf{R}_n na Equação A.19 através da condição:

$$\mathbf{R}(t) - \frac{\mathbf{P}_L(t)}{\mathbf{Q}_M(t)} = O(t^{L+M+1}), \quad (\text{A.24})$$

que garante que $\mathbf{R}(t)$ e o aproximante de Padé diferem apenas por termos da ordem de t^{L+M+1} . A condição da Equação A.24 proporciona um sistema de equações lineares algébricas para os coeficientes \mathbf{p}_l e \mathbf{q}_m em termos dos coeficientes \mathbf{R}_n . Se o sistema obtido admitir solução única, o aproximante de Padé existe e é único. A partir da Equação A.24, escreve-se:

$$\mathbf{P}_L(t) = \mathbf{R}(t)\mathbf{Q}_M(t) + O(t^{L+M+1}), \quad (\text{A.25})$$

ou ainda:

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_0 + \mathbf{p}_1 t + \mathbf{p}_2 t^2 + \dots + \mathbf{p}_L t^L &= (\mathbf{R}_0 + \mathbf{R}_1 t + \mathbf{R}_2 t^2 + \dots)(1 + \mathbf{q}_1 t + \mathbf{q}_2 t^2 + \\ &\dots + \mathbf{q}_M t^M) + O(t^{L+M+1}). \end{aligned} \quad (\text{A.26})$$

Desenvolvendo o lado direito desta expressão e comparando termos de mesma potência de t , encontra-se o seguinte sistema $L + M + 1$ de equações algébricas:

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_0 &= \mathbf{R}_0 \\ \mathbf{p}_1 &= \mathbf{R}_1 + \mathbf{R}_0 \mathbf{q}_1 \\ \mathbf{p}_2 &= \mathbf{R}_2 + \mathbf{R}_1 \mathbf{q}_1 + \mathbf{R}_0 \mathbf{q}_2 \\ &\vdots \\ \mathbf{p}_L &= \mathbf{R}_L + \mathbf{R}_{L-1} \mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{R}_0 \mathbf{q}_L \\ 0 &= \mathbf{R}_{L+1} + \mathbf{R}_L \mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{R}_{L-M+1} \mathbf{q}_M \\ 0 &= \mathbf{R}_{L+2} + \mathbf{R}_{L+1} \mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{R}_{L-M+2} \mathbf{q}_M \\ &\vdots \\ 0 &= \mathbf{R}_{L+M} + \mathbf{R}_{L+M-1} \mathbf{q}_1 + \dots + \mathbf{R}_L \mathbf{q}_M \end{aligned} \quad (\text{A.27})$$

com $\mathbf{R}_n \equiv 0$ se $n < 0$ e $\mathbf{q}_m \equiv 0$ se $m > M$.

O sistema definido na Equação A.27, de $L + M + 1$ equações, determina os coeficientes dos polinômios \mathbf{P}_L e \mathbf{Q}_M em termos dos coeficientes \mathbf{R}_n da expansão original.

Evidentemente, deve-se ter $L + M + 1 \leq N$, limitando as possibilidades para os graus dos polinômios, mas como N não é necessariamente limitado, a família de aproximantes de Padé pode ter infinitos membros. Obs.: se $L = M$ o aproximante correspondente se diz diagonal; se $M = 0$, coincide com a expansão original até o termo $\mathbf{R}_L t^L$.

Para resolver o sistema apresentado na Equação A.27, que determina os coeficientes da função racional, utiliza-se o algoritmo de Levenberg-Marquardt (LM). O método de Levenberg-Marquardt reúne as principais vantagens de dois conhecidos métodos: o Método de Gauss-Newton e do Gradiente. O primeiro possui forte taxa de convergência, mas somente quando está próximo de um mínimo da função custo. No entanto, por utilizar a inversão de matrizes, pode conduzir a matrizes singulares ocasionando a divergência da solução. O segundo possui relativamente baixa taxa de convergência, ou seja, necessitam-se de bastante iterações para se obter a solução desejada. Entretanto, possui uma estabilidade notória, dispensando inversões matriciais. Devido a um parâmetro escalar característico do algoritmo, o Método de Levenberg-Marquardt possui a velocidade do método de Gauss-Newton com a estabilidade do método do Gradiente. Assim, o algoritmo comporta-se estavelmente quando está longe do mínimo (baseando-se na avaliação sucessiva da função custo) como o método do Gradiente e quando se aproxima o parâmetro escalar é modificado, permitindo que o algoritmo se caracterize como o método de Gauss-Newton e acelere rapidamente a convergência em direção ao mínimo da função custo [Chapra e Canalle, 2008].

