

APERFEIÇOAMENTO DO MÉTODO DE CONFINAMENTO DA RIGIDEZ PARA A
SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DA CINÉTICA PONTUAL

Anderson Lupo Nunes

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS
PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE
FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM CIÊNCIAS
EM ENGENHARIA NUCLEAR.

Aprovada por :

Prof. Aquilino Senra Martinez, D.Sc.

Prof. Fernando Carvalho da Silva, D.Sc.

Prof. Antonio Carlos Marques Alvim, Ph.D.

Prof. Antônio Carlos de Abreu Mól, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

JULHO DE 2006

NUNES, ANDERSON LUPO

Aperfeiçoamento do Método de Confinamento da Rigidez para a solução das Equações da Cinética Pontual [Rio de Janeiro] 2006

VII, 100 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ, M.Sc., Engenharia Nuclear, 2006)

Dissertação - Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE

1.Cinética Pontual

2.Solução de Equações Diferenciais

3.Métodos Numéricos

I. COPPE/UFRJ II. Título(série)

Dedico este trabalho
aos meus pais
Jorge (in memoriam) e Lúcia
e a minha esposa Cláudia.

Agradeço a essa Consciência Cósmica Universal, a qual simplesmente podemos chamar de Deus, que nos deu de presente o planeta mais bonito do sistema solar.

Agradeço aos grandes mestres da Ciência que deixaram uma imensa obra onde foi possível absorver todo esse doce néctar do saber. Pelos seus livros e pelos seus exemplos de disciplina e persistência em se atingir um objetivo.

Agradeço aos meus pais pelo amor e carinho que dedicaram a mim. Agradeço a minha mãe pelas horas de sono perdidas e por cada lágrima derramada nas lutas diárias pelo sagrado direito de criar e educar os filhos.

Agradeço aos colegas Alessandro, Flamarion, Daniel, entre outros, por compartilharem comigo a sublime alegria do aprendizado. Agradeço aos servidores Joel e Eugênio pela paciência e prestimosidade em apoiar a todos os alunos que trabalharam, trabalham e trabalharão no LMP e que dessa forma tanto orgulham a classe dos trabalhadores em educação da UFRJ.

Um especial agradecimento é destinado ao professor Aquilino. Por cada "não" que me fez corrigir os rumos, por cada "talvez" que me fez voar além dos horizontes vislumbrados e por cada "sim" de incentivo capaz de me fazer sentir coroado pelo êxito de cada etapa vencida.

Não pode faltar um agradecimento ao professor Fernando Carvalho pelo incentivo e por toda a sua dedicação em simplesmente ensinar.

Por fim deixo um agradecimento constante e eterno pela pessoa que mais tem me incentivado e me dado todas as condições de obter o sucesso. Pela paciência em suportar o meu mau humor. Pelo carinho em ouvir minhas lamentações e meus júbilos, sem compreender plenamente os "detalhes técnicos". Pela força que me sustenta e pelo amor que me renova. Deixo aqui registrado o agradecimento a minha esposa Cláudia.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

APERFEIÇOAMENTO DO MÉTODO DE CONFINAMENTO DA RIGIDEZ PARA A
SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DA CINÉTICA PONTUAL

Anderson Lupo Nunes

Julho/2006

Orientadores: Aquilino Senra Martinez
Fernando Carvalho da Silva

Programa: Engenharia Nuclear

O objetivo principal deste trabalho consiste em implementar e aperfeiçoar o método de confinamento da rigidez, usualmente chamado de SCM, utilizado para obter a solução das Equações da Cinética Pontual. Este método desacopla as equações de modo que possam ser resolvidas de forma diferenciada. A parte correspondente à potência é resolvida com um passo menor do que a parte correspondente aos precursores. O modo de resolução pode ser analítico ou numérico. É feito um estudo sobre os diversos modos possíveis de resolução, buscando definir qual é o mais preciso e qual é o que tem o menor gasto de tempo computacional. Consideram-se quatro aplicações que já foram tratadas na literatura. Os resultados são obtidos e apresentados de forma clara, sendo comparados entre si e com resultados de trabalhos similares existentes na literatura.

