

Cálculo da Exponencial Matricial via Método de Aproximação de Padé do modelo da Cinética Pontual de Nêutrons com reatividade dependente do tempo

Computation of the matrix exponential via Padé approximation method of the neutron point kinetics model with time-dependent reactivity

Fernanda Tumelero¹, Marcelo Schramm², Claudio Zen Petersen³

RESUMO

Neste trabalho, apresenta-se a solução das Equações da Cinética Pontual de Nêutrons através do Método da Aproximação de Padé. Por meio desta metodologia, resolve-se a exponencial da matriz dos coeficientes das equações citadas, superando sua rigidez característica. Consideram-se seis grupos de precursores de nêutrons atrasados nos modelos, para diferentes tipos de reatividades: constante, rampa, quadrática, senoidal e zig-zag. Para os casos com dependência temporal, utiliza-se o *Piecewise Constant Approximation*, que consiste em aproximar a reatividade por um valor constante em um pequeno passo de tempo, juntamente com a continuação analítica, que usa a solução do passo anterior como condição inicial do próximo intervalo. Comparam-se os resultados obtidos com os existentes na literatura através de gráficos e tabelas. Além disso, aborda-se também a questão do tempo computacional e analisa-se o termo residual, utilizando a própria equação diferencial e a norma do máximo como estimativa para o controle do erro.

Palavras-chave: Cinética Pontual de Nêutrons. Continuação Analítica. Método da Aproximação de Padé. Piecewise Constant Approximation.

ABSTRACT

In this work, a solution of the Neutron Point Kinetics Equations is presented using the Padé Approximation Method. Through this methodology, the matrix exponential of the coefficients of the aforementioned equations is solved, overcoming its stiffness characteristic. Six groups of delayed neutron precursors are considered in this model for different types of reactivities: constant, ramp, quadratic, sinusoidal and zig-zag. For cases with temporal dependency, Piecewise Constant Approximation is used. It consists in approximating reactivity by a constant value in a short time interval together with the analytical continuation, which uses the solution from the previous step as initial condition to the next interval. The results obtained are compared with those in the literature using graphs and tables. In addition, the issue of computational time is also handled and the residual term is analyzed, using the differential equation itself and the maximum norm as an estimate for error control.

Keywords: Analytical Continuation. Neutron Point Kinetics. Padé Approximation Method. Piecewise Constant Approximation.

¹ Dra. em Engenharia Mecânica pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Pós-doutoranda no PPGMMat da Universidade Federal de Pelotas (UFPEL).

E-mail:
fernanda.tumelero@yahoo.com.br

ORCID: 0000-0001-8905-7860

² Dr. em Engenharia Mecânica pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Docente na Universidade Federal de Pelotas (UFPEL).

ORCID: 0000-0002-0254-4277

³ Dr. em Engenharia Mecânica pela Universidade Federal do Rio Grande do Sul. Docente na Universidade Federal de Pelotas (UFPEL).

ORCID: 0000-0002-4720-6888

1. INTRODUÇÃO

Para suprir o aumento do consumo de energia elétrica, evitando impactos ambientais causados pelo emprego de combustíveis fósseis, é de suma importância promover estudos no campo da física de reatores nucleares. Uma das questões imprescindíveis é dispor de segurança e controle dos reatores. Por isso, necessita-se compreender todos os parâmetros que envolvem as reações no núcleo do reator para então constituir um balanço entre as perdas e produções de nêutrons. Algum desvio dessa condição de balanço resultará em uma dependência temporal da população de nêutrons e, conseqüentemente, uma variação temporal da potência do reator.

As equações que modelam o comportamento de um reator cuja densidade ou fluxo variam com o tempo chamam-se Equações da Cinética de Nêutrons. Neste trabalho estamos interessados nas Equações da Cinética Pontual de Nêutrons (ECPN), que determinam o comportamento da amplitude do fluxo de nêutrons com o tempo admitindo total separabilidade no tempo e espaço, cuja forma do fluxo espacial de nêutrons é conhecida, tornando essas equações exclusivamente dependentes do tempo (PETERSEN, 2011). Além disso, as ECPN correspondem a um sistema linear de equações diferenciais ordinárias do tipo rígidas para a densidade de nêutrons e concentração de precursores de nêutrons atrasados. Além do mais, as soluções das ECPN fornecem informações oportunas sobre a comportamento transiente de um reator nuclear em operação e são úteis, por exemplo, para entender as flutuações de potência ao longo do tempo, que ocorrem durante a inicialização ou desligamento do reator e devido a ajustes das barras de controle. A inclusão de dependência temporal no parâmetro cinético da reatividade, que mede o afastamento da criticalidade, juntamente com a rigidez intrínseca do problema, torna difícil a obtenção de uma solução puramente analítica. Muitos autores como o Kinard & Allen (2004), Espinosa-Paredes et al. (2011), Leppanen et al. (2014), Ganapol (2013), Patra & Saha Ray (2014), Tumelero (2015), Tumelero et al. (2016) enfatizam que as ECPN continuam sendo objeto de estudo por sua importância em física de reatores. Nesse sentido, foram desenvolvidos e aprimorados inúmeros métodos analíticos, híbridos e numéricos para resolver as ECPN ao longo do tempo. Dentre esses podemos citar os trabalhos de Sanchez (1989), Quintero-Leyva (2008), Aboanber & Nahla (2002a), Aboanber & Nahla (2002b), Aboanber & Nahla (2004), Nahla (2011), Picca et al. (2013) e Silva et al. (2014).