Para determinar raízes de funções numericamente, o método baseia-se em dados sobre o resíduo quadrático entre a curva de ajuste e os dados medidos e em suas derivadas parciais, com relação a cada uma das constantes a serem estimadas. Deste modo, essas derivadas permitem tanto a estimativa de zeros de funções como também a otimização de funções com o somatório de resíduos quadráticos.

Para compreender como é a construção do algoritmo de Levenberg-Marquardt, inicia-se considerando uma função não linear [França et al., 2009]:

$$\mathcal{F}(\mathbf{Y}) = \mathbf{X}, \quad (\text{A.28})$$

onde $\mathbf{X} \in \mathbb{R}^M$ e $\mathbf{Y} \in \mathbb{R}^N$ são vetores e $M \geq N$. Dada uma estimativa inicial $\hat{\mathbf{Y}}$, o método de Newton a melhora assumindo que $\mathcal{F}(\hat{\mathbf{Y}} + \Delta) = \mathcal{F}(\hat{\mathbf{Y}}) + \mathbf{J}_{\text{ac}}\Delta$, onde \mathbf{J}_{ac} é a matriz Jacobiana e Δ é um vetor com uma pequena variação da estimativa inicial. Assim,

deseja-se encontrar $\hat{\mathbf{Y}}$ que minimiza $\|\boldsymbol{\Upsilon}\|$ que está sujeito à $\hat{\mathbf{X}} = \mathcal{F}(\hat{\mathbf{Y}}) + \boldsymbol{\Upsilon}$. Para isso, minimiza-se:

$$\|\boldsymbol{\Upsilon} - \mathbf{J}_{\text{ac}}\boldsymbol{\Delta}\|, \quad (\text{A.29})$$

que é equivalente a resolver:

$$\mathbf{J}_{\text{ac}}^T \mathbf{J}_{\text{ac}} \boldsymbol{\Delta} = \mathbf{J}_{\text{ac}}^T \boldsymbol{\Upsilon} \quad (\text{A.30})$$

e a solução $\hat{\mathbf{Y}}_r$, melhorada iterativamente, é definida como:

$$\hat{\mathbf{Y}}_r = \hat{\mathbf{Y}} + \boldsymbol{\Delta}. \quad (\text{A.31})$$

Em Levenberg, 1944 apresentou-se uma modificação no método de Newton com a finalidade de acelerar a convergência da solução, introduzindo um parâmetro na Equação A.30:

$$(\mathbf{J}_{\text{ac}}^T \mathbf{J}_{\text{ac}} + \mathbf{I}\xi)\boldsymbol{\Delta} = \mathbf{J}_{\text{ac}}^T \boldsymbol{\Upsilon}, \quad (\text{A.32})$$

em que em cada iteração o parâmetro ξ é alterado.

Em Marquardt, 1963, propôs-se uma alteração no algoritmo de Levenberg devido ao fato de que, com o crescimento do valor de ξ , o algoritmo se tornava instável. Para isso, sugeriu-se que cada componente do gradiente fosse ponderado de acordo com sua curvatura. Deste modo, ocorre uma maior chance de convergência na direção em que o gradiente é menor. Para este efeito, reescreve-se a Equação A.32 como:

$$(\mathbf{J}_{\text{ac}}^T \mathbf{J}_{\text{ac}} + \text{diag}(\mathbf{J}_{\text{ac}}^T \mathbf{J}_{\text{ac}})\xi)\boldsymbol{\Delta} = \mathbf{J}_{\text{ac}}^T \boldsymbol{\Upsilon}, \quad (\text{A.33})$$

conhecida como o algoritmo de Levenberg-Marquardt.

Iniciando a aplicação ao problema da presente tese, relembra-se que a recursão de inicialização da Decomposição é dada por (para o coeficiente constante da série de Taylor $n = 0$):

$$\mathbf{X}_{0,0}^{[l]} = \exp(\mathbf{W}_0^{[l]}t)\mathbf{X}^{[l]}(0) + (\mathbf{W}_0^{[l]})^{-1}(\exp(\mathbf{W}_0^{[l]}t) - \mathbf{I})\mathbf{S}_0^{[l]}, \quad (\text{A.34})$$

e para $j = 1$:

$$\mathbf{X}_{0,1}^{[l]} = \int_0^t \exp(\mathbf{W}_0^{[l]}(t - \tau))(\mathbf{S}_1^{[l]}(\tau) + \mathbf{W}_1^{[l]}\mathbf{X}_{0,1}^{[l]}(\tau))d\tau, \quad (\text{A.35})$$