Abstract of Dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

IMPROVEMENT OF THE STIFFNESS CONFINEMENT METHOD FOR SOLVING
THE POINT KINETICS EQUATIONS

Anderson Lupo Nunes

July/2006

Advisors: Aquilino Senra Martinez

Fernando Carvalho da Silva

Department: Nuclear Engineering

The main goal of this work consists of developing and improving the Stiffness Confinement Method, usually called SCM, as a manner of solving the Point Kinetics Equations. This method decouples the equations, so they can be solved in a different way. The power part is solved with a smaller step than the one corresponding to precursors. The solution can be analytical or numerical. A study of the many possible different ways of solution is done, trying to point out which one is the most precise and which has low computing time. Four applications are considered, witch already presented in literature. Results are obtained and presented in a clear way, compared to each one of them and to similar existing results in the literature.

ÍNDICE

Capítulo 1 - Introdução	1
Capítulo 2 - As Equações da Cinética Pontual	3
Capítulo 3 - Métodos de solução das Equações da Cinética Pontual	13
3.1 - Os Métodos Analíticos	13
3.2 - O Método de Diferenças Finitas	15
3.3 - O Método PCA	17
3.4 - O Método Runge-Kutta Generalizado	20
3.5 - O Método SCM	24
Capítulo 4 - O Aperfeiçoamento do Método SCM	33
4.1 - Aproximação da função $U(t)$	34
4.2 - Cálculo da potência e dos precursores de modo analítico	38
4.3 - Cálculo da potência e dos precursores de modo discreto	41
4.2 - Cálculo da potência de modo discreto e dos precursores de modo analítico	42
Capítulo 5 - Os Resultados	44
5.1 - Caso 1 - Degrau de Reatividade	44
5.2 - Caso 2 - Rampa de Reatividade	57
5.3 - Caso 3 - Reatividade Senoidal	67
5.4 - Caso 4 - Reatividade do tipo Zig-zag	82
Capítulo 6 - Conclusões	94
Bibliografia	99

Capítulo 1

Introdução

Bombardeando urânio com nêutrons, os cientistas Hahn e Strassmann, na Alemanha, tentavam obter elementos transurânicos. Foi desta forma que eles, em 1938, acabaram por fissionar o urânio pela primeira vez. Frisck e Lise Meitner interpretaram as experiências de Hahn afirmando que, se um núcleo pesado sofre fissão, obtêm-se átomos de massa mediana e enorme quantidade de energia. Os principais experimentos foram realizados com U^{235} e Pu^{239} . A fissão nuclear é o mecanismo que possibilita a construção dos reatores nucleares e da bomba atômica. De fato, uma bomba nuclear e um reator nuclear são aparatos totalmente diversos, como pode-se ver em CHUNG [1].

Na operação de uma central nuclear é de fundamental importância conhecer, em tempo real se for possível, os parâmetros que envolvem o núcleo do reator. A potência é um desses parâmetros de grande relevância.

O efetivo controle de um reator nuclear só é possível, como será demonstrado ao longo deste trabalho, pela presença dos neutrons liberados após a reação de fissão (com um atraso na ordem de segundos) devido ao decaimento dos produtos de fissão.

O modelo em que se consegue determinar a potência de modo bastante simples, dada uma certa variação da reatividade ao longo do tempo, é o modelo da Cinética Pontual. Variações da reatividade em um curto lapso de tempo são tratadas de modo eficaz com esse modelo. Nota-se que esse tipo de variação brusca da reatividade é o que costuma

ocorrer em situações de acidentes.

No capítulo dois esse modelo será discutido e deduzido a partir de uma teoria mais ampla, de modo que a sua consistência seja comprovada. Iremos de fato partir da Equação de Difusão para chegar as Equações da Cinética Pontual. Discutiremos também a sua importância e validade. Destacamos que podem ser consideradas as Equações da Cinética Pontual com realimentação termohidráulica, o que corresponde a um modelo mais realista, porém bem mais complexo.

