

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA

MÉTODOS NUMÉRICOS PARA A INTEGRAÇÃO
DAS EQUAÇÕES DA CINÉTICA PONTUAL DE
UM REATOR NUCLEAR

Por

SANDRA ELIZA VIELMO COGO

Dissertação submetida ao Curso de Pós-Graduação
em Matemática como requisito parcial para a
obtenção do grau de Mestre

Orientador

Prof. Dr. Julio C. Ruiz Claeysen

Porto Alegre, Setembro de 1990

Dedico este trabalho
ao Marco e Vinícius

AGRADECIMENTO

Aos profs. Julio C. Ruiz Claeysen e Marco Tulio Mena Barreto de Vilhena, pela orientação na elaboração deste trabalho.

AGRADECIMENTOS ESPECIAIS

Agradeço aos meus pais e irmãos, pelo carinho, incentivo e ajuda recebidos.

Ao Prof. Hugo de Souza, pelas correções feitas no texto.

Aos amigos Ausberto e Rosemaira, pela ajuda computacional.

Aos colegas do Mestrado: Elba, Paulo, José Vanderlei, Inês, ... , pela amizade.

RESUMO

As equações da cinética pontual de um reator nuclear térmico são integradas numericamente, utilizando um método matricial de continuação analítica. Estas equações são essencialmente não-negativas e possuem um autovalor dominante vinculado à reatividade do sistema. Também, descrevem-se os métodos de Hansen e Porsching.

ABSTRACT

The point kinetic equations of a thermal nuclear reactor are integrated by a matrix analytic continuation method. These equations are essentially non-negative and they have a dominant eigenvalue which depends upon the reactivity of the system. The methods due to Hansen and Porsching are also described.

SUMÁRIO

	pág.
RESUMO	05
ABSTRACT	05

CAPÍTULO 1

As Equações da Cinética Pontual de um Reator Nuclear	
1.1 - Introdução	07
1.2 - Derivação das Equações da Cinética Pontual	07

CAPÍTULO 2

Aspectos Matriciais das Equações da Cinética Pontual	
2.1 - Introdução	14
2.2 - Formulação Matricial	14
2.3 - Sistemas Matriciais Essencialmente	
Não-Negativos	15
2.3.1- Definições	15
2.3.2- O Teorema de Perron	17
2.3.3- Extensão a Matrizes Não-Negativas	20
2.3.4- Soluções Positivas	21
2.3.5- A Equação "Inhour"	23

CAPÍTULO 3

Métodos Numéricos	
3.1 - Introdução	29
3.2 - Formulação Integral	30
3.3 - Formulação Exponencial	36
3.4 - Formulação Analítica	42
3.5 - Resultados Numéricos	48
APÊNDICE	53
BIBLIOGRAFIA	60

CAPÍTULO 1

As Equações da Cinética Pontual de um Reator Nuclear

1.1 - Introdução

As equações gerais que descrevem o comportamento no tempo de um nêutron num reator nuclear térmico são estabelecidas em termos da teoria de transporte de nêutrons [8], [11]. Por outro lado, o controle do nível de potência num reator nuclear é um problema de engenharia muito importante porém complexo. Matematicamente, este problema é usualmente considerado através da construção de modelos simplificados que simulam aproximadamente os aspectos da realidade física.

1.2 - Derivação das Equações da Cinética Pontual

As equações da cinética pontual podem ser obtidas a partir do seguinte sistema de equações para um grupo de nêutrons térmicos [8]:

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \Phi}{\partial t} = L(\beta) \Phi + \sum_{i=1}^G \lambda_i C_i \quad (1.2.1)$$

$$\frac{\partial C_i}{\partial t} = -\lambda_i C_i + \beta_i \nu \Sigma_f \Phi \quad i=1, \dots, G \quad (1.2.2)$$

onde $L(\beta)$ é o operador diferencial

$$L(\beta) = D\Delta - \Sigma_a + (1-\beta)\nu\Sigma_f \quad (1.2.3)$$

Aqui, Φ é o fluxo de nêutrons,
 v a velocidade dos nêutrons,
 ν o número médio de nêutrons produzidos por fissão,
 D a constante de difusão,
 Σ_a a constante de absorção (seção de choque de absorção),
 Σ_f a constante de fissão (seção de choque de fissão),
 C_i a concentração do i-ésimo grupo emissor de nêutrons atrasados,
 $\beta = \sum_{i=1}^g \beta_i$ a fração total de nêutrons atrasados,
 β_i, λ_i a fração e a constante de decaimento, correspondentes ao i-ésimo grupo.

Nos referiremos a

$$S_f = (1 - \beta)\nu \Sigma_f \Phi + \sum_{i=1}^g \lambda_i C_i$$

como sendo a fonte de nêutrons imediatos devido a fissão e atraso.

No caso estacionário, teremos $\beta=0$ e C_i constante.

As condições iniciais apropriadas para o sistema (1.2.1), (1.2.2), envolvem a especificação do fluxo crítico de nêutrons e concentrações dos grupos atrasados no tempo $t=0$. As condições de contorno para o fluxo são consideradas como de superfície livre, isto é, condições de Dirichlet homogêneas na fronteira do reator.

No regime crítico de funcionamento de um reator, o sistema (1.2.1), (1.2.2) reduz-se à $L(0)\Phi = 0$, isto é, a equação de Helmotz

$$\begin{aligned} \Delta\Phi + B^2\Phi &= 0 && \text{em } \Omega \\ \Phi &= 0 && \text{em } \partial\Omega \end{aligned} \quad (1.2.4)$$

onde

$$B^2 = \frac{\nu\Sigma_f - \Sigma_a}{D}$$

é chamado de " buckling " do material.

Com a introdução do comprimento de difusão de nêutrons

$$L^2 = \frac{D}{\Sigma_a}$$

e da constante de multiplicação infinita $k_\infty = \nu\Sigma_f / \Sigma_a$, relativa ao número de nêutrons produzidos por nêutron absorvido, a equação (1.2.4) é, às vezes, escrita na forma

$$\Delta\Phi + \frac{k_\infty - 1}{L^2} \Phi = 0 \quad (1.2.4)'$$

Como as geometrias usuais para os núcleos dos reatores (barra, cilindro, esfera, etc) possuem simetria, a equação (1.2.4) pode ser resolvida explicitamente por separação de variáveis. De fato, em geral existe um

conjunto ortonormal de autofunções $\Phi_j(x)$, completo no espaço $L^2(\Omega)$, de funções de quadrado integrável, e os autovalores B_j^2 possuem o comportamento assintótico

$$B_j^2 \simeq O(j)$$

em regiões Ω bidimensionais [9].

Para obter as equações da cinética pontual, suponhamos que a solução do sistema (1.2.1), (1.2.2) possa ser expressa na forma

$$\Phi(x, t) = \sum_{j=0}^{\infty} \phi_j(t) \Phi_j(x)$$

$$C_i(x, t) = \sum_{j=0}^{\infty} C_{ij}(t) \Phi_j(x)$$

Substituindo em (1.2.1), (1.2.2), decorre que

$$\frac{1}{v} \frac{d\phi_j}{dt} = -[DB_j^2 + \sum_a - (1-\beta)\nu \sum_r] \phi_j + \sum_{i=1}^G \lambda_i C_{ij}(t) \quad (1.2.5)$$

$$\frac{dC_{ij}}{dt} = \beta_i \nu \sum_r \phi_j(t) - \lambda_i C_{ij}(t) \quad \begin{array}{l} i = 1, \dots, G \\ j = 0, 1, \dots \end{array} \quad (1.2.6)$$

Introduzindo os seguintes parâmetros:

$$K_j = \frac{\nu \Sigma_f / \Sigma_a}{1 + B_j^2 L^2} \quad (1.2.7)$$

$$l_j = \frac{1}{\nu \Sigma_a (1 + B_j^2 L^2)}$$

como sendo o fator multiplicação efetivo e vida média dos nêutrons, respectivamente, e supondo que não tenhamos nêutrons atrasados ($\beta = 0$ e $C_i = 0$) [29], obtemos de (1.2.5) e (1.2.7)

$$\frac{d\phi_j}{dt} = \frac{k_j - 1}{l_j} \phi_j \quad j = 0, 1, 2, \dots \quad (1.2.8)$$

Integrando (1.2.8), obtemos:

$$\phi_j(t) = \phi_j(0) e^{\frac{k_j - 1}{l_j} t}$$

Para um reator típico de água leve, $l_0 = l = 10^{-4}$ seg e $k_0 = k = 1.0020$. Assim,

$$\frac{l_j}{l_0} = \frac{1 + B_0^2 L^2}{1 + B_j^2 L^2} \approx \frac{1}{j^2}$$

de modo que os harmônicos altos decaem rapidamente. Isto sugere considerar uma aproximação para $\Phi(x,t)$ e $C_i(x,t)$, somente no primeiro modo:

$$\Phi(x,t) = \phi_0(t)\Phi_0(x)$$

$$C_i(x,t) = C_{i0}(t)\Phi_0(x)$$

Isto é, são consideradas as equações (1.2.5) e (1.2.6) somente para $j=0$, seguindo-se o sistema

$$\frac{dn}{dt} = \frac{(1-\beta)k}{l} n - \frac{n}{l} + \sum_{i=1}^G \lambda_i C_i \quad (1.2.9)$$

$$\frac{dC_i}{dt} = \frac{\beta_i k}{l} n - \lambda_i C_i \quad i=1, \dots, G \quad (1.2.10)$$

onde l é a vida média dos nêutrons, k é a constante de multiplicação efetiva, $\phi = nv$ e $n(t)$ a densidade de nêutrons em cm^{-3} .

Finalmente, introduzindo os parâmetros:

$$l = \frac{\lambda_a}{v} \frac{1}{1 + B^2 L^2}, \quad \Lambda = \frac{1}{k} = \frac{1}{v\nu\Sigma_f}$$

que são a vida média e o tempo de geração de nêutrons,

respectivamente, nas equações (1.2.9) e (1.2.10), decorre o sistema de equações, ditas equações da cinética pontual:

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda} n(t) + \sum_{i=1}^G \lambda_i C_i(t) \quad (1.2.11)$$

$$\frac{dC_i(t)}{dt} = \frac{\beta_i}{\Lambda} n(t) - \lambda_i C_i(t), \quad i=1, \dots, G \quad (1.2.12)$$

onde

$$\rho(t) = \frac{(k - 1)}{k} \quad (1.2.13)$$

é chamada de reatividade.