Substituindo a recursão 0:

$$\mathbf{X}_{0,1}^{[l]} = \int_0^t \exp(\mathbf{W}_0^{[l]}(t - \tau)) [\mathbf{S}_1^{[l]}(\tau) + \mathbf{W}_1^{[l]}(\exp(\mathbf{W}_0^{[l]}\tau)\mathbf{X}^{[l]}(0) + (\mathbf{W}_0^{[l]})^{-1}(\exp(\mathbf{W}_0^{[l]}\tau) - \mathbf{I})\mathbf{S}_0^{[l]})] d\tau. \quad (\text{A.36})$$

Então, na Equação A.36 para $\mathbf{X}_{0,1}$ reescreve-se o integrando através dos aproximantes de Padé:

$$\mathbf{X}_{0,1}^{[l]} = \int_0^t \mathbf{R}(\tau, t) d\tau, \quad (\text{A.37})$$

onde:

$$\mathbf{R}(\tau, t) = \exp(\mathbf{W}_0^{[l]}(t - \tau)) [\mathbf{S}_1^{[l]}(\tau) + \mathbf{W}_1^{[l]}(\exp(\mathbf{W}_0^{[l]}\tau)\mathbf{X}^{[l]}(0) + (\mathbf{W}_0^{[l]})^{-1}(\exp(\mathbf{W}_0^{[l]}\tau) - \mathbf{I})\mathbf{S}_0^{[l]})]. \quad (\text{A.38})$$

Como a multiplicação de matrizes não é comutativa, deve-se multiplicar as matrizes apresentadas na Equação A.38 para aplicar as derivadas posteriormente. Realizando esse procedimento para cada termo da expressão, pode-se escrever genericamente:

$$\mathbf{R}(\tau, t) = \begin{bmatrix} c_1 \exp(c_3\tau) \exp(c_5t) \\ c_2 \exp(c_4\tau) \exp(c_6t) \end{bmatrix}, \quad (\text{A.39})$$

onde os c 's são constantes genéricas advindas da multiplicação dos elementos das matrizes na Equação A.38. Cabe relatar neste ponto, que este procedimento foi realizado somente para os fluxos de nêutrons, as concentrações dos precursores de nêutrons atrasados não necessitam de aproximações por funções racionais, já que suas integrais apresentam bom comportamento.

Primeiramente, parte-se da série de Taylor e quer-se encontrar cada um dos seus coeficientes:

$$\mathbf{R}(\tau, t) = \mathbf{R}(0, t) + \frac{\mathbf{R}'(0, t)\tau}{1!} + \frac{\mathbf{R}''(0, t)\tau^2}{2!} + \dots \quad (\text{A.40})$$

sendo:

$$\mathbf{R}(0, t) = \begin{bmatrix} c_1 \exp(c_5t) \\ c_2 \exp(c_6t) \end{bmatrix}. \quad (\text{A.41})$$

Agora, calculam-se os próximos termos da série de Taylor:

$$\mathbf{R}'(0, t) = \begin{bmatrix} c_1 c_3 \exp(c_5t) \\ c_2 c_4 \exp(c_6t) \end{bmatrix}, \quad (\text{A.42})$$

$$\mathbf{R}''(0, t) = \begin{bmatrix} c_1(c_3)^2 \exp(c_3 t) \\ c_2(c_4)^2 \exp(c_6 t) \end{bmatrix}, \quad (\text{A.43})$$

ou seja:

$$\mathbf{R}^n(0, t) = \begin{bmatrix} c_1(c_3)^n \exp(c_3 t) \\ c_2(c_4)^n \exp(c_6 t) \end{bmatrix}, \quad (\text{A.44})$$

onde $\mathbf{R}^n(0, t)/n! = \mathbf{R}_n$ na Equação A.38.