O grande desafio em resolver as ECPN quando a reatividade é dependente do tempo é o cálculo da exponencial matricial. Neste trabalho busca-se obter um método eficiente e preciso para as ECPN, considerando 6 grupos de precursores de nêutrons atrasados e reatividade dependente do tempo, utilizando o Método da Aproximação de Padé (MAP). A ideia aqui é que essa exponencial seja calculada pelos aproximantes de Padé, a fim de encontrar qual combinação de graus dos polinômios (numerador e denominador) do aproximante fornece o melhor resultado em termos de eficiência e precisão. Além disso, estamos cientes que para garantir a convergência e estabilidade do método é necessário fazer uso da continuação analítica em conjunto com Aproximação Constante por Partes (*Piecewise Constant Approximation* - PCA) (GANAPOL & PICCA, 2015), a fim de manter a convergência controlada e estabilidade da proposta. Essas duas técnicas em conjunto com o MAP tornam-se uma alternativa competitiva e viável para resolver os casos de reatividades dependentes do tempo. Por fim, é importante salientar que, para a abordagem dos aproximantes de Padé, os trabalhos de Arioli et al. (1996) e Aguilera-Navarro et al. (1999) já analisaram e identificaram o método de Padé como uma boa alternativa para calcular a exponencial de uma matriz real. Mais precisamente, estudaram o erro de arredondamento introduzido pelo método no caso geral e em três casos especiais. Para todos os casos verificaram que o método de Padé é estável.

2. METODOLOGIA

Partindo das Equações da Cinética Pontual de Nêutrons

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

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

para $i = 1, 2, \dots, 6$, em que ρ é a reatividade; β é a fração de nêutrons atrasados; Λ é o tempo médio de geração, em s; λ_i é a constante de decaimento de precursores do grupo i , em s^{-1} ; β_i é a fração de nêutrons atrasados do grupo i ; n é a densidade de nêutrons, em cm^{-3} ; C_i é a concentração de precursores de nêutrons atrasados do grupo i , em cm^{-3} ; e t é a variável temporal, em s. As equações (1) estão sujeitas às condições iniciais

$$n(0) = n_0, \quad C_i(0) = \frac{\beta_i}{\lambda_i \Lambda} n_0 = C_{i0}, \quad (2)$$

para $i = 1, 2, \dots, 6$. As equações (1) podem ser reescritas na forma matricial da seguinte maneira: $x'(t) = A(t)x(t)$, onde $x(t) = [n(t) \ C_1(t) \ C_2(t) \ \dots \ C_6(t)]^T$ e

$$A(t) = \begin{bmatrix} \frac{\rho(t)-\beta}{\Lambda} & \lambda_1 & \lambda_2 & \dots & \lambda_6 \\ \frac{\beta_i}{\Lambda} & \lambda_1 & 0 & \dots & 0 \\ \frac{\beta_i}{\Lambda} & 0 & \lambda_1 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\beta_i}{\Lambda} & 0 & 0 & \dots & \lambda_1 \end{bmatrix}.$$

A solução desse sistema matricial é $x(t) = \exp \left(\int_0^t A(\tau) d\tau \right) x_0$, em que $x_0 = x(0)$ é a condição inicial. O desafio é como expressar $\exp \left(\int_0^t A(\tau) d\tau \right)$ de forma eficiente e com precisão, superando a característica de rigidez. O cálculo numérico da exponencial pode não ser bem condicionada, assim pequenas perturbações na matriz podem gerar grandes perturbações no resultado numérico. O presente trabalho propõe calcular a exponencial da matriz através dos aproximantes de Padé, superando as dificuldades citadas.

2.1. Aproximantes de Padé e o Aproximante de Padé da Exponencial Matricial

O método de Padé consiste em aproximar uma determinada função f em uma função racional (razão de polinômios) de forma que coincida com a série de Taylor de f o máximo possível (DE SOUZA, 1993). Dentre essas, estudam-se as aproximações de Padé que são geralmente superiores às séries de Taylor quando as funções contêm polos, porque o uso de funções racionais permite que elas sejam bem representadas. Considera-se a expansão em série de Taylor de $f(z)$ como:

$$f(z) = \sum_{i=0}^{\infty} a_i z^i. \quad (3)$$

Os aproximantes de Padé são funções racionais, ou seja, quocientes de dois polinômios, que são associadas a (3). Na obra de Aguilera-Navarro et al. (1999), esses aproximantes são caracterizados por dois inteiros L e M , graus do numerador e denominador da função racional, respectivamente, da função racional e são representados pela notação $[L/M]_{f(z)}$. Em benefício da notação, o índice $f(z)$ será omitido. Neste caso, o aproximante de Padé $[L/M]$ é definido por:

$$[L/M] = \frac{P_L(z)}{Q_M(z)} = \frac{p_0 + p_1 z + p_2 z^2 + \dots + p_L z^L}{1 + q_1 z + q_2 z^2 + \dots + q_M z^M}, \quad (4)$$

onde P_L e Q_M são primos entre si e os coeficientes de (3) são iguais aos primeiros coeficientes da sua série de potência. Aqui, $q_0 = 1$ é assumido para fins de normalização, ainda que $P_L(z)$ e $Q_M(z)$ possam vir a ser reescalados no fim da obtenção do aproximante. Os coeficientes p_l e q_m da equação (4) são determinados igualando (4) e (3), ou seja:

$$\sum_{i=0}^M a_i z^i - \frac{P_L(z)}{Q_M(z)} = O(z^{L+1}),$$

que garante que $f(z)$ e o aproximante de Padé diferem por termos da ordem de z^{L+1} .