No capítulo três apresentaremos um panorama geral dos diversos métodos usados para resolver o sistema matemático das Equações da Cinética Pontual, ou seja, obter a solução para um sistema de sete equações diferenciais de primeira ordem acopladas, considerando seis grupos de precursores. Esses métodos vão desde o cálculo analítico até uma grande diversidade de métodos discretos, tais como o método de Diferenças Finitas e o método de Runge-Kutta Generalizado. Dentre esses diversos métodos descritos, selecionamos o método de confinamento da rigidez para ser aperfeiçoado neste trabalho. No estudo desse método, em primeiro lugar procurou-se implementá-lo de modo a reproduzir fielmente o que foi apresentado originalmente.

No capítulo quatro realizamos algumas modificações importantes no método com o intuito de melhorar o seu desempenho. Essas modificações foram feitas com a intenção de obter um melhor desempenho através da alteração no processo usado para resolver as equações diferenciais que caracterizam o modelo da Cinética Pontual. Os resultados foram obtidos e apresentados no capítulo cinco, através de gráficos e tabelas onde onde os métodos original e aperfeiçoados são aplicados em quatro casos escolhidos de acordo com o que já havia sido analisado na literatura.

No último capítulo verifica-se que o objetivo foi alcançado, ou seja, que conseguimos melhorar o desempenho do método. Além disso, buscou-se verificar as possibilidades de aprimoramento e trabalhos futuros decorrentes desta dissertação.

Capítulo 2

As Equações da Cinética Pontual

As Equações da Cinética Pontual têm a sua importância baseada no fato de que consistem em um modelo simples e eficaz para se estudar as situações dinâmicas de um reator nuclear. Pode-se saber as conseqüências da inserção de reatividade no núcleo do reator, como nos casos de início de operação, controle, desligamento e acidentes. Isto permite o controle do reator com os menores riscos possíveis.

Uma variável obtida a partir das Equações da Cinética Pontual é o número de nêutrons existentes no núcleo do reator. Mas como a variação da potência é diretamente proporcional à variação da população de nêutrons, a potência é facilmente obtida, de acordo com DUDERSTADT & HAMILTON [2].

$$P(t) = \gamma v \Sigma_f N(t) \quad (2.1)$$

onde :

- γ = energia média revertida em uma reação de fissão nuclear.
- v = velocidade média de cada nêutron.
- Σ_f = seção de choque macroscópica de fissão.
- $N(t)$ = número de nêutrons do reator em cada instante t .

- $P(t)$ = potência do reator em cada instante t .

Um modelo mais simplificado da cinética pode ser visto em DUDERSTADT & HAMILTON [2], e é apresentado a seguir.

$$\frac{dN(t)}{dt} = \frac{k-1}{\Lambda} N(t) \quad (2.2)$$

- k = fator de multiplicação, ou seja, razão entre a produção de nêutrons e a perda de nêutrons.
- Λ = tempo entre o nascimento do nêutron e sua posterior interação de fissão.

Como esse modelo simplificado não leva em conta a diferença de tempo entre os nêutrons prontos e os nêutrons retardados, ele apenas serve para nos oferecer uma visão qualitativa da cinética. Substituindo o $N(t)$ dado pela equação (2.1) na equação (2.2), obtém-se a solução :

$$P(t) = P_0 e^{\frac{k-1}{\Lambda} t} \quad (2.3)$$

Com os parâmetros $k=1,001$, $\Lambda=0,0001$ s, $P_0 = 2200$ MW e uma variação temporal de apenas 0,1 s (o tempo de resposta de um operador é da ordem de 1 s no mínimo) a potência atinge um valor de $P(t) = 5980$ MW, ou em termos de P_0 , $P(t) = 2,72 P_0$. É óbvio que se os resultados da equação (2.3) correspondessem à realidade, seria muito mais difícil controlar um reator nuclear (para não dizer impossível).