CAPÍTULO 2

Aspectos Matriciais das Equações da Cinética Pontual

2.1 - Introdução

Neste capítulo faremos um estudo sobre a positividade parcial da matriz A , que fornece um autovalor dominante, e o comportamento particular do espectro da matriz em termos da reatividade.

2.2 - Formulação Matricial

As equações (1.2.11), (1.2.12) da cinética pontual para G grupos de nêutrons atrasados podem ser escritas de maneira compacta em termos matriciais [5]. Se

$$X(t) = \begin{bmatrix} n(t) \\ C_1(t) \\ \vdots \\ C_G(t) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} x_i(t) \end{bmatrix} \quad (2.2.1)$$

denota uma matriz coluna $G+1$, e

$$A(t) = \begin{bmatrix} \frac{\rho(t)-\beta}{\Lambda} & \lambda_1 & \dots & \lambda_G \\ \frac{\beta_1}{\Lambda} & -\lambda_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ \frac{\beta_G}{\Lambda} & 0 & \dots & -\lambda_G \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{ij}(t) \end{bmatrix} \quad (2.2.2)$$

denota uma matriz quadrada de ordem $G+1$, então as equações da cinética pontual são simplesmente o sistema matricial de primeira ordem

$$\dot{X}(t) = A(t)X(t) \quad (2.2.3)$$

No caso em que a reatividade $\rho(t)$ é uma constante ρ_0 , a solução deste sistema é dada por:

$$X(t) = \exp(At)X(0),$$

onde

$$A = \begin{bmatrix} \frac{\rho_0 - \beta}{\Lambda} & \lambda_1 & \dots & \lambda_g \\ \frac{\beta_1}{\Lambda} & -\lambda_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\beta_g}{\Lambda} & 0 & \dots & -\lambda_g \end{bmatrix} \quad (2.2.4)$$

2.3 - Sistemas Matriciais Essencialmente Não-Negativos

2.3.1- Definições

Uma matriz quadrada A é dita **positiva(não-negativa)**, em símbolos, $A > 0$ ($A \geq 0$), se todos seus elementos são positivos (não-negativos). Diremos que A é **essencialmente não-negativa** (ou de Metzler), se seus elementos fora da diagonal principal são não-negativos [3], [25].

As matrizes essencialmente não-negativas estão relacionadas com matrizes não-negativas. Pois, se A é essencialmente não-negativa, então podemos escolher uma constante apropriada $c > 0$ tal que $A' = cI + A$ é uma matriz não-negativa. Observa-se que as matrizes $A(t)$ e A definidas em (2.2.2) e (2.2.4) são essencialmente não-negativas.

Uma matriz quadrada $A = [a_{ij}]$ de ordem N é dita **reduzível**, se existir uma matriz de permutação P tal que

$$PA^T P = \begin{bmatrix} A_{11} & A_{12} \\ 0 & A_{22} \end{bmatrix}$$

com A_{11} e A_{22} matrizes quadradas. Em caso contrário, A é dita **irreduzível**.

Observa-se que se A é reduzível, a resolução do sistema $\tilde{A}x = b$, com $\tilde{A} = PA^T P$ equivale a resolver os subsistemas $A_{11}x_1 + A_{12}x_2 = b_1$, $A_{22}x_2 = b_2$. Assim, resolvendo a segunda equação para x_2 , obtemos x_1 na primeira equação, isto é, o sistema original foi reduzido a resolver duas equações de menor ordem. Certamente, isto não é possível com matrizes irreduzíveis, pois todas as variáveis da equação estão "acopladas".

A interpretação geométrica do conceito de irreduzibilidade através da teoria de grafos é bastante útil. Para tanto, considera-se N pontos distintos $P_1, P_2, P_3, \dots, P_N$ no plano, chamados de nós. Para cada componente não-nula a_{ij} da matriz A , conectamos o nó P_i ao nó P_j por meio de um caminho $P_i P_j$ (que indica o acoplamento da variável x_i com a variável x_j no sistema). Desta forma é associado

um grafo G(A) com a matriz A. Diremos que G(A) é fortemente conectado, se para cada par de nós P_i e P_j existe um caminho dirigido que conecta P_i com P_j .



Assim, uma matriz A é irredutível, se o grafo G(A) é fortemente conectado. Em outras palavras, para quaisquer i, j , existe uma sequência finita de índices $l(0)=i, l(1), \dots, l(r)=j$ tal que $a_{l(k-1)l(k)} \neq 0$, para $k=1, 2, \dots, r$.

Entretanto, A é redutível quando existem duas sequências finitas disjuntas $l(1), \dots, l(r), s(1), \dots, s(q)$ tais que $r+q = N$ e $a_{l(i)s(j)} = 0$, $i = 1, 2, \dots, r$ e $j = 1, 2, \dots, q$ [25].

2.3.2- O Teorema de Perron

As matrizes positivas possuem uma propriedade espectral importante que influencia o comportamento das soluções de um sistema matricial evolutivo [10], [14] e [17].

Teorema 1:

Se $A > 0$, então existem $w_0 > 0$ e $v_0 > 0$ tal que

(a) $Av_0 = w_0 v_0$;

(b) Se $w \neq w_0$ é autovalor de A, então $|w| < w_0$;

(c) w_0 é um autovalor simples.

Prova:

(a) Considere-se o conjunto S dos w reais tais que existe um $v \geq 0$, com $Av \geq wv$. O conjunto S é não vazio, pois para $w=0$ temos que $Av > 0$, se $v > 0$. Afirmamos que S é limitado superiormente. De fato,

$$(Av)_i = \sum_{j=1}^N a_{ij} v_j$$

e $v \geq 0$ implicam:

$$\| Av \|_{\infty} \leq \| A \|_1 \| v \|_{\infty}$$

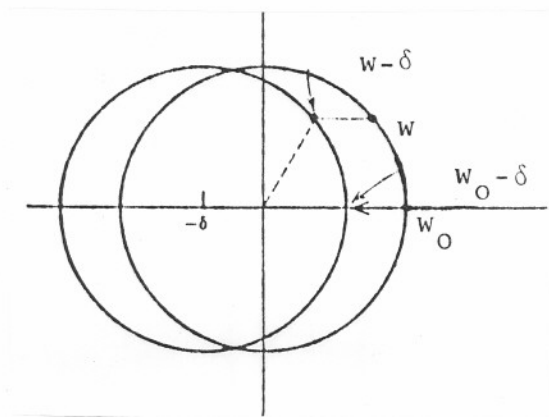
com $\| \cdot \|_{\infty}$ a norma da máxima componente e $\| \cdot \|_1$ a norma da soma das componentes. Portanto, S é limitado superiormente por $\| A \|_1$. S é claramente fechado. Logo possui um elemento máximo. Seja w_0 o máximo de S, isto é,

$$w_0 = \max \{ w : Av \geq wv \text{ para algum } v \geq 0 \} \quad (*)$$

e $v_0 \geq 0$ o vetor correspondente a w_0 , na definição (*). Isto é, v_0 satisfaz $Av_0 \geq w_0 v_0$. Claramente $w_0 > 0$. Como $A > 0$, segue que $Av > 0$ para qualquer $v > 0$. Portanto, $A[Av_0 - w_0 v_0] > 0$, a menos que $Av_0 = w_0 v_0$. Suponhamos que $Av_0 > w_0 v_0$, então para $u_0 = Av_0 > 0$, segue que $Au_0 - w_0 v_0 > 0$ ou equivalentemente $Au_0 > w_0 u_0$. Mas, se isto fosse verdade, w_0 poderia ser aumentado sem violar a desigualdade, o que contradiz a definição de w_0 . Portanto, segue-se que $Av_0 = w_0 v_0$. Também, desde que $v_0 \geq 0$, $v_0 \neq 0$ implica $Av_0 > 0$, a equação $Av_0 = w_0 v_0$ implica que $v_0 > 0$.

(b) Seja $w \neq w_0$ um autovalor de A e u um autovetor

não-nulo associado a w , tal que $Au = wu$. Denotando-se $|u|$ o vetor cujas componentes são os valores absolutos das componentes de u . Considerando o vetor $A|u|$, temos que a primeira componente deste vetor é $a_{11}|u_1| + a_{12}|u_2| + \dots + a_{1n}|u_n|$. Como os a_{ij} 's são positivos, esta soma é maior ou igual a $|a_{11}u_1 + a_{12}u_2 + \dots + a_{1n}u_n|$. Analogamente, considerando este resultado para as demais componentes, segue que $A|u| \geq |Au|$. Assim $A|u| \geq |Au| = |wu| = |w||u|$. Da definição de w_0 , segue-se que $|w| \leq w_0$. Para provar que vale a desigualdade estrita, considere a matriz $A_\delta = A - \delta I$, onde $\delta > 0$ é escolhido suficientemente pequeno de modo que A_δ seja estritamente positiva. Da equação $(w - \delta)I - A_\delta = wI - A$, temos que $w_0 - \delta$ e $w - \delta$ são autovalores de A_δ . Além disso, como A_δ é estritamente positiva, temos que $|w - \delta| \leq w_0 - \delta$, desde que $w_0 - \delta$ seja o maior autovalor de A_δ .



(figura 1. Se $|w| = w_0$ implica $|w - \delta| > |w_0 - \delta|$)

Entretanto, se $|w| = w_0$, $w \neq w_0$, pelo cálculo direto do valor absoluto (figura 1), segue que $|w - \delta| > |w_0 - \delta|$. Isto é uma contradição.