Multiplicando (5) por $Q_M(z)$ e igualando coeficientes de z^i para $i = 0, 1, \dots, L + M$, obtemos relações entre a série de Taylor e o aproximante de Padé de $f(z)$. De maneira geral, os coeficientes de Q_M são obtidos resolvendo o sistema algébrico linear

$$\begin{bmatrix} a_{L-M+1} & a_{L-M+2} & \cdots & a_L \\ a_{L-M+2} & a_{L-M+3} & \cdots & a_{L+1} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_L & a_{L+1} & \cdots & a_{L+M-1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} q_M \\ q_{M-1} \\ \vdots \\ q_1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -a_{L+1} \\ -a_{L+2} \\ \vdots \\ -a_{L+M} \end{bmatrix}$$

em que $a_i = 0$ caso $i < 0$; e os coeficientes de P_L são obtidos pelas fórmulas

$$\begin{aligned} p_0 &= a_0, \\ p_1 &= a_1 + a_0 q_1, \\ p_2 &= a_2 + a_1 q_1 + a_0 q_2, \\ &\vdots \\ p_L &= a_L + a_{\{L-1\}} q_1 + \cdots + a_0 q_L. \end{aligned}$$

Em particular, o aproximante de Padé $[L/M]$ de $\exp(z)$ é dado por (DE SOUZA, 1993)

$$\left[\frac{L}{M} \right] \approx \frac{\sum_{k=0}^L \frac{(L+M-k)!}{(L+M)!} \frac{L!}{(L-k)!} \frac{(z)^k}{k!}}{\sum_{k=0}^M \frac{(L+M-k)!}{(L+M)!} \frac{M!}{(M-k)!} \frac{(-z)^k}{k!}}.$$

2.2. Solução das ECPN por PCA utilizando aproximante de Padé

A técnica PCA consiste em segmentar o domínio temporal e considerar os parâmetros transientes como constantes em cada segmento (PICCA ET AL., 2013). A solução no fim de cada segmento é utilizada como condição inicial do próximo, caracterizando a chamada continuação analítica. No caso das ECPN, a reatividade é constante em cada intervalo de tempo, e a solução em um determinado intervalo é dada por $x_j(t) = \exp(A_j(t - t_j)x_{0j})$, válida para o j -ésimo segmento $t_j \leq t \leq t_{j+1}$, $x_j(t)$ é a solução $x(t)$ para o j -ésimo segmento, $x_{\{0j\}} = x_{j-1}(t_j)$ e A_j é obtida considerando um valor constante para ρ , $\rho(t_i^*)$ para $t_i \leq t_i^* \leq t_{i+1}$. Aqui, $\exp(A_j(t - t_j))$ é obtida pelo aproximante de Padé $[L/M]$, dado por (7), simplificado e reescrito em forma matricial como:

$$[L/M] = \left(\sum_{k=0}^L \frac{L!(L+M-k)!}{k!(L-k)!} (A_j(t - t_j))^k \right) \left(\sum_{k=0}^M \frac{M!(L+M-k)!}{k!(M-k)!} (-A_j(t - t_j))^k \right)^{-1}.$$

2.3. Controle do erro

Para estudar a precisão da solução desenvolve-se um critério para a qualidade da solução em todo o domínio, especialmente para os casos dependentes do tempo em que se utiliza o *Piecewise Constant Approximation* e a continuação analítica. Para isso, emprega-se o sistema de equação diferencial original junto com a norma do máximo, a fim de determinar o termo residual, pois sendo um valor suficientemente pequeno, representa um critério necessário para a convergência. Os termos residuais, os quais são definidos abaixo, mostram se os coeficientes encontrados para a aproximação resultam na menor norma do máximo, ou seja, mais próxima da solução verdadeira. Considerando (LADEIA et al., 2019, TUMELERO et al., 2019):

$$\Omega [f_{exata}] = 0, \quad (8)$$

onde $\Omega[\cdot]$ é o operador da equação diferencial original com todos os termos levados ao lado esquerdo da equação igualada a zero e f_{exata} é sua solução exata. Ou seja, substituindo a solução exata dentro da equação diferencial obtém-se a identidade $0 = 0$ para todo o domínio de f_{exata} .

No método proposto, a solução encontrada não é exata, pois a ordem da aproximação de Padé coincide com a série de Taylor apenas até certo grau. Nesse caso, a solução aproximada f_{aprox} gera um termo residual que pode ser maior ou menor que zero. A utilização da norma do máximo para a Equação (8), mas com a solução aproximada obtida, gera um termo residual positivo, $\|\Omega [f_{aprox}]\|_{\infty} = T_{RE}$, onde T_{RE} é o termo residual do erro. O termo residual é uma grandeza próxima de zero, tomando o máximo valor onde f_{aprox} está definida. Sabe-se que mesmo sendo um valor pequeno, os valores de $\Omega [f_{aprox}]$ para os demais pontos de seu domínio serão mais próximos de zero, devido a definição de norma do máximo, obtendo-se uma estimativa para o erro. A condição necessária é então que com o aumento da ordem da aproximação o termo residual descreve uma sequência que convirja para zero.

3. RESULTADOS E DISCUSSÃO

Nesta seção, apresentam-se os resultados numéricos, primeiramente, para casos com reatividade constante, mostrando-se que com o aumento da ordem da aproximação de Padé a solução melhora. A partir dos testes realizados, utiliza-se a melhor aproximação obtida para gerar tabelas e gráficos para diferentes valores de reatividade constante: subcríticos $\rho(t) < 0$ e supercríticos $\rho(t) > 0$. Para todos os casos, consideramos as

condições iniciais $n_0 = 1$. Já para os casos com dependência temporal, estuda-se a influência do passo de tempo para a precisão da solução, já que se utiliza a continuação analítica com o PCA. Com base nesses resultados, apresentam-se gráficos e tabelas para reatividades do tipo rampa, zig-zag e senoidal. Realiza-se um estudo do tempo computacional para os casos acima citados, comparando-se com o método PAM proposto por Tumelero (2015) e Tumelero et al. (2016). Os algoritmos foram desenvolvidos no *software* Scilab 6.0.2. As configurações do computador utilizado são: Processador Intel(R) Core(TM) i5-9600K CPU 3.70GHz, RAM instalada 16,0 GB, 64bits, x64. Analisa-se também o controle do erro do método proposto e compara-se com o PAM (TUMELERO et al.,2016).