Em seguida, define-se o aproximante de Padé:

$$[2/3] = \frac{\mathbf{P}_2(\tau)}{\mathbf{Q}_3(\tau)} = \frac{\mathbf{p}_0 + \mathbf{p}_1\tau + \mathbf{p}_2\tau^2}{1 + \mathbf{q}_1\tau + \mathbf{q}_2\tau^2 + \mathbf{q}_3\tau^3}. \quad (\text{A.45})$$

Assim, tem-se a relação:

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_0 + \mathbf{p}_1\tau + \mathbf{p}_2\tau^2 &= (\mathbf{R}_0 + \mathbf{R}_1\tau + \mathbf{R}_2\tau^2 + \mathbf{R}_3\tau^3 + \mathbf{R}_4\tau^4 + \mathbf{R}_5\tau^5) \\ &\cdot (1 + \mathbf{q}_1\tau + \mathbf{q}_2\tau^2 + \mathbf{q}_3\tau^3) + O(\tau^6), \end{aligned} \quad (\text{A.46})$$

ou seja:

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_0 + \mathbf{p}_1\tau + \mathbf{p}_2\tau^2 &= \mathbf{R}_0 + (\mathbf{R}_0\mathbf{q}_1 + \mathbf{R}_1)\tau + (\mathbf{R}_0\mathbf{q}_2 + \mathbf{R}_1\mathbf{q}_1 + \mathbf{R}_2)\tau^2 \\ &+ (\mathbf{R}_0\mathbf{q}_3 + \mathbf{R}_1\mathbf{q}_2 + \mathbf{R}_2\mathbf{q}_1 + \mathbf{R}_3)\tau^3 + (\mathbf{R}_1\mathbf{q}_3 + \mathbf{R}_2\mathbf{q}_2 + \mathbf{R}_3\mathbf{q}_1 + \mathbf{R}_4)\tau^4 \\ &+ (\mathbf{R}_2\mathbf{q}_3 + \mathbf{R}_3\mathbf{q}_2 + \mathbf{R}_4\mathbf{q}_1 + \mathbf{R}_5)\tau^5 + O(\tau^6). \end{aligned} \quad (\text{A.47})$$

Comparando os dois lados da igualdade, isto é, os termos de mesma potência, obtêm-se:

$$\begin{aligned} \mathbf{p}_0 &= \mathbf{R}_0 \\ \mathbf{p}_1 &= \mathbf{R}_0\mathbf{q}_1 + \mathbf{R}_1 \\ \mathbf{p}_2 &= \mathbf{R}_0\mathbf{q}_2 + \mathbf{R}_1\mathbf{q}_1 + \mathbf{R}_2 \\ 0 &= \mathbf{R}_0\mathbf{q}_3 + \mathbf{R}_1\mathbf{q}_2 + \mathbf{R}_2\mathbf{q}_1 + \mathbf{R}_3 \\ 0 &= \mathbf{R}_1\mathbf{q}_3 + \mathbf{R}_2\mathbf{q}_2 + \mathbf{R}_3\mathbf{q}_1 + \mathbf{R}_4 \\ 0 &= \mathbf{R}_2\mathbf{q}_3 + \mathbf{R}_3\mathbf{q}_2 + \mathbf{R}_4\mathbf{q}_1 + \mathbf{R}_5 \end{aligned} \quad (\text{A.48})$$

ou ainda:

$$\begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & \mathbf{R}_0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & \mathbf{R}_1 & \mathbf{R}_0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{R}_2 & \mathbf{R}_1 & \mathbf{R}_0 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{R}_3 & \mathbf{R}_2 & \mathbf{R}_1 \\ 0 & 0 & 0 & \mathbf{R}_4 & \mathbf{R}_3 & \mathbf{R}_2 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{p}_0 \\ \mathbf{p}_1 \\ \mathbf{p}_2 \\ \mathbf{q}_1 \\ \mathbf{q}_2 \\ \mathbf{q}_3 \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{R}_0 \\ \mathbf{R}_1 \\ \mathbf{R}_2 \\ \mathbf{R}_3 \\ \mathbf{R}_4 \\ \mathbf{R}_5 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}, \quad (\text{A.49})$$

onde o sistema acima é resolvido pelo método LM. O software SciLab fornece uma rotina pronta do algoritmo LM chamada “lsqrsolve”. Determinados os coeficientes, basta integrar:

$$\mathbf{X}_{0,1} = \int_0^t \frac{\mathbf{p}_0 + \mathbf{p}_1\tau + \mathbf{p}_2\tau^2}{1 + \mathbf{q}_1\tau + \mathbf{q}_2\tau^2 + \mathbf{q}_3\tau^3} d\tau. \quad (\text{A.50})$$

O próximo passo é calcular a recursão 2, seguindo os mesmos passos descritos para acima. Esse processo se repete até a j -ésima recursão da Decomposição.