(c) Para provar que w_0 é um autovalor simples, verificaremos que w_0 possui multiplicidade geométrica e algébrica iguais a um. Para verificar que a multiplicidade geométrica é um deve-se mostrar que v_0 é o único autovetor associado com w_0 . Para tal, suponhamos que exista um outro autovetor. Então, como A é real, existirá um autovetor real u_0 que é linearmente independente de v_0 . Desde que $v_0 > 0$, é possível encontrar uma combinação linear $t = \alpha v_0 + u_0$ tal que $t \geq 0$, mas não $t > 0$. Entretanto, como $At = w_0 t$ é estritamente positiva (devido a que $A > 0$), temos uma contradição. Finalmente, suponhamos que a multiplicidade algébrica é maior que um. Então, como a multiplicidade geométrica é um, deve existir uma série de Jordan associada com w_0 . Assim, existe um vetor z tal que $(A - w_0 I)z = u$ e $(A - w_0 I)u = 0$. Em vista do que foi mostrado acima, u deve ser um múltiplo de v_0 , e sem perda da generalidade, podemos assumir que $(A - w_0 I)z = v_0$. Agora seja f_0 o autovetor de A^T , associado com w_0 . Então f_0^T é um autovetor de A e temos

$$0 = f_0^T (A - w_0 I)z = f_0^T v_0$$

Mas $f_0^T v_0$ é positivo, pois ambos, f_0 e v_0 são vetores estritamente positivos. Temos uma contradição, e portanto podemos concluir que a multiplicidade algébrica é um.

2.3.3- Extensão a Matrizes Não-Negativas

O resultado de Perron foi estendido por Frobenius para matrizes não-negativas e irredutíveis. Mais

precisamente, se $\rho(A) = \max_i |w_i|$, w_i autovalor de A , é o raio espectral da matriz A , teremos a seguinte extensão:

Teorema 2:

Seja $A \geq 0$ irredutível. Então, existem $w_0 > 0$ e $v_0 > 0$ tais que

(a) $Av_0 = w_0 v_0$;

(b) $\rho(A) = w_0$;

(c) $\rho(A)$ aumenta, quando qualquer componente de A aumenta;

(d) $\rho(A)$ é um autovalor simples.

A demonstração desta extensão pode ser vista em [10], [14] e [25]. A hipótese adicional de irredutibilidade é fundamental para estabelecer que $(I + A)^{N-1} > 0$ e obter as conclusões de positividade. Quando esta hipótese é retirada, isto é, A redutível, então $w_0 \geq 0$, $v_0 \geq 0$ e $\rho(A)$ não decresce quando uma das componentes de A aumenta.

2.3.4- Soluções Positivas

Dizemos que o sistema matricial homogêneo (2.2.3), com ρ constante (e portanto A), é positivo, se A é uma matriz essencialmente não-negativa. Esta condição em (2.2.3) é equivalente a exigir que o sistema preserve a não-negatividade do vetor posição. Para verificar isso, notemos que para assegurar que $X(t)$ permaneça não-negativo é necessário que $X_i(t) \geq 0$, sempre que $X_i(t) = 0$, $i = 1, \dots, n$. Isto é, se $X(t)$ está na fronteira da região positiva, sua direção de movimento não pode ser tal que o leve fora da região. Isto impõe a exigência que $a_{ij} \geq 0$, $i \neq j$. Assim,

$a_{ij} \geq 0, i \neq j$ é uma condição necessária para a não-negatividade de soluções. Para mostrar que esta condição também é suficiente, notemos que a condição mais forte $a_{ij} > 0, i \neq j$ é certamente suficiente. Neste caso $X_i(t) = 0$ implica $X_i(t) > 0$ (a menos que $X(t) = 0$). Portanto, a solução, partindo de qualquer condição inicial não-negativa, permanecerá não-negativa. Como a solução depende continuamente dos parâmetros a_{ij} , segue-se que a condição mais fraca $a_{ij} \geq 0, i \neq j$, também é suficiente.

Assim, a exigência de que A seja uma matriz essencialmente não-negativa representa uma extensão natural de sistemas positivos [1].

Teorema 3:

Se $A(t)$ é essencialmente não-negativa, então a solução $X(t)$ do sistema $\dot{X}(t) = A(t)X(t), X(0) = X_0 \geq 0$ é não-negativa. Se, além disso, $A(t)$ é irredutível, então para $X_0 > 0$ a solução $X(t)$ é positiva.

Teorema 4:

Uma condição necessária e suficiente para que todos os elementos de e^{At} , A constante, sejam não-negativos para $t \geq 0$, é que

$$a_{ij} \geq 0, \quad i \neq j \quad (1)$$

Prova:

Como $e^{At} = I + At + \dots = [b_{ij}]$, onde $b_{ij} = \delta_{ij} + a_{ij}t + O(t^2) \geq 0$, é claro que a condição em (1) é

necessária para o resultado ser verdadeiro em t pequeno. Para estabelecer a suficiência, seja c_1 um escalar, de maneira que todos os elementos de $A + c_1 I$ sejam não-negativos. Então, claramente, todos os elementos de $e^{(A+c_1 I)t}$ são não-negativos. Também, os elementos de $e^{-c_1 I t}$ são não-negativos. Como

$$\begin{aligned} e^{At} &= e^{(A + c_1 I)t} - c_1 I t \\ &= e^{(A + c_1 I)t} e^{-c_1 I t} \end{aligned}$$

e observando que $A + c_1 I$ e $-c_1 I$ comutam, temos a não-negatividade desejada.

2.3.5- A equação "Inhour"

No caso de reatividade constante ρ , portanto, A constante, soluções do tipo exponencial

$$X(t) = e^{wt} v, \quad v \neq 0 \quad (2.3.1)$$

existem para o sistema (2.2.3), desde que

$$Av = wv, \quad (2.3.2)$$

isto é, w é autovalor de A e v o autovetor associado a w . A equação característica

$$P(w) = | wI - A | = 0 \quad (2.3.3)$$

é chamada de equação "inhour". Este nome foi originado no início da tecnologia de reatores, uma " inhour " sendo definida como a quantidade de reatividade positiva, que corresponde a um aumento assintótico de potência, tendo uma constante de tempo (período) de uma hora (período recíproco de uma " hora inversa ") [11].

Decorre que

$$P(w) = wS(w) - \frac{\rho_0}{\Lambda} \prod_{i=1}^G (w + \lambda_i) \quad , \quad (2.3.3)'$$

onde

$$S(w) = \prod_{i=1}^G (w + \lambda_i) + \sum_{i=1}^G \frac{\beta_i}{\Lambda} \prod_{j \neq i} (w + \lambda_j) \quad (2.3.3)''$$

é um polinômio de grau G. Equivalentemente, escrevendo o sistema (2.3.2), temos

$$\left[\frac{\rho_0 - \beta}{\Lambda} \right] v_1 + \lambda_1 v_2 + \dots + \lambda_G v_{G+1} = w v_1$$

$$\frac{\beta_i}{\Lambda} v_1 - \lambda_i v_{i+1} = w v_{i+1} \quad , \quad i = 1, \dots, G$$

decorre

$$v_{i+1} = \frac{\beta_i v_1}{\Lambda(w + \lambda_i)}$$

$$\frac{\rho_0 - \beta}{\lambda} v_1 + \sum_{i=1}^G \frac{\lambda_i \beta_i v_1}{\Lambda(w + \lambda_i)} = w v_1$$

ou simplesmente,

$$\rho_0 = \Lambda w + \beta - \sum_{i=1}^G \frac{\lambda_i \beta_i}{w + \lambda_i}$$

Substituindo $\beta = \sum_{i=1}^G \beta_i$, obtemos:

$$\rho_0 = \Lambda w + \sum_{i=1}^G \frac{w \beta_i}{w + \lambda_i} \quad (2.3.4)$$

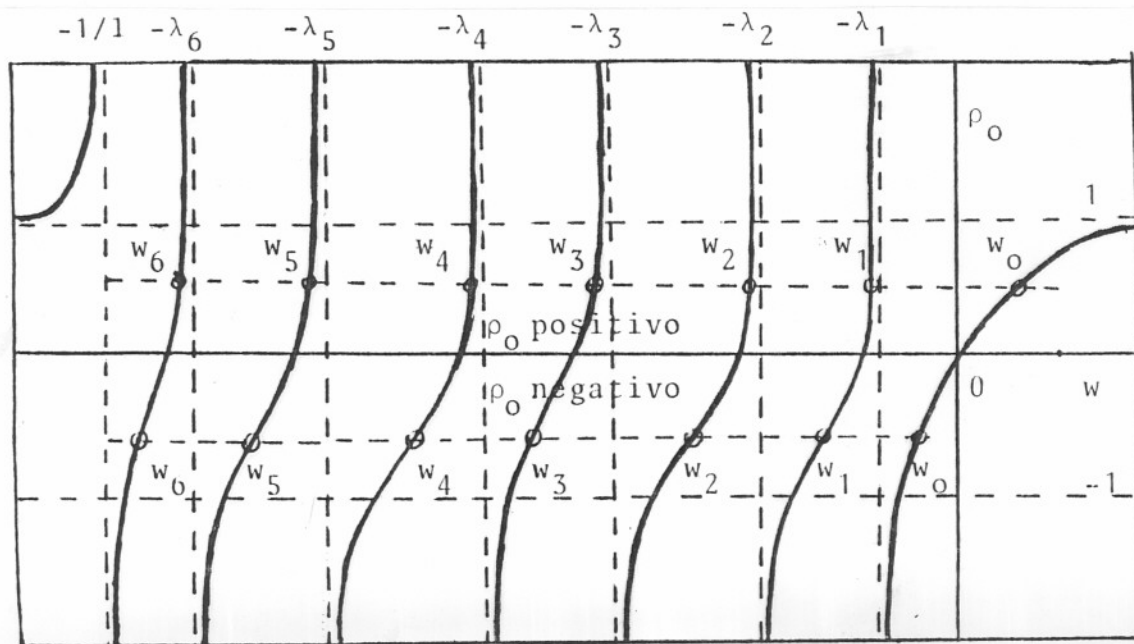
Utilizando $\Lambda = 1/k$ e $k = 1/(1 - l)$, decorre que

$$\rho_0 = \frac{lw}{lw+1} + \frac{1}{lw+1} \sum_{i=1}^G \frac{w \beta_i}{w + \lambda_i} \quad (2.3.4)'$$

A equação característica (2.3.3), que é um polinômio de grau $G+1$ em w , pode ser expressa convenientemente por (2.3.4) ou (2.3.4)'. A natureza geral das raízes da equação (2.3.3) podem ser melhor compreendidas, graficando w como função de

ρ_0 , através de (2.3.4)', como mostra a figura 2. Esta é uma representação puramente qualitativa, com $G=6$, que corresponde a seis grupos emissores de nêutrons atrasados. O valor $G=6$, na prática, corresponde à média de 30 ou mais precursores.

Podemos verificar que a equação (2.3.4)' possui sete polos, para valores de w igual a $-\lambda_i$, $i=1,2,\dots,6$ e $-1/1$.