3.1. Inserção de Reatividade Constante

Nesta subseção, apresentam-se quatro valores de reatividade constantes: dois subcríticos ($\rho(t) = -1\beta$ e $\rho(t) = -0,5\beta$) e outros dois supercríticos ($\rho(t) = 0,5\beta$ e $\rho(t) = 1\beta$). Os parâmetros nucleares usados são apresentados na Tabela 1.

Tabela 1. Parâmetros cinéticos para um reator térmico I com $\Lambda = 5 \cdot 10^{-4} s$ e $\beta = 0,0075$.

i	1	2	3	4	5	6
β_i	0,000285	0,001597 5	0,001410	0,003052 5	0,00096	0,000195
λ_i	0,0127	0,0317	0,115	0,311	1,40	3,87

Primeiramente, mostra-se na Tabela 2 as soluções para a densidade de nêutrons para o caso $\rho(t) = 1\beta$, fixando o instante $t = 0,1 s$, para diferentes aproximantes de Padé. O intuito é mostrar que com o aumento da ordem da aproximação, a solução melhora a precisão. O valor de referência da literatura é $2,515766141 cm^{-3}$ presente em Ganapol (2013).

Tabela 2. Densidade de nêutrons em cm^{-3} , para $\rho(t) = 1\beta$ no instante $t = 0,1 s$, para diferentes aproximantes de Padé $[L/M]$ da exponencial matricial para várias combinações de L e M .

$[L/M]$	$n(0,1 s)$	$[L/M]$	$n(0,1 s)$	$[L/M]$	$n(0,1 s)$	$[L/M]$	$n(0,1 s)$
[2/1]	2,300140951 8	[2/2]	2,400393985 2	[2/3]	2,570927931 7	[2/4]	2,637726190 9
[3/1]	2,364730022 5	[3/2]	2,424844542 6	[3/3]	2,546125438 2	[3/4]	2,575949193 0
[4/1]	2,160616425 4	[4/2]	2,347625086 2	[4/3]	2,452107172 6	[4/4]	2,514493191 5
[4/5]	2,561862526 0	[5/4]	2,470755792 4	[5/5]	2,515822242 9	[5/6]	2,554854861 8

[6/5]	2,477267746 6	[6/6]	2,515764389 1	[7/7]	2,515766182 5	[8/8]	2,515766140 7
[9/9]	2,5157661414	[9/10]	2,539858584 1	[10/9]	2,491902233 4	[10/10]	2,515766141 4

Nas Tabelas 3, 4, 5 e 6, apresentam-se os valores das densidades de nêutrons com o MAP (última coluna) para diferentes instantes de tempo, comparando com os métodos PAM (TUMELERO et al., 2016) e BEFD (GANAPOL, 2013). A ordem da aproximação de Padé apresentada para cada caso fornece valores da densidade com mesma precisão do método BEFD, considerado *benchmark* na literatura. Na Figura 1, apresentam-se os gráficos para cada um dos casos constantes abordados. Na Tabela 7, apresentam-se os tempos computacionais dos casos de inserção constante de reatividade para os métodos PAM para $\Delta t = 10^{-4} s$ e MAP. Neste aspecto percebe-se que nos casos que a reatividade assume valores constantes o desempenho computacional da metodologia proposta neste trabalho é bastante superior a comparação feita com a literatura, gerando resultados quase que instantaneamente. Ainda nas Tabelas 3, 4, 5 e 6, apresentam-se os valores dos termos residuais de erro T_{RE} para os métodos PAM e MAP, conforme estudo explicado anteriormente na equação (9). Para os casos constantes de reatividade, o método dos aproximantes de Padé mostra-se mais preciso que o método da aproximação polinomial (PAM). Vale ainda destacar que o valor dos termos residuais é numericamente insignificante para todos os casos.

Tabela 3. Inserção de reatividade constante $\rho = -1\beta$. PAM com $\Delta t = 10^{-4} s$ e MAP com aproximante [20/20].

t [s]	$n(t)$ [cm^{-3}]			T_{RE}	
	PAM	BEFD	MAP	PAM	MAP
0,1	0,5205640 66	0,5205642866	0,5205642866	2,20897D - 03	0,00000D + 00
1,0	0,43333344 5	0,4333334453	0,4333334453	2,47319D - 06	1,77636D - 15
10,0	0,23611065 1	0,2361106508	0,2361106508	1,14934D - 07	8,88178D - 16
100,0	0,0286676 42	0,0286676424 5	0,0286676424 5	1,12287D - 09	2,22045D - 16

Tabela 4. Inserção de reatividade constante $\rho = -0,5\beta$. PAM com $\Delta t = 10^{-4} s$ e MAP com aproximante [17/17].