O modelo que apresenta resultados mais satisfatórios é o modelo da Cinética Pontual, que será deduzido a partir da Equação de Difusão apresentada a seguir. Esta dedução é baseada em HETRICK [3]. A própria dedução da Equação de Difusão, que vem a ser obtida a partir da Equação de Transporte de Nêutrons conforme DUDERSTADT & HAMILTON [2], não será reproduzida neste trabalho. A equação da difusão monoenergética assume a seguinte forma:

$$\frac{\partial N(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = Dv\nabla^2 N(\mathbf{r}, t) - \Sigma_a v N(\mathbf{r}, t) + S \quad (2.4)$$

Onde tem-se que :

- $N(\mathbf{r}, t) dV$ = número de nêutrons em um elemento de volume dV na posição \mathbf{r} no instante de tempo t .
- $Dv\nabla^2 N(\mathbf{r}, t) dV$ = taxa de nêutrons difundindo, ou seja, entrando e saindo, em dV na posição \mathbf{r} no instante de tempo t .
- $\Sigma_a v N(\mathbf{r}, t) dV$ = taxa de nêutrons absorvidos em dV na posição \mathbf{r} no tempo t .
- $S(\mathbf{r}, t) dV$ = taxa de nêutrons produzidos em dV na posição \mathbf{r} no tempo t .

Os coeficientes D , v e Σ_a são, respectivamente, o coeficiente de difusão, a velocidade do nêutron e a seção de choque macroscópica de absorção de nêutrons. É possível considerar esses parâmetros da difusão independentes da posição devido ao fato de considerarmos uma região homogênea da reator e portanto todos os coeficientes são independentes da posição. A equação de difusão pode ser vista como uma primeira aproximação para o comportamento dinâmico de muitos tipos de reator. Frequentemente N representa somente os nêutrons na faixa de energia onde a maioria das fissões ocorre (por exemplo, os nêutrons térmicos em um reator térmico), e o termo de fonte S inclui os nêutrons que sofrem espalhamento e têm a sua energia final na faixa de energia pretendida, por exemplo, o que ocorre no caso da moderação de nêutrons.

Nesta aproximação da cinética pontual, a produção de nêutrons em um estado estacionário é escrita como $k_\infty \Sigma_a \nu N$, onde k_∞ é a razão do número de nêutrons produzidos pelo número de nêutrons absorvidos (também chamado de o fator de multiplicação de um meio infinito), ou seja, pode-se escrever:

$$k_\infty = \frac{\text{Nêutrons Produzidos}}{\text{Nêutrons Absorvidos}} \quad (2.5)$$

Os nêutrons prontos e retardados foram tratados separadamente. Como β é a fração de neutrons retardados, a contribuição dos neutrons prontos para a fonte é escrita como $(1 - \beta)k_\infty \Sigma_a v N$. Os nêutrons retardados são produzidos por decaimento radioativo de certos produtos de fissão (chamados de precursores dos neutrons retardados); sejam λ_i a constante de decaimento radioativo e $C_i(\mathbf{r}, t)$ a concentração do i -ésimo tipo de precursores respectivamente. A contribuição dos nêutrons retardados para a fonte será dada pelo somatório $\sum_i \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t)$. Incluindo uma fonte externa ao processo de fissão como um termo $S_0(\mathbf{r}, t)$, tem-se que:

$$S(\mathbf{r}, t) = (1 - \beta)k_\infty \Sigma_a v N(\mathbf{r}, t) + \sum_i \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) + S_0(\mathbf{r}, t) \quad (2.6)$$

Dessa forma, substituindo a equação (2.6) na equação (2.4) tem-se que:

$$\frac{\partial N(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = Dv \nabla^2 N(\mathbf{r}, t) - \Sigma_a v N(\mathbf{r}, t) + (1 - \beta)k_\infty \Sigma_a v N(\mathbf{r}, t) + \sum_i \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) + S_0(\mathbf{r}, t) \quad (2.7)$$

Pode-se escrever a fração de neutrons retardados para o i -ésimo precursor como sendo β_i , logo $\beta = \sum_i \beta_i$. Consideramos também que os fragmentos de fissão só podem se deslocar em distâncias muito pequenas porque eles são muito pesados, logo não ocorre mudança na posição dos produtos de fissão e serão considerados todos eles na mesma posição em um determinado instante de tempo e em uma determinada reação de fissão. Portanto, tem-se que:

$$\frac{\partial C_i(\mathbf{r}, t)}{\partial t} = \beta_i k_\infty \Sigma_a v N(\mathbf{r}, t) - \lambda_i C_i(\mathbf{r}, t) \quad (2.8)$$

As equações (2.7) e (2.8) constituem um sistema aproximado de equações cinéticas, com a compreensão que cada um ou todos os coeficientes podem ser dependentes do tempo por

causa de mudanças provocadas no reator devido a fatores externos ou efeitos internos de transientes de potência.