(figura 2. gráfico de w como função de ρ_0)

Deve-se observar que somente uma porção da figura é significativa, do ponto de vista de reatores, devido a que o valor máximo de $|\rho_0|$, que possui significado físico, é igual a 1, segundo a definição de ρ_0 dada por (1.2.13). É aparente

da figura 2, que para valores positivos de ρ_0 temos $G+1$ raízes w_0, w_1, \dots, w_G de (2.3.3); destas as últimas G raízes são negativas e w_0 é positiva. Além disso, o valor de w_j é aproximadamente igual a $-\lambda_j$, para $j=1, \dots, G$.

Desta discussão, podemos observar a coincidência de resultados, com os previstos pelo teorema 2, pois a matriz (2.2.4) é essencialmente não-negativa e irredutível.

Cálculo dos coeficientes de $P(w)$:

É conveniente salientar que os coeficientes da equação característica (2.3.3) podem ser determinados em termos dos λ_i e das raízes r_1, r_2, \dots, r_G do polinômio $S(w)$, ou pelo algoritmo de Leverrier [7], os quais descreveremos a seguir.

Em primeiro lugar, temos que

$$P(w) = \gamma_0 w^{G+1} + \gamma_1 w^G + \dots + \gamma_G w + \gamma_{G+1},$$

onde

$$\gamma_k = a_k - \frac{\rho_0}{\Lambda} b_{k-1} \quad (2.3.5)$$

com

$$S(w) = w^G + a_1 w^{G-1} + \dots + a_{G-1} w + a_G$$

$$\prod_{i=1}^G (w + \lambda_i) = w^G + b_1 w^{G-1} + \dots + b_{G-1} w + b_G$$

Os coeficientes a_k de $S(w)$ podem ser obtidos de

(2.3.3)", enquanto que os b_k são calculados em termos das raízes explícitas $w = -\lambda_i$, isto é, b_k é a soma dos produtos de k raízes vezes $(-1)^k$ [28]. Assim,

$$b_1 = \sum_{i=1}^g \lambda_i, \quad b_2 = \sum_{\substack{i,j=1 \\ j < i}}^g \lambda_i \lambda_j, \quad \dots, \quad b_g = \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_g$$

Para o caso de $G=6$, um cálculo explícito desses coeficientes é dado em [24].

De outro lado, se w_0, w_1, \dots, w_g são as raízes de $P(w)$, então os coeficientes γ_k satisfazem às relações [7]:

$$S_k + \gamma_1 S_{k-1} + \dots + \gamma_{k-1} S_1 = -k\gamma_k, \quad k=1, \dots, G+1$$

onde

$$S_k = w_0^k + \dots + w_g^k, \quad k = 0, 1, \dots, G+1$$

é simplesmente o traço de A^k . Assim,

$$\begin{aligned} \gamma_1 &= -S_1 \\ \gamma_2 &= \frac{-1}{2} (S_2 + \gamma_1 S_1) \\ &\vdots \\ \gamma_{G+1} &= \frac{-1}{G+1} (S_{G+1} + \gamma_1 S_G + \dots + \gamma_G S_1) \end{aligned} \quad (2.3.6)$$

CAPÍTULO 3

Métodos Numéricos

3.1 - Introdução

A integração numérica das equações da cinética pontual tem sido considerada por vários autores, através de diversos métodos [13], [23]. Neste trabalho, nos restringiremos a descrever os métodos de Hansen [12], Porsching [20] e da Continuação Analítica modificada [6], sendo que este último será testado computacionalmente.

A dificuldade básica na resolução numérica das equações da cinética pontual, deve-se a sua dureza ("stiffness"). Por exemplo, no caso das equações com um grupo de nêutrons atrasados, o tempo de resposta Λ , dos nêutrons prontos é da ordem de 10^{-4} seg; enquanto o tempo de resposta dos nêutrons atrasados é $1/\lambda$ ou cerca de 10 seg, com maior fator de 10^5 . De maneira prática, isto quer dizer que para obter uma resposta, ainda para um segundo, muitos passos pequenos de tempo serão necessários.

A integração numérica da equação matricial

$$\dot{X}(t) = A(t)X(t), \quad X(0) = X_0$$

pelo método simples de Euler

$$\psi_{j+1} = (I + \Delta t A(t_j)) \psi_j,$$

onde

$$\psi_{j+1} = X(t_{j+1}), \quad t_{j+1} = t_j + \Delta t$$

é uma primeira aproximação para a solução do sistema

$$\dot{X}(t) = A(t_j)X(t), \quad X(t_j) = X_j \quad (3.1.1)$$

cuja solução exata é $\exp(A(t_j)t)X_j$. A rigor, todos os métodos em diferenças, quando aplicados às equações da cinética pontual, correspondem na realidade a truncamentos da série para a exponencial na equação $\psi_{j+1} = \exp(A(t_j)\Delta t)\psi_j$. As vantagens ou desvantagens de um ou outro método, são certamente consideradas em termos da estabilidade numérica, exatidão, eficiência, simplicidade de implementação, entre outras.

De um modo geral, o cálculo de ψ_{j+1} é feito utilizando o valor de ψ_j , de $x(t)$ no passo anterior de tempo e a equação (3.1.1). A maneira como esta equação é utilizada é que determina um ou outro método.

Assim, no método de Hansen é explorado o fato que $A(t_0)$, por ser essencialmente não-negativa, possui um autovalor dominante; no método de Porsching, além de considerar o mesmo fato, é realizada uma boa aproximação para a matriz exponencial; e no método de continuação analítica é explorada a própria equação para o cálculo simples e sistemático das derivadas, que são requeridas.

3.2 - Formulação Integral (Método de Hansen)

Anteriormente, vimos que as equações (1.2.11) e (1.2.12) da cinética pontual, podem ser escritas em termos

matriciais por:

$$\dot{X}(t) = A(t)X(t) ,$$

onde $X(t)$ e $A(t)$ são dadas pelas equações (2.2.1) e (2.2.2), respectivamente.

Escrevendo a matriz $A(t)$, na forma

$$A(t) = D(t) + L + U ,$$

onde

$$D(t) = \begin{bmatrix} \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & -\lambda_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & -\lambda_g \end{bmatrix}$$

$$L = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \dots & 0 \\ \frac{\beta_1}{\Lambda} & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\beta_g}{\Lambda} & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix} , \quad U = \begin{bmatrix} 0 & \lambda_1 & \dots & \lambda_g \\ 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

decorre

$$\frac{dX(t)}{dt} - D(t)X(t) = (L + U)X(t) \quad (3.2.1)$$

Multiplicando a equação (3.2.1) pelo fator integrante $\exp(-\int_{t_j}^t D(s)ds)$ e integrando, obtemos:

$$X(t) = e^{D^*(t)} X(t_j) + \int_{t_j}^t e^{D^*(t) - D^*(s)} (L + UX(s)) ds \quad (3.2.2)$$

onde

$$D^*(t) = \int_{t_j}^t D(s) ds$$

A variação da solução num passo de tempo $t = t_j + \Delta t$, é dada por:

$$X(t_j + \Delta t) = e^{D^*(t_j + \Delta t)} X(t_j) + \int_{t_j}^{t_j + \Delta t} e^{D^*(t_j + \Delta t) - D^*(s)} (L + UX(s)) ds$$

ou, mais convenientemente,

$$X(t_j + \Delta t) = e^{\int_0^{\Delta t} D(s+t_j) ds} \left[X(t_j) + \int_0^{\Delta t} e^{-\int_{t_j}^{t_j+s} D(\xi) d\xi} (L + UX(t_j+s)) ds \right] \quad (3.2.3)$$

Para fornecer uma aproximação razoável de $X(t_j+s)$,

no integrando, supõe-se que:

$$X(t_j+s) = e^{\bar{w}_0 s} X(t_j), \quad (3.2.4)$$

onde

$$w_0 = \frac{w_0(\rho(t_j)) + w_0(\rho(t_j+\Delta t))}{2}, \quad \text{com } w_0(\rho(t)) \text{ o}$$

maior autovalor de $A(t)$.

Substituindo a equação (3.2.4) em (3.2.3), temos:

$$X(t_j+\Delta t) = e^{\int_0^{\Delta t} D(\xi+t_j) d\xi} X(t_j) \left[I + \int_0^{\Delta t} e^{(\bar{w}_0 I - \int_0^s D(\xi+t_j) d\xi)} (L+U) ds \right] \quad (3.2.5)$$

No caso em que D é constante no tempo, a equação (3.2.5) reduz-se a:

$$X(t_j+\Delta t) = e^{D\Delta t} \left[I + \int_0^{\Delta t} e^{(w_0 I - D)s} (L+U) ds \right] X(t_j)$$

ou

$$X(t_j+\Delta t) = \left[e^{D\Delta t} + (w_0 I - D)^{-1} (e^{w_0 \Delta t I} - e^{D\Delta t}) (L+U) \right] X(t_j)$$

Isto sugere o seguinte esquema numérico, para a reatividade constante.

$$\psi_{j+1} = G \psi_j, \quad (3.2.6)$$

onde

$$G = e^{D\Delta t} + (w_0 I - D)^{-1} (e^{w_0 \Delta t I} - e^{D\Delta t})(L+U)$$

As propriedades deste esquema são resumidas no seguinte resultado de Hansen.

Teorema 5:

A matriz G é não-negativa, irredutível com $\rho(G) = \exp(w_0 \Delta t)$, onde $Av_0 = w_0 v_0$ com $\rho(A) = w_0$ e v_0 autovetor positivo. Além disso, o erro de discretização local do esquema (3.2.6) é de ordem Δt^2 , e ψ_j é assintótica à componente dominante da solução analítica, isto é, a $\exp(w_0 t_j) v_0$.