$n(t)$ [cm^{-3}]	T_{RE}
----------------------	----------

$t [s]$	$n(t) [cm^{-3}]$			T_{RE}	
	PAM	BEFD	MAP	PAM	MAP
0,1	0,6989250 94	0,6989252256	0,6989252256	1,73875D - 03	0 00000D + 00
1,0	0,6070535 66	0,6070535656	0,6070535656	2,12321D - 06	1,77636D - 15
10,0	0,3960776 91	0,3960776907	0,3960776907	1,13658D - 07	1,77636D - 15
100,0	0,07158285 4	0,0715828544 4	0,0715828544 4	1,97155D - 09	0,00000D + 00

Tabela 5. Inserção de reatividade constante $\rho = 0,5\beta$. PAM com $\Delta t = 10^{-4} s$ e MAP com aproximante [13/13].

$t [s]$	$n(t) [cm^{-3}]$			T_{RE}	
	PAM	BEFD	MAP	PAM	MAP
0,1	1,533112714	1,533112646	1,533112646	2,44638D - 03	1,77636D - 15
1,0	2,51149429 3	2,511494291	2,511494291	3,83875D - 06	3,55271D - 15
10,0	14,2150252 4	14,21502524	14,21502524	4,29273D - 05	1,42109D - 14
100,0	80061435,7 6	80061435,62	80061435,62	2,38264D + 02	0,00000D + 00

Tabela 6. Inserção de reatividade constante $\rho = 1\beta$. PAM com $\Delta t = 10^{-4} s$ e MAP com aproximante [9/9].

$t [s]$	$n(t) [cm^{-3}]$			T_{RE}	
	PAM	BEFD	MAP	PAM	MAP
0,1	2,515766171	2,515766141	2,515766141	9,18050D - 04	1,77636D - 15
0,5	10,3625340	10,36253381	10,36253381	-	-
1,0	32,1835419	32,18354095	32,18354095	1,37653D - 02	0,00000D + 00
10,0	324,6979823	324,6978898	324,6978898	1,35663D + 06	9,53674D - 07
100,0	2,59649204D + 89	2,596484646D + 89	2,596484647D + 89	1,08485D + 86	1,13078D + 74

Tabela 7. Tempos computacionais [s] de PAM e MAP para obter $n(100 s)$ nos casos de inserção constante de reatividade.

	$\rho = -1\beta$	$\rho = -0,5\beta$	$\rho = 1\beta$	$\rho = 1\beta$
PAM	41, 23	41, 94	45,44	43,23
MAP	0, 21	0, 15	0,09	0,05

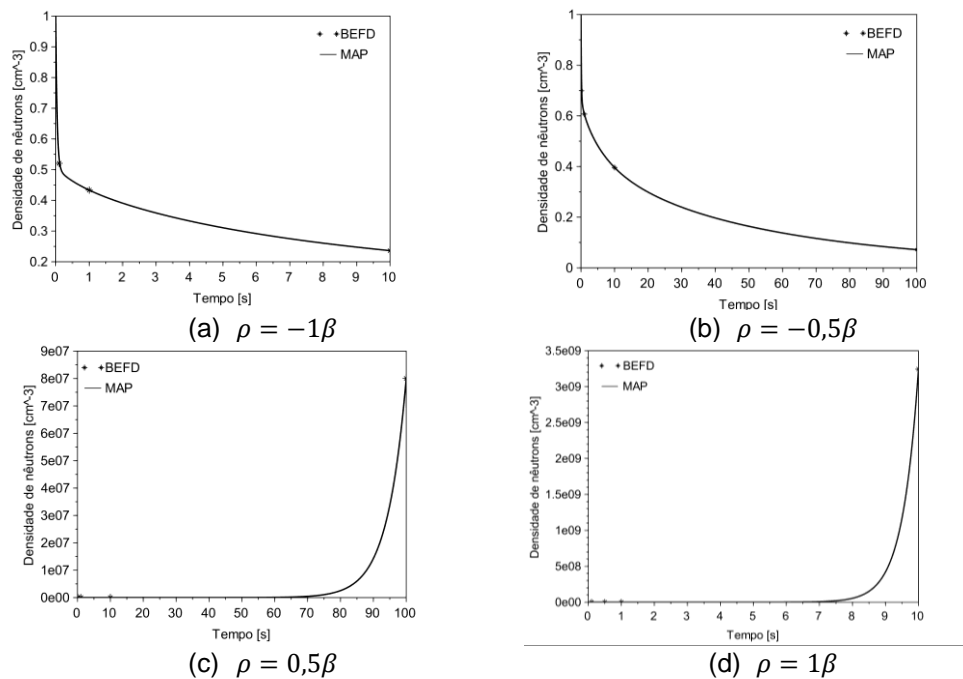


Figura 1. Densidade de nêutrons para os casos com reatividade constante, com (a) $\rho = -1\beta$, (b) $\rho = -0,5\beta$, (c) $\rho = 0,5\beta$ e (d) $\rho = 1\beta$

3.2. Reatividade Rampa

Iniciando os casos com dependência temporal, resolvem-se as equações com uma inserção de reatividade linear $\rho(t) = at$, onde $a = 0,1 s = 0,1\beta s^{-1}$. Os parâmetros nucleares usados são apresentados na Tabela 8.

Tabela 8. Parâmetros cinéticos para um reator térmico II com $\Lambda = 2 \cdot 10^{-5} s$ e $\beta = 0,007$.

i	1	2	3	4	5	6
β_i	0,000266	0,001491	0,001316	0,002849	0,00089 6	0,000182
λ_i	0,0127	0,0317	0,115	0,311	1,40	3,87

Lembrando que, para todos casos com dependência temporal da reatividade, utiliza-se o PCA e continuação analítica. Então, como o domínio temporal é dividido em pequenos passos de tempo, as tabelas apresentarão o valor do tamanho do passo. Como a exponencial da matriz é aproximada pelo método de Padé para um intervalo muito pequeno, a ordem do numerador e denominador não necessitam ser altas para obter um resultado com precisão. Para observar o que foi afirmado, na Tabela 9, varia-se o valor do passo de tempo Δt fixando a ordem de Padé em [4/4], para o caso rampa, em comparação com os resultados de PAM para $\Delta t = 10^{-4} s$ (TUMELERO et al., 2016). Também se apresenta, na última linha da tabela, o tempo computacional que aumenta substancialmente com a diminuição do passo de tempo, comparado as demais metodologias e aos casos constantes, devido à partição do domínio temporal em pequenos intervalos e o uso de

continuação analítica.