Nesta aproximação, é assumido que N e C_i são separáveis no espaço e no tempo. Isso só é válido se o reator estiver muito perto do estado crítico e se não existir nenhuma perturbação localizada grande. Admitindo que:

$$N(\mathbf{r}, t) = f(\mathbf{r})n(t); \quad C_i(\mathbf{r}, t) = g_i(\mathbf{r})c_i(t) \quad (2.9)$$

Substituindo a equação (2.9) na equação (2.8) obtem-se:

$$\frac{\partial c_i(t)}{\partial t} = \beta_i k_\infty \Sigma_a v \frac{f(\mathbf{r})}{g_i(\mathbf{r})} n(t) - \lambda_i c_i(t) \quad (2.10)$$

Note que $\frac{f(\mathbf{r})}{g_i(\mathbf{r})}$ é independente do tempo. Para que a equação acima seja independente da posição é necessário assumir que f e g_i tenham a mesma forma, ou melhor, sejam proporcionais. Considerando $g_i = f$, para todo $i=1,2,3\dots M$.

$$\frac{dc_i(t)}{dt} = \beta_i k_\infty \Sigma_a v n(t) - \lambda_i c_i(t) \quad (2.11)$$

Agora substituindo a equação (2.9) na equação (2.7), tem-se que:

$$\frac{\partial n(t)}{\partial t} = Dv \frac{\nabla^2 f}{f} n(t) - \Sigma_a v n(t) + (1 - \beta) k_\infty \Sigma_a v n(t) + \sum_i \lambda_i \frac{g_i}{f} c_i(t) + \frac{S_0}{f} \quad (2.12)$$

O termo $\frac{g_i}{f}$ já foi considerado igual a 1 na simplificação da equação (2.8). Resta eliminar os termos $\frac{\nabla^2 f}{f}$ e $\frac{S_0}{f}$. Considera-se que f satisfaz a equação de Helmholtz e assim tem-se que :

$$\nabla^2 f + B^2 f = 0 \quad (2.13)$$

$$\frac{\nabla^2 f}{f} = -B^2 \quad (2.14)$$

Considera-se portanto, a separação de variáveis:

$$S_0(\mathbf{r}, t) \equiv q(t)f(\mathbf{r}) \quad (2.15)$$

Logo,

$$q(t) = \frac{S_0(\mathbf{r}, t)}{f(\mathbf{r})} \quad (2.16)$$

tem-se:

$$\frac{dn(t)}{dt} = -DvB^2n(t) - \Sigma_a vn(t) + (1 - \beta)k_\infty \Sigma_a vn(t) + \sum_i \lambda_i c_i(t) + q(t) \quad (2.17)$$

$$\frac{dn(t)}{dt} = (-DvB^2 - v\Sigma_a + (1 - \beta)k_\infty v\Sigma_a)n(t) + \sum_i \lambda_i c_i(t) + q(t) \quad (2.18)$$

Neste momento vamos introduzir novas notações, a saber :

$$l_\infty \equiv \frac{1}{v\Sigma_a}; \quad L^2 \equiv \frac{D}{\Sigma_a} \quad (2.19)$$

Onde l_∞ é um tempo característico de absorção e L é um comprimento de difusão. Pode-se interpretar L^2 como uma área de difusão. Usando essas novas definições na equação (2.18) obtém-se:

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{(1 - \beta)k_\infty - (1 + L^2 B^2)}{l_\infty} n(t) + \sum_i \lambda_i c_i(t) + q(t) \quad (2.20)$$

Pode-se agora definir o fator de multiplicação k e o tempo de vida dos nêutrons l

$$k \equiv \frac{k_\infty}{1 + L^2 B^2}; \quad l \equiv \frac{l_\infty}{1 + L^2 B^2} \quad (2.21)$$