Prova:

Da relação $Av_0 = w_0 v_0$ decorre que $(L + U)v_0 = (w_0 I - D)v_0$. Assim sendo $Gv_0 = [\exp(D\Delta t) + (w_0 I - D)^{-1}(w_0 I - D)(\exp(w_0 \Delta t I) - \exp(D\Delta t))]v_0 = \exp(w_0 \Delta t I)v_0$, pois as matrizes são diagonais e comutam. A prova de que $\rho(G) = \exp(w_0 \Delta t)$ é feita por contradição, utilizando o fato que G^T possui as mesmas propriedades que G . Supondo que $X(t_j) = X_j = \psi_j = \sum_{k=0}^n a_k v_k$,

$Av_k = w_k v_k$, decorre que

$$X_{j+1} - \psi_{j+1} = (e^{A\Delta t} - G)\psi_j = \sum_{k=0}^{\alpha} a_k \left[e^{w_k \Delta t} - G \right] v_k \quad (3.2.7)$$

Expandindo Gv_k em termos de Δt

$$Gv_k = \left[I + w_k \Delta t I + \frac{\Delta t^2}{2} (w_0 w_k I + (w_k - w_0) D) + O(\Delta t^3) \right] v_0,$$

e substituindo em (3.2.7), obtemos:

$$X_{j+1} - \psi_{j+1} = \Delta t^2 \sum_{k=0}^{\alpha} a_k \left[\frac{w_k^2 I}{2} + \frac{1}{2} [w_0 w_k I + (w_k - w_0) D + O(\Delta t)] \right] v_k$$

ou seja, o erro de discretização local é de ordem Δt^2 .

Finalmente, para $\psi_0 = \sum_{k=0}^{\alpha} c_k u_k$, $G u_k = \gamma_k u_k$,

$\gamma_0 = \exp(w_0 \Delta t)$, $u_0 = v_0$, obtemos que

$$\psi_j = G^j \psi_0 = \sum_{k=0}^{\alpha} c_k \gamma_k^j u_k$$

Portanto,

$$e^{-w_0 \Delta t j} \psi_j - c_0 v_0 = \sum_{k=1}^g c_k \left(\frac{\gamma_k}{e^{w_0 \Delta t}} \right)^j u_k$$

tende para zero com j grande, devido a que $\exp(w_0 \Delta t) = \rho(G)$.

No caso de reatividade variável, teremos de (3.2.5) o esquema

$$\psi_{j+1} = G_j \psi_j,$$

onde

$$G_j = e^{D^*(t_{j+1})} + \int_0^{\Delta t} e^{\left[\bar{w}_0 s I + D^*(t_{j+1}) - D^*(t_j + s) \right]} (L+U) ds$$

depende do tempo t_j . É conveniente salientar que aproximando G_j por G em cada intervalo $[t_j, t_{j+1}]$, com $\rho(t_j) = \rho_0$, as propriedades do esquema (3.2.6) são mantidas, exceto que o comportamento assintótico é aproximado, pois, $\exp(\bar{w}_0 t) v_0$ não é solução exata de $\dot{X}(t) = A(t)X(t)$.

3.3 - Formulação Exponencial (Método de Porsching)

Se A é uma matriz constante, e se X_j denota a solução no tempo t_j , da equação

$$\dot{X}(t) = A X(t) \tag{3.3.1}$$

então, no tempo $t_{j+1} = t_j + \Delta t$, temos que

$$X_{j+1} = \exp(A\Delta t)X_j \quad (3.3.2)$$

Quando ρ (e portanto A) é uma função do tempo (3.3.2) não fornece a solução da equação

$$\dot{X}(t) = A(t)X(t), \quad (3.3.3)$$

no entanto, ela sugere uma forma que pode ser apropriada para o caso geral. A variação da reatividade sobre o intervalo $[t_j, t_{j+1}]$ pode ser levada em conta, considerando, por exemplo, um valor médio para $A(t)$ neste intervalo, isto é, a equação (3.3.3) pode ser generalizada para

$$\psi_{j+1} = \exp\left[\frac{A_j + A_{j+1}}{2}\Delta t\right]\psi_j, \quad (3.3.4)$$

onde $A_j = A(t_j)$ e ψ_j é agora uma aproximação para a solução exata $X_j = X(t_j)$ da equação (3.3.3).

Expandindo a solução de (3.3.3) em série de Taylor, no ponto t_j e igualmente a exponencial em (3.3.4), obtemo que

$$X_{j+1} = X_j + \dot{X}_j \Delta t + \ddot{X}_j \frac{\Delta t^2}{2} + O(\Delta t^3)$$

$$\psi_{j+1} = \left[I + \Delta t \frac{A_j + A_{j+1}}{2} + \frac{\Delta t^2}{2!} \left(\frac{A_j + A_{j+1}}{2} \right)^2 \right] \psi_j + O(\Delta t^3)$$

como

$$A_{j+1} = A_j + \dot{A}_j \Delta t + O(\Delta t^2),$$

obtemos

$$\psi_{j+1} = \left[I + \Delta t A_j + \frac{\Delta t^2}{2} (\dot{A}_j + A_j^2) \right] \psi_j + O(\Delta t^3),$$

e supondo que $\psi_j = X_j$, temos:

$$X_{j+1} - \psi_{j+1} = O(\Delta t^3),$$

isto é, o erro de discretização local do esquema (3.3.4) é de ordem Δt^3 . Por outro lado, de (3.3.4) decorre

$$\lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{\psi_{j+1} - \psi_j}{\Delta t} = A_j X_j,$$

isto é, o esquema é consistente e ψ_j converge para a solução exata X_j , quando Δt tende a zero.

Para implementar numericamente o esquema (3.3.4), é necessário calcular a exponencial da matriz

$$\hat{A}_j = \frac{A_j + A_{j+1}}{2} \Delta t$$

Existem diversos métodos na literatura [19], e nós apresentaremos somente a aproximação Racional de Padé. A aproximação racional de $\exp(x)$ por meio de $R(x) = (p(x))(q(x))^{-1}$, com $p(x)$, $q(x)$ polinômios de grau m e n , respectivamente, é feita, na prática, determinando os

coeficientes $p_j = p^{(j)}(\alpha)$, $q_j = q^{(j)}(\alpha)$, tais que, na expressão

$$e^X q(x) - p(x),$$

os termos em $(x - \alpha)^j$, $j=0, 1, \dots, N$ se anulam. Deste modo, $e^X - R(x)$ e suas derivadas até ordem $N = m + n$ se anulam em $x=\alpha$ [21].

O seguinte resultado, devido a Porsching, estabelece uma cota superior para a diferença entre e^X e $R(X)$, quando X é uma matriz quadrada de ordem N .

Teorema 6:

Suponhamos que

$$\max_I |R(x) - e^x| \leq M$$

para um intervalo fechado I que contém os autovalores w_1, w_2, \dots, w_N da matriz X de ordem $N \times N$. Se a matriz X possui N autovetores linearmente independentes u_1, u_2, \dots, u_N correspondentes aos w_i , então

$$\|R(X) - e^X\| \leq \frac{M\sqrt{N}}{\alpha}$$

onde α^2 é o menor autovalor da matriz de Gram $Gr = [(u_i, u_j)]$.

Prova:

Suponhamos que os u_i sejam unitários. Escrevendo

$$x = d_1 u_1 + \dots + d_N u_N = Sd,$$

onde $S = [u_1 \dots u_N]$, $d = \text{col} [d_1 \dots d_N]$, decorre que

$$R(X) - e^X x = \sum_{j=1}^N d_j (R(w_j) - e^{w_j} u_j) .$$

Portanto

$$\| (R(X) - e^X) x \| \leq M \sum_{j=1}^N |d_j| \leq M \sqrt{N} \| d \| . \quad (*)$$

Por outro lado, escolhendo x vetor unitário, isto é, $x^T x = d^T S^T S d = 1$, decorre que $d^T G d = 1$, onde $G = S S^T$ é uma matriz de Gram dos vetores u_1, u_2, \dots, u_N . Como os vetores u_j são linearmente independentes, temos que G é simétrica e positiva definida. Assim, escrevendo $G = P^T \Lambda P$, $\Lambda = \text{diag}[\alpha_1^2, \dots, \alpha_N^2]$, P ortogonal, decorre que $h^T A h = 1$, com $h = P d$.

Da relação $\sum_{j=1}^N \alpha_j^2 h_j^2 = 1$, obtemos

$$\| h \|^2 = \sum_{j=1}^N h_j^2 \leq \sum_{j=1}^N \frac{\alpha_j}{\alpha} h_j^2 = \frac{1}{\alpha^2} .$$

Portanto, $\| d \| \leq 1/\alpha$ e assim obtemos o resultado esperado, pois x é unitário e arbitrário.

No caso das equações da cinética pontual, com $A(t)$ dada por (2.2.2), a matriz \hat{A}_j satisfaz às hipóteses do teorema .

A estimativa do erro $E = R(X) - e^X$, permite determinar o quanto a solução do esquema

$$\psi_{j+1}^* = R(\hat{A}_j) \psi_j^* \quad (3.3.5)$$

aproxima ψ_{j+1} , obtida pelo esquema (3.3.4). Mais precisamente,

$$\| \psi_{j+1}^* - \psi_{j+} \| \leq \| E_j \| \| \eta \| ,$$

quando $\psi_j = \psi_j^* = \eta$.

As seguintes funções racionais foram consideradas por Porsching:

$$1) R_1(x) = (1 - x)^{-1}$$

$$2) R_2(x) = \left(1 - \frac{2x}{3} + \frac{x^2}{6} \right)^{-1} \left(1 + \frac{x}{3} \right)$$

$$3) R_3(x) = (1 + a_1 x + a_2 x^2 + a_3 x^3)^{-4}$$

com $a_1 = -0.25$ e a_2, a_3 escolhidos tais que minimizem

$$F(a_2, a_3) = \max_{(-\infty, b)} | R_3(x) - \exp(x) |$$

com $b > 0$ tal que $-\infty \leq \exp(w_i \Delta t) \leq b$, w_i autovalor de $\hat{A}_j / \Delta t$. Para o caso $b=2.0$, é obtido aproximadamente que $a_2 = 0.0310616$, $a_3 = -0.0022213$.