Tabela 9. Densidade de nêutrons [cm^{-3}] através do método MAP [4/4] para inserção de reatividade rampa para diferentes valores de Δt em comparação com PAM ($\Delta t = 10^{-4} s$) e seus tempos computacionais (T_c).

$t [s]$	PAM	$\Delta t = 10^{-3} s$	$\Delta t = 10^{-4} s$	$\Delta t = 10^{-5} s$	$\Delta t = 10^{-6} s$	
2	1,338200050	1,33832504	1,33821290	1,33819876	1,33820018	
4	2,228441895	2,22880476	2,22847876	2,22843820	2,22844227	
6	5,582052438	5,58380246	5,58222888	5,58207011	5,58205421	
8	42,78629544	42,8215078	42,78982637	42,78594254	42,7863311	
10	451164,0975	453956,9770	451442,2139	451135,7730	451166,407	
11	1,792327126D + 16	1,82737102D + 16	1,79569852D + 16	1,79256178D + 16	1,79224836D + 16	
T_c	11	8,63 s	34,20 s	318,65 s	4616,72 s	271616,35 s

Na Tabela 10, apresenta-se a densidade de nêutrons utilizando o MAP (última coluna) para diferentes instantes de tempo, comparando com os métodos PAM (TUMELERO et al., 2016) e BEFD (GANAPOL, 2013). Na Figura 2(a), ilustram-se os resultados com a reatividade rampa de 0 a 8 segundos.

Tabela 10. Inserção de reatividade rampa $\rho = at$. PAM com $\Delta t = 10^{-4} s$ e MAP [4/4] e $\Delta t = 10^{-5} s$.

$t [s]$	$n(t) [cm^{-3}]$			T_{RE}	
	PAM	BEFD	MAP	PAM	MAP
2	1,33820005	1,338200050	1,33819876	4,67172D - 03	8,84149D - 02
4	2,228441895	2,228441897	2,22843820	7,75369D - 03	4,31107D - 01
6	5,582052438	5,582052449	5,58207011	1,91800D - 02	2,76706D + 00
8	42,78629544	42,78629573	42,78594254	1,33600D - 01	6,54021D + 01
10	451164,0975	451163,6239	451135,7730	6,07515D + 03	5,52457D + 06
11	1,792327126D + 16	1,792213607D + 16	1,79256178D + 16	2,68886D + 15	6,94532D + 17

Na última linha das Tabela 10, exibe-se o tempo computacional para os métodos PAM e MAP. Nota-se que, devido ao tratamento realizado para resolver a dependência do tempo da reatividade, o tempo computacional se torna inferior ao método PAM. Isto se justifica pelo fato de que agora é necessário calcular os coeficientes do numerador e denominador da aproximação de Padé para a exponencial da matriz em cada intervalo de tempo. Enquanto que, no método PAM também se calculam os coeficientes em cada intervalo, porém, este utiliza uma aproximação por polinômio de primeiro grau, ou seja, são menos coeficientes para se determinar. Ainda na Tabela 10, apresentam-se os valores dos termos residuais T_{RE} para os métodos PAM e MAP, conforme equação (9). Para o caso rampa, o

método dos aproximantes de Padé [4/4] mostra-se menos preciso que o método da aproximação polinomial (PAM).

3.3. Reatividade Zig-Zag

A reatividade zig-zag é definida como

$$\rho(t) = \begin{cases} 0,0075t & 0 \leq t \leq 0,5 \\ -0,0075(t - 0,5) + 0,00375 & 0,5 < t \leq 1 \\ 0,0075(t - 1) & 1 < t \leq 1,5 \\ 0,00375 & t > 1,5 \end{cases}$$

para t em segundos. Os parâmetros nucleares utilizados são os mesmos apresentados na Tabela 1. Comparam-se os resultados com o método *Enhanced Piecewise Constant Approximation* (EPCA) apresentado em Picca et al. (2013) e com o método PAM (TUMELERO et al., 2016). Na Tabela 11 e na Figura 2(b) são exibidos os resultados numéricos e graficamente, respectivamente, para a densidade de nêutrons. Na última linha das Tabela 11, apresenta-se o tempo computacional e os valores dos termos residuais de erro T_{RE} para os métodos PAM e MAP, conforme equação (9). As considerações para o caso zig-zag são as mesmas observadas no caso de reatividade rampa.

Tabela 11. Inserção de reatividade zig-zag. PAM com $\Delta t = 10^{-4}$ s e MAP com aproximante [4/4] e $\Delta t = 10^{-5}$ s e seus tempos computacionais (T_c) para obter $n(100$ s).

t [s]	$n(t)$ [cm^{-3}]			T_{RE}	
	PAM	EPCA	MAP	PAM	MAP
0,5	1,721422393	1,721422422	1,721408393	1,73120D - 03	1,36275D + 00
1	1,211127399	1,211127415	1,211134483	2,07015D - 03	1,62475D + 00
1,5	1,892226104	1,892226140	1,892241283	1,90874D - 03	2,43368D + 00
2,0	2,521600526	2,521600530	2,521596896	3,79312D - 05	3,40584D - 02
10,0	12,04710533	12,04710535	12,04709464	3,65024D - 05	1,03716D + 00
100,0	68155568,86	68155568,88	68155627,58	2,02832D + 02	1,10762D + 07
T_c	43,50 s	-	25144,99 s		

3.4. Reatividade Senoidal

A reatividade senoidal é definida como $\rho(t) = 0,00073 \text{ sen}(t)$ para t em segundos. Os parâmetros nucleares usados são apresentados na Tabela 12. A densidade de nêutrons de 0 a 10 segundos é apresentada na Tabela 13 e na Figura 2(c) para MAP com aproximante [4/4] e $\Delta t = 10^{-5}$ s, comparando-se com os trabalhos da literatura Petersen et al. (2011), que utiliza o método da Decomposição, e Tumelero et al. (2016), o método PAM.