Utilizando-se essas definições nas equações (2.11) e (2.20), obtêm-se:

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{k - 1 - \beta k}{l} n(t) + \sum_i \lambda_i c_i(t) + q(t) \quad (2.22)$$

$$\frac{dc_i(t)}{dt} = \frac{\beta_i k}{l} n(t) - \lambda_i c_i(t) \quad (2.23)$$

Podemos usar as definições de reatividade ρ e o tempo de geração de nêutrons em um reator Λ :

$$\rho(t) \equiv \frac{k - 1}{k} \quad (2.24)$$

$$\Lambda \equiv \frac{l}{k} \quad (2.25)$$

para obter-se finalmente:

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda} n(t) + \sum_i \lambda_i c_i(t) + q(t) \quad (2.26)$$

$$\frac{dc_i(t)}{dt} = \frac{\beta_i}{\Lambda} n(t) - \lambda_i c_i(t) \quad (2.27)$$

onde $i=1,2,\dots,M$ (com M sendo o número de precursores)

As equações (2.26) e (2.27) são denominadas de Equações da Cinética Pontual e constituem um sistema de $M+1$ equações diferenciais de primeira ordem acopladas. Deve ser observado que a reatividade é uma função do tempo, ou seja, depende de vários parâmetros, tais como o histórico de potência, a temperatura, entre outros, que variam com o passar do tempo. Numa interpretação mais realista da situação física convém lembrar que a reatividade dependendo da temperatura do reator é um parâmetro que vai depender indiretamente da própria potência, uma vez que a temperatura também depende da potência. Assim o sistema de equações diferenciais se amplia e também se amplia o número de variáveis, como pode se verificar em EDWARDS, LEE & SCHULTZ [4] e CARVALHO [5]. As Equações da Cinética Pontual são acopladas às equações da termohidráulica através de uma equação que relaciona a reatividade com as temperaturas no interior do núcleo do reator.

Para se obter como soluções $n(t)$ e os precursores $c_i(t)$, considera-se a reatividade como uma função apenas do tempo e conhecida, seja analiticamente ou pelo menos de modo discreto. Caso a reatividade seja desconhecida teremos um sistema de equações diferenciais com uma variável a mais do que o número de equações, e dessa forma tem-se um sistema indeterminado. O número das equações (2.27) é obviamente igual ao número de precursores $c_i(t)$. É usual se considerar seis grupos de precursores. Na tabela (2.1) abaixo tem-se a associação dos precursores com as constantes de decaimento radioativo λ_i e o percentual de nêutrons retardados para cada grupo de precursores β_i , lembrando que os valores apresentados são apenas valores típicos para o U^{235} , conforme foi apresentado em

HETRICK [3]. De fato, na situação real, os nêutrons retardados precursores possuem vários valores de constante de decaimento, mas pode-se adotar apenas os seis grupos citados pois estes representam de forma bastante precisa a situação real e de modo bem mais simples.

Note que $n(t)$, como já foi dito, corresponde à concentração de nêutrons no reator e, portanto, é proporcional a potência do reator. Dessa forma, considerando $n(t)$ normalizada esse valor corresponderá exatamente à potência normalizada, ou seja, à potência dividida pela potência inicial (ou um determinado valor conhecido).

Tabela 2.1 : Parâmetros dos Grupos de Precursores

$c_i(t)$	$T_{1/2}^i$ (s)	λ_i (s^{-1})	β_i
$c_1(t)$	54,51	0,0127	0,000266
$c_2(t)$	21,84	0,0317	0,001491
$c_3(t)$	6,00	0,115	0,001316
$c_4(t)$	2,23	0,311	0,002849
$c_5(t)$	0,496	1,40	0,000896
$c_6(t)$	0,179	3,87	0,000182

Uma dificuldade fundamental para se obter uma solução adequada do sistema de equações (2.26) e (2.27) consiste no problema da rigidez ("stiffness"). Ele ocorre devido a grande diferença na magnitude do tempo de vida entre os nêutrons prontos e os nêutrons retardados, ou seja, os nêutrons retardados tem um tempo de vida de pelo menos mil vezes maior que os nêutrons prontos.