As três equações em diferença associadas com R_1, R_2, R_3 são, respectivamente

$$\psi_{j+1}^* = (I - \hat{A}_j)^{-1} \psi_j^* \quad (3.3.6)$$

$$\psi_{j+1}^* = \left[I - \frac{2\hat{A}_j}{3} + \frac{1}{6}\hat{A}_j^2 \right]^{-1} \left[I + \frac{1}{3}\hat{A}_j \right] \psi_j^* \quad (3.3.7)$$

$$\psi_{j+1}^* = \left(I - 0.025\hat{A}_j + 0.0310616\hat{A}_j^2 - 0.0022213\hat{A}_j^3 \right)^{-1} \psi_j^* \quad (3.3.8)$$

onde

$$\hat{A}_j = \frac{A_j + A_{j+1}}{2} \Delta t$$

3.4 - Formulação Analítica (Método da Continuação Analítica)

Se $A(t)$ é analítica ($\rho(t)$ também é analítica), então a solução da equação

$$\dot{X}(t) = A(t)X(t), \quad X(\tau) = X_\tau \quad (3.4.1)$$

pode ser escrita como uma série de Taylor

$$X(t) = \sum_{k=0}^{\infty} X^{(k)}(\tau) \frac{(t - \tau)^k}{k!} \quad (3.4.2)$$

convergente para t próximo de τ . O cálculo das derivadas $X^{(k)}(\tau)$ pode ser feito, em princípio, diretamente da equação (3.4.1), obtendo-se um valor aproximado para (3.4.2). Através de continuação analítica [4] e [6], é possível estender a validade de (3.4.2), porém atualizando os cálculos das derivadas, para o próximo intervalo. Este procedimento,

apesar de ter se mostrado satisfatório em muitas situações, certamente não explora a natureza do sistema.

Portanto, escrevamos a matriz $A(t)$ na forma

$$A(t) = L + H(t) ,$$

onde

$$L = \begin{bmatrix} \frac{\rho_0 - \beta}{\Lambda} & \lambda_1 & \dots & \lambda_g \\ \frac{\beta_1}{\Lambda} & -\lambda_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \dots & \vdots \\ \frac{\beta_g}{\Lambda} & 0 & \dots & -\lambda_g \end{bmatrix}$$

$$H(t) = \begin{bmatrix} \rho^*(t) & \dots & 0 \\ \vdots & \dots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 \end{bmatrix}$$

de modo que a parte variável da reatividade seja considerada como perturbação linear do sistema constante $\dot{X} = LX$. Assim sendo, a solução do sistema (3.4.1) pode ser escrita de maneira implícita através da fórmula de variação de parâmetros.

$$X(t) = e^{L(t-\tau)} X(\tau) + \int_{\tau}^t e^{L(t-s)} H(s) X(s) ds \quad (3.4.3)$$

Utilizando a regra de derivação de Leibniz, para o produto de funções:

$$\frac{d^n}{dt^n} (y(t)z(t)) = \sum_{k=0}^n \binom{n}{k} y^{(n-k)} z^{(k)}$$

e da derivada de uma integral variável:

$$\frac{d}{dt} \int_{\tau}^t F(t,s) ds = F(t,t) + \int_{\tau}^t \frac{\partial F(t,s)}{\partial t} ds$$

decorre de (3.4.3) que:

$$\begin{aligned} X^{(k)}(t) &= L^k e^{L(t-\tau)} X(\tau) + \sum_{j=0}^{k-1} L^{k-j-1} \frac{d^j H(t) X(t)}{dt^j} + \\ &+ \int_{\tau}^t L^{k-s} L^k H(s) X(s) ds \end{aligned} \quad (3.4.4)$$

Portanto, os coeficientes da série de Taylor (3.4.2) são obtidos da equação (3.4.4) para $t=\tau$, ou seja:

$$X^{(k)}(\tau) = L^k X(\tau) + \sum_{j=0}^{k-1} L^{k-j-1} \sum_{i=0}^j \binom{j}{i} H^{(j-i)}(\tau) X^{(i)}(\tau) \quad (3.4.5)$$

Finalmente, observa-se que da substituição da série de Taylor em (3.4.1), com $A(t) = L + H(t)$, resulta a

seguinte relação de recorrência:

$$X^{(k+1)}(\tau) = LX^{(k)}(\tau) + \sum_{j=0}^k \begin{bmatrix} k \\ j \end{bmatrix} H^{(k-j)}(\tau) X^{(j)}(\tau) \quad (3.4.6)$$

cuja solução é obtida de maneira iterativa, usando a fórmula (3.4.5).

Para implementar numericamente a solução $X(t)$ dada pela equação (3.4.2), precisamos truncar a série

$$X(t) \doteq \sum_{k=0}^N X^{(k)}(\tau) \frac{(t-\tau)^k}{k!} \quad (3.4.7)$$

e calcular para $t = t_{j+1}$, com $\tau = t_j = j\Delta t$, $j = 0, 1, \dots, M$. O passo de tempo $\Delta t = t_{j+1} - t_j$, na equação (3.4.7) pode ser obtido, requerendo que o valor absoluto do erro de truncamento fracional, para cada expansão, seja no máximo igual a um erro de truncamento especificado ϵ , ou seja,

$$\frac{|R_i(t_{j+1})|}{|X_i(t_{j+1})|} \leq \epsilon \quad (3.4.8)$$

para quaisquer passos de tempo j e variáveis X_i , onde $R_i(t_{j+1})$ é o resto depois de $N+1$ termos na expansão de X_i para o $j+1$ -ésimo passo de tempo. Este resto é dado por:

$$R_i(t_{j+1}) = \frac{X_i^{(N+1)}(\eta)\Delta t^{N+1}}{(N+1)!} \quad (3.4.9)$$

onde $t_j \leq \eta \leq t_{j+1}$, e

$$X_i^{(N+1)}(\eta) = \frac{X_i^{(N)}(t_{j+1}) - X_i^{(N)}(t_j)}{\Delta t} \quad (3.4.10)$$

Substituindo a equação (3.4.9) em (3.4.8), pode ser observado que o maior passo de tempo que satisfaz à equação (3.4.8), para cada variável, para a qual a expansão é feita, é dada por:

$$(\Delta t)_i = \left[\frac{(N+1)! \varepsilon |X_i(t_{j+1})|}{|X_i^{(N+1)}(\eta)|} \right]^{(N+1)^{-1}} \quad (3.4.11)$$

A equação (3.4.11) fornece um critério analítico para determinar o passo de tempo. Note que o passo de tempo é determinado pelo erro de truncamento ε , a ordem N da série de Taylor, e o comportamento da função $X_i(t)$ no intervalo $t_j \leq t \leq t_{j+1}$. Para um ε fixado, o passo de tempo pode ser aumentado em muitos problemas aumentando N . Para um N fixado, o passo de tempo pode ser aumentado aumentando ε .

Para ε e N fixados, o passo de tempo é maior, onde a razão

$$\left| \frac{X_i(t_{j+1})}{X_i^{(N+1)}(\eta)} \right|$$

é um máximo; e menor, onde essa razão é um mínimo. Assim, o passo de tempo automaticamente, expande ou contrai, dependendo do comportamento da função, para manter um erro de truncamento fracional constante. Devido a que este método

requer um passo de tempo comum para todas as variáveis, que são expandidas em série de Taylor, e como o passo de tempo calculado pela equação (3.4.11) é diferente para cada variável, um passo de tempo comum deve ser calculado da variável, digamos $X_m(t)$, a qual produz o menor passo de tempo. A experiência tem mostrado que o nível de nêutrons $n(t)$, quando expandido em série de Taylor, é a variável que usualmente impõe a maior restrição no passo de tempo. Assim, o uso de $X_m(t)$ na equação (3.4.11), para calcular um passo de tempo comum, garante que as outras variáveis dependentes também satisfaçam à equação (3.4.8). Por essa razão, um passo de tempo comum é calculado por:

$$\Delta t = \left[\frac{(N+1)! \varepsilon |X_m(t_{j+1})|}{|X_m^{(N+1)}(\eta)|} \right]^{(N+1)^{-1}} \quad (3.4.12)$$

Como $X_m(t_{j+1})$ e $X_m^{(N+1)}(\eta)$ não podem ser calculados até que Δt seja conhecido, um procedimento iterativo é usado para calcular o passo de tempo. Primeiro, um passo de tempo tentativo é calculado por

$$\Delta t^* = \left[\frac{(N+1)! \varepsilon |X_m(t_j)|}{|X_m^{(N+1)}(t_j)|} \right]^{(N+1)^{-1}} \quad (3.4.13)$$

Este valor tentativo é, então modificado pelo seguinte processo iterativo:

1) Usando o valor tentativo (3.4.13) para Δt , valores tentativos para $X_m(t_{j+1})$ e suas derivadas são calculados. Já que as equações são acopladas, isto requer um passar através de todas as equações do sistema, para cada derivada.

2) Um passo de tempo melhorado é, então calculado pela equação (3.4.12), onde $X_m^{(N+1)}(\eta)$ é calculado pela equação (3.4.10).

3) Se o passo de tempo melhorado é maior que seu valor tentativo (para este caso, o passo de tempo tentativo produz um menor erro de truncamento que o requerido), ou menor por um fator que não exceda a um valor pré-fixado, o cálculo procede para o seguinte passo de tempo. Se o passo de tempo melhorado não satisfaz a estas condições, torna-se o passo de tempo tentativo, e os passos 1) a 3) são repetidos até que as condições sejam satisfeitas.

3.5 - Resultados Numéricos

As equações (1.2.11) e (1.2.12) da cinética pontual foram integradas pelo método da continuação analítica, com seis grupos de precursores ($G = 6$) e com os seguintes dados [15]:

$$\beta_1 = 0.000214, \beta_2 = 0.001423, \beta_3 = 0.001274, \beta_4 = 0.002568,$$

$$\beta_5 = 0.000748, \beta_6 = 0.000273, \beta = \sum_{i=1}^6 \beta_i = 0.0064,$$

$$\lambda_1 = 0.00124, \lambda_2 = 0.0305, \lambda_3 = 0.111, \lambda_4 = 0.301, \lambda_5 = 1.14$$

$$\lambda_6 = 3.01,$$

e com o dado inicial de equilíbrio estacionário

$$C_i(0) = \frac{\beta_i n(0)}{\lambda_i \Lambda}$$

com $n(0)=1$ e $\Lambda=3 \times 10^{-5} \text{ seg}^{-1}$. Foram utilizadas as reatividades linear e senoidal: $\rho(t) = 0.001t$ e $\rho(t) = 7.3 \times 10^{-4} \text{sen}(t)$, respectivamente.

As figuras 3 e 4, mostram as respostas da densidade de nêutrons, considerando estas reatividades.

O cálculo foi feito, utilizando-se uma modificação computacional, introduzida por Reali na integração da equação de Van Der Pol [22], que a seguir descreveremos, e com o auxílio do software matemático matricial **Matlab**, desenvolvido pelo grupo de Cleve Moler [18] e implementado num PC-286.