Tabela 12. Parâmetros cinéticos para um reator térmico II com $\Lambda = 3 \cdot 10^{-5} s$ e $\beta = 0,006473$.

i	1	2	3	4	5	6
β_i	0,000214	0,001423	0,001247	0,002568	0,00074 8	0,000273
λ_i	0,0127	0,031	0,115	0,311	1,40	3,87

Na última linha das Tabela 13, apresenta-se o tempo computacional para os métodos PAM e MAP, e os valores dos termos residuais T_{RE} para os métodos PAM e MAP. As considerações para o caso senoidal são as mesmas observadas nos casos anteriores.

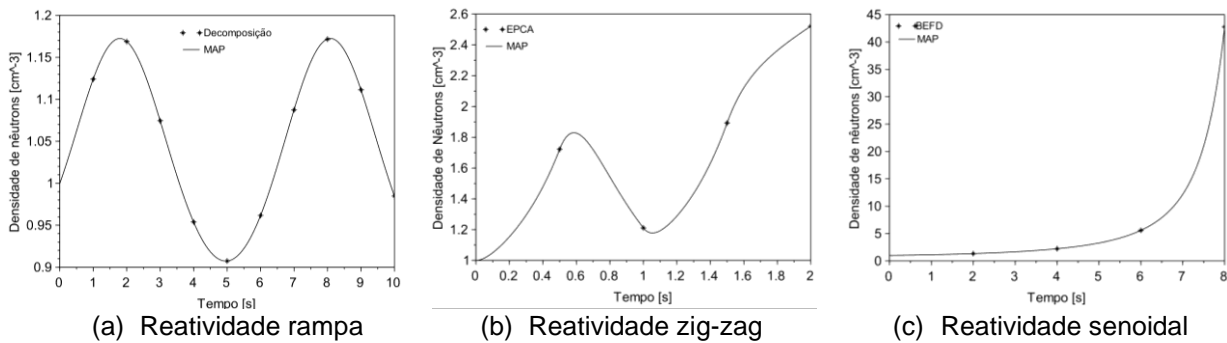


Figura 1. Densidade de nêutrons para os casos com reatividade dependentes de t

Tabela 13. Inserção de reatividade senoidal. PAM com $\Delta t = 10^{-4} s$ e MAP com aproximante [4/4] e $\Delta t = 10^{-5} s$ e seus tempos computacionais (T_c) para obter $n(10 s)$.

$t [s]$	$n(t) [cm^{-3}]$			T_{RE}	
	PAM	Decomposição	MAP	PAM	MAP
1	1, 123940509	1, 12394	1, 123939957	1, 48648D - 03	1, 38741D - 02
2	1, 16888959	1, 16884	1, 168889756	1, 16740D - 03	1, 17645D - 01
3	1, 074484703	1, 07442	1, 074484047	2, 58627D - 03	1, 56082D - 01
4	0, 953829290	0, 95380	0, 953829755	1, 52537D - 03	8, 12870D - 02
5	0, 907353490	0, 90737	0, 907353472	6, 15674D - 04	1, 07164D - 01
6	0, 961539576	0, 96158	0, 961540081	2, 23846D - 03	1, 07164D - 01
7	1, 087458911	1, 08749	1, 087459565	1, 99901D - 03	1, 18373D - 03
8	1, 171671274	1, 17164	1, 171671198	3, 97851D - 04	6, 36726D - 03
9	1, 111304437	1, 11124	1, 111305028	2, 45702D - 03	1, 30507D - 01
10	0, 984680323	0, 98464	0, 984680889	2, 01685D - 03	1, 11460D - 01
T_c	6, 77 s	-	2516, 47 s		

5. CONCLUSÃO

Neste trabalho, resolvem-se as equações da Cinética Pontual de Nêutrons através do

método dos Aproximantes de Padé. Para os casos com dependência do tempo, aproximou-se a reatividade por um valor constante em pequenos intervalos de tempo, juntamente com a continuação analítica. O primeiro fato a se destacar é que, para todos casos estudados, a metodologia supera a rigidez do problema, causada pela grande diferença nas escalas de tempo dos nêutrons prontos e atrasados. Os resultados encontrados, quanto à qualidade da solução, são precisos. Para os casos constantes, obteve-se excelentes resultados com insignificantes termos residuais e com mesmo número de dígitos significativos que os métodos considerados *benchmarks* na literatura. Nota-se também que o custo computacional para os mesmos casos é excelente, gerando resultados quase que instantaneamente. Já para os casos em que a reatividade depende do tempo, nos quais necessitou-se uma repartição do domínio temporal em pequenos intervalos aproximando a reatividade por um valor constante em cada um deles, tanto a precisão quanto o tempo computacional foram prejudicados. Porém, a abordagem permitiu solucionar o problema rígido, com variação temporal de um dos parâmetros, mostrando-se assim, a complexidade inerente. As soluções dos casos com dependência temporal necessitam de um tempo computacional maior que o método utilizado para comparação (TUMELERO et al., 2016) devido à necessidade de se determinar mais coeficientes para a aproximação em cada pequeno passo de tempo. No entanto, vale destacar que foram obtidos resultados com boa precisão. Quanto a comparação de diversos tipos de aproximantes dados pela Tabela 2, um curioso fato é que, por exemplo, o aproximante $[4/4]$ é mais preciso que $[4/5]$ ou o $[5/4]$, recuperando a precisão no aproximante $[5/5]$. Ou seja, aumentar o grau do polinômio do numerador ou do denominador sozinho não necessariamente aumenta a precisão dos resultados, mas ao aumentar ambos juntos fazendo $L = M$, a precisão aumenta. Isso se repete para as demais “diagonais”. Este fato pode ser observado na tabela numérica e, apesar de não ter sido mostrada nenhuma prova matemática deste fato, os autores escolheram (e recomendam) o uso de aproximantes $[L/M]$ em que $L = M$.