Teoricamente, a ideia de aproximar o integrando por polinômios de Padé está bem definida. Porém, ao observar a Equação A.44, todas as derivadas da função do integrando possuem um termo exponencial que computacionalmente retorna o valor zero (ver Figura 4.5), zerando todas derivadas e conseqüentemente elementos da matriz e do vetor no sistema linear apresentado na Equação A.49. Assim, a metodologia não funciona para o caso a ser resolvido.

A.9 Solução 9: Reformulação do conjunto de EDO's

Ainda com o intuito de testar uma solução em que nas recursões da Decomposição não apareçam exponenciais que retornem zeros como solução computacionalmente, pensou-se em modificar a estrutura do sistema de EDO's. Para este fim, reescreve-se o sistema de equações diferenciais ordinárias como:

$$\frac{d}{dt}\mathbf{X}_{0,j}^{[l]} = \mathbf{S}_j^{[l]} + \mathbf{W}^{[l]}\mathbf{X}_{0,j-1}^{[l]}, \quad (\text{A.51})$$

onde $\mathbf{W}^{[l]}(t)$ representa a matriz cheia dos coeficientes das equações originais (para vê-la, vide Equação 3.24). Cabe ressaltar que este teste modifica evidentemente a estrutura da solução, mas mais importante que isso é destacar que, com esse novo padrão, a ideia original de desacoplar as equações com diferentes escalas de tempo, que são corrigidas com os termos fonte, não acontece mais. No entanto, como mostra-se a seguir, esta nova solução inclui apenas a condição inicial (solução estacionária) e as fugas de nêutrons na recursão de inicialização, e nas seguintes corrige-se a solução com o transiente da cinética. Além disso, o objetivo principal é escrever a solução de cada recursão sem as exponenciais que zeram os termos.

Deste modo, a solução da recursão de inicialização, considerando o conjunto de EDO's (Equação A.51), é dada por:

$$\mathbf{X}_{0,0}^{[l]} = \mathbf{X}^{[l]}(0) + \mathbf{S}_0^{[l]}t, \quad (\text{A.52})$$

ou seja, somente a solução do problema estacionário ($\mathbf{X}^{[l]}(0)$, Figura 4.3), mais os efeitos difusivos ($\mathbf{S}_0^{[l]}$). As próximas recursões, admitindo ainda que a seção de choque de absorção do grupo térmico é constante, são definidas como:

$$\mathbf{X}_{0,1}^{[l]} = \mathbf{W}^{[l]}\mathbf{X}^{[l]}(0)t + \mathbf{W}^{[l]}\mathbf{S}_0^{[l]}\frac{t^2}{2} + \mathbf{S}_1^{[l]}t, \quad (\text{A.53})$$

$$\mathbf{X}_{0,2}^{[l]} = (\mathbf{W}^{[l]})^2\mathbf{X}^{[l]}(0)\frac{t^2}{2} + (\mathbf{W}^{[l]})^2\mathbf{S}_0^{[l]}\frac{t^3}{6} + \mathbf{W}^{[l]}\mathbf{S}_1^{[l]}\frac{t^2}{2} + \mathbf{S}_2^{[l]}t, \quad (\text{A.54})$$

ou seja:

$$\mathbf{X}_{0,j}^{[l]} = [(\mathbf{W}^{[l]})^j\mathbf{S}_0^{[l]}\frac{t^{j+1}}{(j+1)!} + [(\mathbf{W}^{[l]})^j\mathbf{X}^{[l]}(0)]\frac{t^j}{(j)!} + (\sum_{i=1}^j (\mathbf{W}^{[l]})^{i-1}\frac{t^i}{i!}\mathbf{S}_{j-i+1}^{[l]})]. \quad (\text{A.55})$$

A Figura A.13 mostra o gráfico para o fluxo térmico com a solução das Equações A.52 e A.55, para o instante $t = 4$ s e $J = 10$ recursões. Percebe-se que a solução tem comportamento ainda pior que nos testes anteriores, inclusive longe das trocas de interface, onde a solução está na ordem de 10^{41} , mas no gráfico não consegue-se identificar visualmente. A Figura A.14 mostra o resultado para 10 recursões da Decomposição para os coeficientes constante, linear e quadrático, respectivamente, do fluxo térmico na posição $x = 1$ cm (equivalente a célula 20, pois $l = 1/(2\Delta x)$). Nota-se que as recursões divergem muito rápido e crescem volumosamente. A causa para esse crescimento acentuado é a matriz $\mathbf{W}^{[l]}$ que contém elementos grandes, que quando elevada nas potências da Equação A.55 diverge a solução rapidamente. Os termos que deveriam controlar essa evolução seriam $t^{j+1}/(j+1)!$ e $t^j/(j)!$, mas não o fazem porque não são pequenos o suficiente. Nesta subseção, apresentou-se a solução para o fluxo térmico pois o fluxo rápido teve resultado ainda pior, sendo difícil a visualização gráfica. Entretanto, este teste demonstra que o desacoplamento das respectivas escalas de tempo utilizando as matrizes \mathbf{W}_0 e \mathbf{W}_1 , ao invés de usar a matriz cheia dos coeficientes \mathbf{W} , facilitam a convergência da solução.