Da equação (3.4.6), multiplicando por $\Delta t^k/k!$ ambos os membros, obtemos:

$$X^{(k+1)}(t) \frac{\Delta t^k}{k!} = L X^{(k)}(t) \frac{\Delta t^k}{k!} + \frac{1}{k!} \sum_{j=0}^k \binom{k}{j} H^{(k-j)}(t) \Delta t^{k-j} X^{(j)}(t) \Delta t^j$$

e fatorando convenientemente, decorre que

$$\frac{(k+1)}{\Delta t} A_{k+1} = L A_k + \sum_{j=0}^k E_{k-j} A_j$$

onde

$$A_k = X^{(k)}(t) \frac{\Delta t^k}{k!}$$

$$E_{k-j} = H^{(k-j)}(t) \frac{\Delta t^{k-j}}{(k-j)!}$$

Por outro lado, $\dot{X}(t)$ pode ser escrito na forma conveniente

$$\dot{X}(t) = \sum_{k=0}^{\infty} B_k \quad , \quad B_k = A_{k+1} \frac{(k+1)}{\Delta t}$$

Assim sendo, teremos a seguinte relação de recorrência [27]:

$$B_k = LA_k + \sum_{j=0}^k E_{k-j} A_j \quad (3.5.1)$$

e

$$A_{k+1} = \frac{B_k \Delta t}{(k+1)} \quad (3.5.2)$$

a qual nos permite ir calculando, sucessivamente, as derivadas de $X(t)$, num ponto desejado.

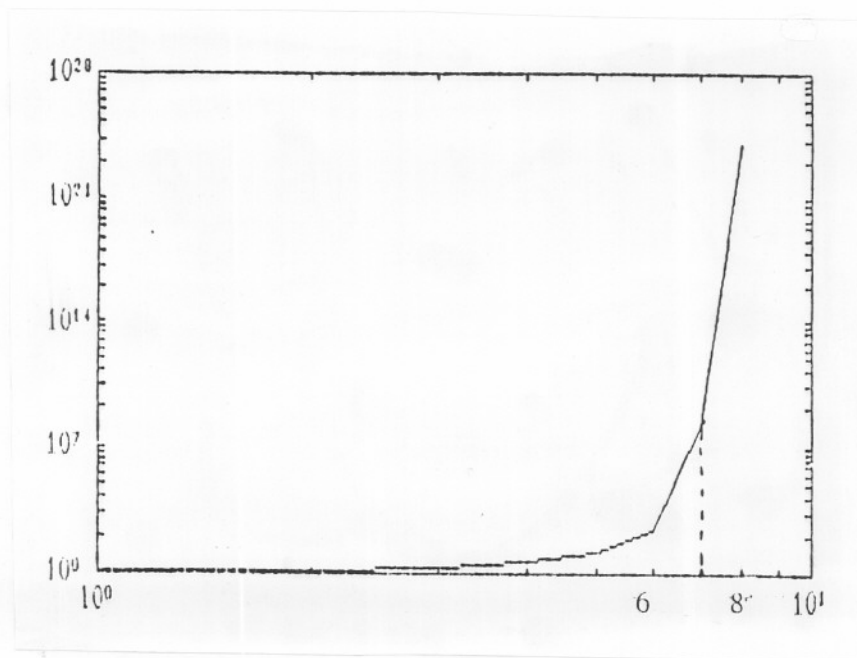
Para integrar as equações, dividimos o intervalo $[0, T]$, com $T = M\Delta t$, $t_j = j\Delta t$, $j = 0, 1, \dots, M$, calculamos $X(t_j)$, $X^{(1)}(t_j)$, \dots , $X^{(N)}(t_j)$ e determinamos $X(t_j + \Delta t)$, pelo polinómio de Taylor de grau N , de $X(t)$ no ponto t_j . Observa-se que o cálculo das derivadas é feito através de (3.5.1), atualizando as derivadas com (3.5.2), em cada passo de tempo Δt .

Os resultados obtidos no caso linear, com $N=12$ e $\Delta t=0.02$, coincidem com os valores calculados pelo método de Hansen [27]. Para o caso senoidal, conseguimos os mesmos resultados que com o método de Hansen, utilizando-se $N=6$ e $\Delta t=0.012$.

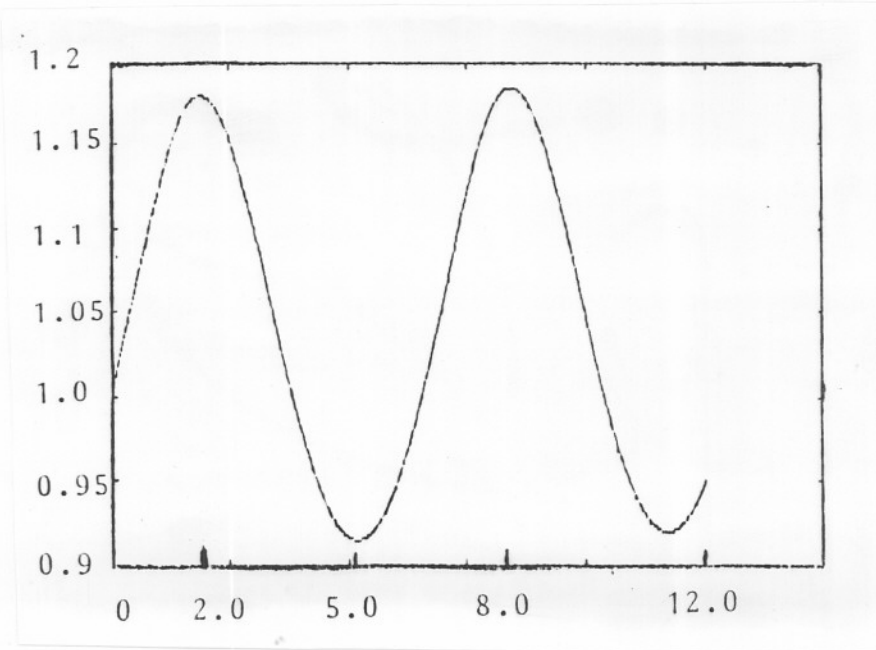
É conveniente observar que o carácter iterativo do programa em Matlab, permitiu-nos conferir a variação do passo de tempo, conforme o avanço do intervalo de

integração, o qual reflete, de certo modo, as previsões sobre a escolha de Δt , na sessão anterior, feitas em [26]. Além disso, observa-se que erros de arredondamento são propagados, quando o passo é muito pequeno, devido ao aumento de operações.

Finalmente, o uso direto da equação matricial (3.5.2) sem atualizar valores é menos eficiente do que atualizando e eliminando dados da memória. Por exemplo, no caso linear, com $T=8\text{seg}$, $N=12$ e $\Delta t=0.02$, temos 1786 flops para (3.5.1), quando atualizamos e eliminamos os dados da memória, isto é, uma economia de 38% em flops, e consequentemente em tempo de execução.

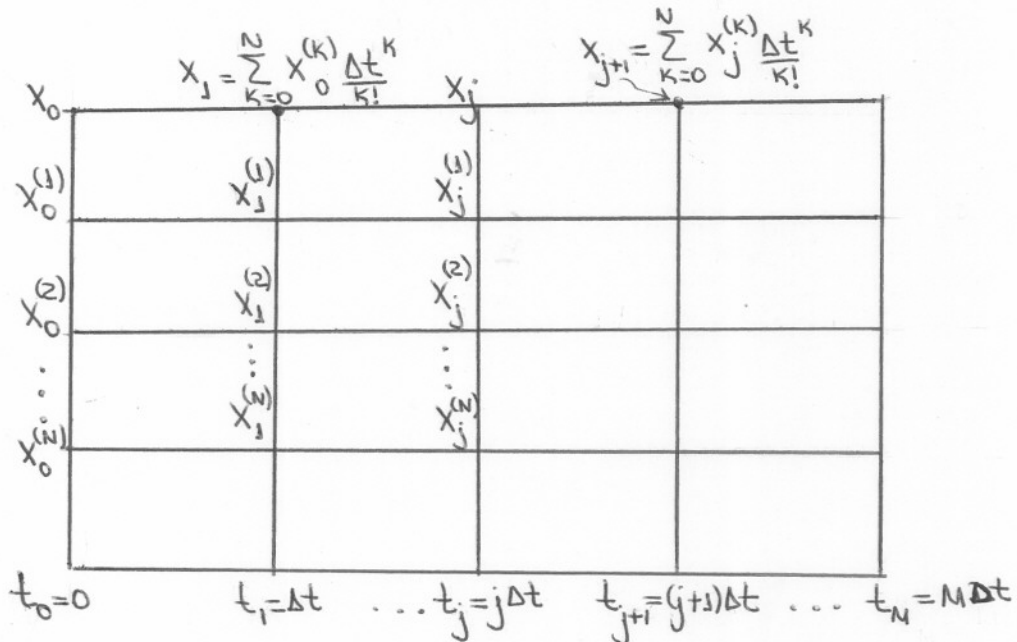


(figura 3. gráfico com reatividade linear)



(figura 4. gráfico com reatividade senoidal)

APÊNDICE
Programas Testes



Algoritmo Geral

1 - Dado $X(0)$, calcular $X^{(1)}(0)$, ..., $X^{(N)}(0)$ derivando a equação $\dot{X}(t) = LX(t) + H(t)X(t)$, onde estas derivadas são colocadas em $XN = [X(0), \dots, X^{(N)}(0)]$.