Como perspectivas futuras, pretende-se estudar abordagens diferentes para tratar a reatividade variando no tempo, em vista de reduzir o tempo computacional e melhorar ainda mais a precisão. Além disso, pretende-se ainda abordar problemas não lineares, como os que consideram retroalimentação de temperatura ou geração de venenos.

REFERÊNCIAS

ABOANBER, A. E. AND NAHLA, A. A. Generalization of the analytical inversion method for the solution of the point kinetics equations, **Journal of Physics A: Mathematical and**

General, v. 35, n. 14, p. 3245-3263, 2002a.

ABOANBER, A. AND NAHLA, 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**, v. 35, n. 45, p. 9609, 2002b.

ABOANBER, A. AND NAHLA, A. On Padé approximations to the exponential function and application to the point kinetics equations, **Progress in Nuclear Energy**, v. 44, n. 4, p. 347–368, 2004.

AGUILERA-NAVARRO, M. C. K., AGUILERA-NAVARRO, V., FERREIRA, R. AND TERAMON, N. Os aproximantes de Padé, **Matemática Universitária**, v. 26/27, p. 49-66, 1999.

ARIOLI, M., CODENOTTI, B. AND FASSINO, C. The Padé method for computing the matrix exponential, **Linear Algebra and its Applications**, v. 240, p. 111–130, 1996.

DE SOUZA, J. A. **Cálculo numérico da exponencial de uma matriz**, Dissertação de mestrado, UFSC, Florianópolis/SC, 1993.

ESPINOSA-PAREDES, G., POLO-LABARRIOS, M.-A., ESPINOSA-MARTINEZ, E.-G. AND DEL VALLE-GALLEGOS, E. Fractional neutron point kinetics equations for nuclear reactor dynamics, **Annals of Nuclear Energy**, v.38, n. 2-3, p. 307–330, 2011.

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

GANAPOL, B. D. AND PICCA, P. A modified piecewise constant approximation for solution to the point kinetics equations, **Transactions of the American Nuclear Society**, v.113, p. 1167–1170, 2015.

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

LADEIA, C. A., BODMANN, B. E. J. AND VILHENA, M. T. (2019). **On the Integro-Differential Radiative Conductive Transfer Equation: A Modified Decomposition Method**, *Integral Methods in Science and Engineering*. Birkhäuser, Cham, p. 197–210.

LEPPANEN, J., AUFIERO, M., FRIDMAN, E., RACHAMIN, R. AND VAN DER MARCK, S. Calculation of effective point kinetics parameters in the serpent 2 Monte Carlo code, **Annals of Nuclear Energy**, v.65, 2014.

NAHLA, A. A. Taylor's series method for solving the nonlinear point kinetics equations, **Nuclear Engineering and Design**, v. 241 n. 5, p. 1592–1595, 2011.

PATRA, A. AND SAHA RAY, S. Numerical simulation based on haar wavelet operational method to solve neutron point kinetics equation involving sinusoidal and pulse reactivity, **Annals of Nuclear Energy**, v. 73, 2014.

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. AND RAVETTO, P. An analytical solution

of the point kinetics equations with time-variable reactivity by the decomposition method, **Progress in Nuclear Energy**, v. 53 n. 8, p. 1091–1094, 2011.

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

QUINTERO-LEYVA, B. Core: a numerical algorithm to solve the point kinetics equations, **Annals of Nuclear Energy**, v. 35, p. 2136–2138, 2008.

SANCHEZ, J. On the numerical solution of the point reactor kinetics equations by generalized Runge-Kutta methods, **Nuclear Science and Engineering**, v. 103, p. 94–99, 1989.

SILVA, M. W., LEITE, S. B., VILHENA, M. T. AND BODMANN, B. E. J. On an analytical representation for the solution of the neutron point kinetics equation free of stiffness, **Annals of Nuclear Energy**, v.71, p. 97–102, 2014.

TUMELERO, F. **Solução das equações da cinética pontual de nêutrons com e sem realimentação de temperatura pelo método da aproximação polinomial**, Dissertação de mestrado — PPGMat/UFPEL, Pelotas/RS, 2015.

TUMELERO, F., BODMANN, B., VILHENA, M. T. AND LAPA, C. M. F. On the solution of the neutron diffusion kinetic equation in planar geometry free of stiffness with convergence analysis, **Annals of Nuclear Energy**, v. 125, p. 272–282, 2019.

TUMELERO, F., PETERSEN, C. Z., GONÇALVES, G. A. AND SCHRAMM, M. Polynomial approach method to solve the neutron point kinetics equations with use of the analytic continuation, **Kerntechnik**, v. 81, p. 662–670, 2016.