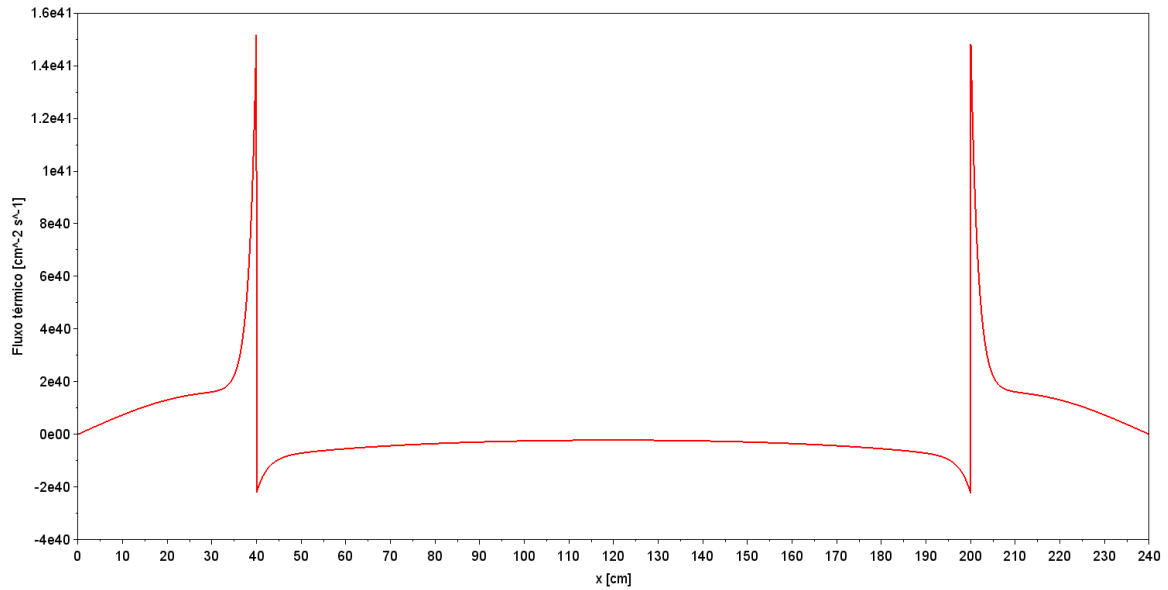


Figura A.13 – Comportamento do fluxo térmico com a solução das Equações A.52 e A.55, para o instante $t = 4$ s e $J = 10$ recursões.

```

--> B0(20, :) '
ans =
    0.
    0.
    15.0660000000000258296495
    6237543.0000000037252903
    -445912998450.00024414062
    24071472026616820.
    -1039500577905679007744.
    3.740707513356264563D+25
    -1.153742815520239992D+30
    3.113236956096562453D+34
    -7.465007379355249959D+38

--> B1(20, :) '
ans =
    0.
    0.
    15.466500000000451109372
    6390004.4999999655410647
    -456768229124.99749755859
    24656934586417844.
    -1064770622462545362944.
    3.831703352968974322D+25
    -1.181900476382486168D+30
    3.189906763330611205D+34
    -7.652838504746019441D+38

--> B2(20, :) '
ans =
    0.
    0.
    -0.031499999999998614442
    -5629.499999999963620212
    401655375.00000143051147
    -21682092646096.57421875
    936306738879916928.
    -33694108347420567928832.
    1.039304952356984491D+27
    -2.805046586353775960D+31
    6.729528514883879856D+35

```

(a) Coeficiente constante. (b) Coeficiente linear. (c) Coeficiente quadrático.

Figura A.14 – Contribuição de 10 recursões para os coeficientes constante, linear e quadrático, respectivamente, do fluxo térmico com a solução das Equações A.52 e A.55, para o instante $t = 4$ s e na posição $x = 1$ cm.