2 - Calcular $X(\Delta t) \cong \sum_{k=0}^N X^{(k)}(0) \Delta t^k / k!$

3 - Repetir 1 e 2 com $k\Delta t$, $k = 1, \dots, M$, obtendo $XN = [X(k\Delta t), \dots, X^{(N)}(k\Delta t)]$, $X((k+1)\Delta t) \cong \sum_{k=0}^N X^{(k)}(k\Delta t) \Delta t^k / k!$.

```

% Solucao das equacoes da cinetica pontual de um Reator Nuclear
% Matrizes L e X(0), da equacao diferencial  $\dot{X}(t)=LX(t) + H(t)X(t)$ 
% Aluna: Sandra E. Vielmo Cogo
% Orientador: Prof. Julio Claeysen
% Data: abril/90

```

```
format long e
```

```
beta = [0.006473, 0.000214, 0.001423, 0.001274, 0.002568,
        0.000748, 0.000273];
```

```
tal = 0.00003;
```

```
l = [0.0124, 0.0305, 0.111, 0.301, 1.14, 3.01];
```

```
L = zeros(7,7);
```

```
L = [ -beta(1)/tal, l(1), l(2), l(3), l(4), l(5), l(6);
      beta(2)/tal, -l(1), 0, 0, 0, 0, 0;
      beta(3)/tal, 0, -l(2), 0, 0, 0, 0;
      beta(4)/tal, 0, 0, -l(3), 0, 0, 0;
      beta(5)/tal, 0, 0, 0, -l(4), 0, 0;
      beta(6)/tal, 0, 0, 0, 0, -l(5), 0;
      beta(7)/tal, 0, 0, 0, 0, 0, -l(6)]
```

```
for i = 1 : 6,
```

```
    n(i) = i;
```

```
    c(i,i) = (beta(i+1)*n(i))/(tal*l(i));
```

```
end ;
```

```
xx = [ n(1); c(1,1); c(2,1); c(3,1); c(4,1); c(5,1); c(6,1)]
```

```

function x=nuclear1(N,T,M,L,xx)
% Solucao da equacao da cinetica pontual de um reator nuclear,
% considerando a reatividade linear
% Aluna: Sandra E. Vielmo Cogo
% Orientador: Prof. Julio Claeysen
% Data: abril/90
XN = zeros(7,N+1);
XN(:,1) = xx;
Dt = T/M;
H = zeros(7,7);
Hder1 = zeros(7,7);
Hder1(1,1) = 33.333;
for k = 1:M;
H(1,1) = 33.3333*(k-1)*Dt;
XN(:,2) = L*XN(:,1) + H*XN(:,1);
for i = 2:N;
XN(:,i+1) = L* XN(:,i) + H*XN(:,i) + (i-1)*Hder1*XN(:,i-1);
end;
soma = XN(:,N+1);
for j = 1:N;
soma = soma*Dt/(N+1-j) + XN(:,N+1-j);
end;
XN(:,1) = soma;
end;
x=soma;

```

Algoritmo Realí- Vilhena- Claeysen

1 - Dado $A_0 = X(0)$ calcular $B_0 = \dot{X}(0) = LA_0 + E_0 A_0$ e
 $A_1 = B_0 \Delta t$.

2 - Repetir 1 com $k = 1, \dots, M$, usando

$$B_k = LA_k + \sum_{j=0}^k E_{k-j} A_j$$

$$A_{k+1} = \frac{B_k \Delta t}{(k+1)}$$

```

function x=nuclear4(N,T,M,L,xx)
% Solucao da equacao da cinetica pontual de um Reator Nuclear,
% considerando a reatividade linear
% Aluna: Sandra E. Vielmo Cogo
% Orientador: Prof Julio Claeysen
% Data: abril/90
A1 = zeros(7,1);
A2 = xx;
B1 = zeros(7,1);
Dt = T/M;
F = zeros(7,1);
soma=A2;
for k=1: M;
    for i=1: N;
        F(i) = 33.333*Dt*(A1(i) + (k-1)*A2(i));
        B1 = L*A2 + F;
        A1 = A2;
        A2 = B1*Dt/i;
        soma = soma + A2;
    end;
A1 = zeros(7,1);
A2 = soma;
end;
x=soma;

```

```

function [x,y]=nuclear6(N,T,M,L,xx)
% Solucao da equacao da cinetica pontual de um reator nuclear,
% considerando a reatividade senoidal
% Aluna: Sandra E. Vielmo Cogo
% Orientador: Prof. Julio Claeysen
% Data: abril/90
A=zeros(7,N+1);
B=zeros(7,N);
C=zeros(7,M+1);
F=zeros(7,N);
E=zeros(7,N);
Dt=T/M;
A(:,1)=xx;
C(:,1)=xx;
soma1=A(:,1);
for k=1:M;
    E(1,1)=24.333*sin((k-1)*Dt);
    E(1,2)=24.333*Dt*cos((k-1)*Dt);
    for j=1:N-2;
        E(1,j+2) = -E(1,j)*(Dt^2)/(j*(j+1));
    end;
    for i=1:N;
        F(:,i)=zeros(7,1);
        F(1,i)=0;
        for j=1:i;
            F(1,i)=F(1,i) + E(1,j)*A(1,i-j+1);
        end;
        B(:,i) = L*A(:,i) + F(:,i);
        A(:,i+1) = B(:,i)*Dt/i;
        soma1 = soma1 + A(:,i+1);
    end;
A(:,1)=soma1;
C(:,k+1)=soma1;
end;
x=C';
y=x(:,1);
shg;
plot(y);

```

```

function x=nuclear3(N,T,M,alfa,Y0,Y10)
% Programa para resolucao das equacoes de Van Der Pol
% utilizando o Metodo de reali
% Aluna: Sandra E. Vielmo Cogo
% Orientador: Prof. Julio Claeysen
% Data: maio/90
A = zeros(1,N+1);
B = zeros(1,N);
C = zeros(1,M+1);
D = zeros(1,N-1);
E = zeros(1,N-1);
H = zeros(1,M);
C(1) = Y0;
H(1) = Y10;
Dt = T/M;
A(1) = Y0;
A(2) = Y10*Dt;
B(1) = Y10;
for k=1:M;
soma3 = A(1) + A(2);
soma4 = B(1);
    for i=1: N-1;
        soma1 = 0;
        soma2 = 0;
        for j=1: i;
            soma1 = soma1 + A(i+1-j)*A(j);
            soma2 = soma2 + D(i+1-j)*B(j);
        end;
        D(i) = soma1;
        E(i) = soma2;
        A(i+2) = ((alfa*B(i) - alfa*E(i) - A(i))*(Dt^2))/(i*(i+1));
        B(i+1) = (A(i+2)*(i+1))/Dt;
        soma3 = soma3 + A(i+2);
        soma4 = soma4 + B(i+1);
    end;
A(1) = soma3;
A(2) = soma4*Dt;
B(1) = soma4;
C(k+1) = soma3;
H(k+1) = soma4;
end;
x = C
y = H
shg
plot(x)

```

BIBLIOGRAFIA

- [1] BELLMAN, R. Introduction to Matrix Analysis. New York: McGraw-Hill, 1960.
- [2] BIRKHOFF, G. Numerical Solution of Reactor Kinetics Equations. In: Numerical Solutions of Nonlinear Differential Equations. New York: John Wiley, p.3-20, 1966.
- [3] BIRKHOFF, G. and VARGA, R. "Reactor Critically and Nonnegative Matrices. Journal of the Society for Industrial and Applied Mathematics. Philadelphia, v.6, n.4 , p.354-377, dez.1958.
- [4] CLAEYSSSEN, J. and VILHENA, M. The Modified Matrix Analytic Continuation Method for the Point Kinetic Equations . XIII CNMAC. Águas de Lindóia, 1990.
- [5] CLAEYSSSEN, J. Equações Diferenciais Matriciais . Porto Alegre: UFRGS, 1982.
- [6] DAVIS, H. Introduction to Nonlinear Differential and Integral Equations. New York: Dover Publications, 1962.
- [7] DEMIDOVITCH, B. and MARON, I. Computational Mathematics. Moscow: Mir Pub, 1982.
- [8] DUDERSTAD, J. and HAMILTON, L. Nuclear Reactor Analysis. New York: John Wiley, 1976.
- [9] DUFF, G. and NAYLOR, D. Differential Equations of Applied Mathematics. New York: John Wiley, 1966.

- [10] GANTMACHER, F. The Theory of Matrices. New York: Chelsea Pub, 1960.
- [11] GLASSTONE, S. and EDLUND, M. The Elements of Nuclear Reactor Theory. New York: Van Nostrand, 1952.
- [12] HANSEN, K. Stable Numerical Solutions of the Reactor Kinetics Equations. Nuclear Science and Engineering: 22, 51-99, 1965.
- [13] HETRICK, D. Dynamics of Nuclear Reactors. The University of Chicago Press, 1971.
- [14] HORN, R. Matrix Analysis. Cambridge Press, 1985.
- [15] KEEPIN, C. Physics of Nuclear Kinetics. Massachusetts: Addison-Wesley, 1965.
- [16] LANCZOS, C. Applied Analysis. London: Pitman Publishing, 1957.
- [17] LUENBERG, D. Introduction to Dynamic Systems Theory, Models and Applications. New York: John Wiley, 1979.
- [18] MOLER, C. Matlab User's Guide. New York: Math Works, 1985.
- [19] MOLER, C. and LOAN, C. Nineteen Dubious Ways to Compute the exponential of a matrix. SIAM REVIEW, Philadelphia, v.20, n.4, p.801-836, out.1978.
- [20] PORSCHING, T. Numerical Solution of the Reactor Kinetics Equations by Approximate Exponentials. Nuclear Science and Engineering : 25, 183-188, 1966.

- [21] RALSTON, A. A First Course in Numerical Analysis. New York: McGraw-Hill, 1965.
- [22] REALI, M. A Taylor Series Expansion Technique for Initial Value Nonlinear Ordinary Differential Problems. Int. Conf. on Nonlinear Oscilations. Budapest, 1987.
- [23] SANCHEZ, J. On the Numerical Solution of the Point Reactor Kinetics Equations by Generalized Runge-Kutta Methods. Nuclear Science and Engineering : 103,94-99, 1989.
- [24] SCHULTZ, M. Control of Nuclear Reactors and Power Plants. New York: McGraw-Hill, 2nd edição, 1961.
- [25] VARGA, R. Matrix Iterative Analysis. New Jersey: Prentice-Hall, 1962.
- [26] VIGIL, J. Solution of the Reactor Kinetics Equations by Analytic Continuation. Nuclear Science and Engineering : 29, 392-401, 1967.
- [27] VILHENA, M. Estudo de Difusão de Nêutrons e Calor Dependente do Tempo num Reator a Leito Fluidizado. Tese de Doutorado, PROMEC-UFRGS, 1988.
- [28] YOUNG, D. and GREGORY, R. A Survey of Numerical Mathematics. Massachusetts: Addison-Wesley, 1nd edição, 1972.
- [29] ZWEIFEL, P. Reactor Physics. New York: McGraw-Hill, 1970.