A rigidez é uma dificuldade inerente aos sistemas de equações que possuem essa grande diferença entre as constantes de tempo, como é o caso das equações da cinética pontual. Um outro exemplo de sistema físico que apresenta essa dificuldade é um circuito eletromecânico onde tem-se a presença de tempos de magnitude bem diferentes, como o tempo de descarga de um capacitor e o tempo de acoplamento mecânico de um relê. Um exemplo didático de um sistema deste tipo é apresentado na figura 2.1.

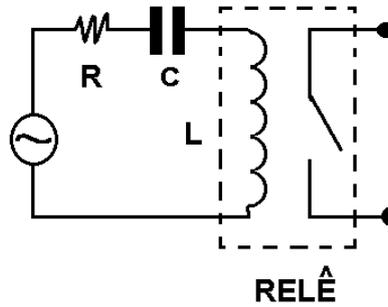


Figura 2.1 : Exemplo de rigidez em um circuito eletromecânico

O sistema eletromecânico representado na figura 2.1 obedece a seguinte equação integrodiferencial deduzida das Leis de Kirchhoff :

$$L \frac{di(t)}{dt} + Ri(t) + \frac{1}{C} \int_0^t i(u) du = V_0 \text{sen}(2\pi ft) \quad (2.28)$$

Qualquer método numérico usado para se resolver as Equações da Cinética Pontual irá se defrontar com o problema da rigidez, que irá impor limitações ao seu uso. O maior desafio consiste em contornar esse problema, de modo a conseguir um ganho tanto em nível de custo computacional, quanto em nível de precisão.

Existem diversos métodos numéricos que podem ser utilizados com o objetivo de resolver as Equações da Cinética Pontual. O estudo aprofundado destes métodos se torna necessário a fim de que seja possível identificar as vantagens e desvantagens de cada um.

Capítulo 3

Métodos de solução das Equações da Cinética Pontual

3.1 Os Métodos Analíticos

O uso de métodos analíticos para se resolver as Equações da Cinética Pontual poderiam possibilitar a obtenção de resultados muito precisos de modo imediato. A grande dificuldade consiste em não ser possível a obtenção desses resultados analíticos de um modo geral. Mas esses métodos são bastante úteis para obter valores de referência, onde o cálculo analítico seja possível, que possam servir para validar a precisão de métodos numéricos. Esses casos específicos de reatividade, onde se consegue a solução analítica, têm grande importância por se relacionarem com algumas situações reais que ocorrem em um reator nuclear.

As soluções das equações (2.26) e (2.27) para seis grupos de precursores podem ser obtidas através de um método analítico conforme discutido em AKCASU, LELLOUCHE & SHOTKIN [6]. Essas equações são reescritas como se segue:

$$\frac{\Lambda}{\beta} \frac{dn(t)}{dt} = [R(t) - 1]n(t) + \sum_i \lambda_i C_i(t) + \frac{\Lambda}{\beta} q(t) \quad (3.1)$$

$$\frac{dC_i(t)}{dt} = a_i n(t) - \lambda_i C_i(t) \quad (3.2)$$

$$\begin{cases} a_i = \frac{\beta_i}{\beta} \Rightarrow \sum_i a_i = 1 \\ R(t) = \frac{\rho(t)}{\beta} \\ C_i(t) = c_i(t) \frac{\Lambda}{\beta} \end{cases} \quad (3.3)$$

onde $i=1,2,\dots,6$

Note que a reatividade $R(t)$ já é o valor da reatividade expresso em dólar. A definição da reatividade em dólar é exatamente a divisão de $\rho(t)$ por β . Logicamente quando $R = 1\$$, tem-se que $\rho = \beta$.

Para se obter a solução do sistema constituído pelas equações (3.1) e (3.2) é necessário eliminar a variável $n(t)$ na equação (3.2). Para tanto basta resolver (3.2) como uma equação diferencial de primeira ordem para $C_i(t)$ em termos de $n(t)$. Isto é :

$$C_i(t) = \exp[-\lambda_i(t - t_0)](C_i(t_0) + \int_{t_0}^t a_i n(t') \exp[\lambda_i(t' - t_0)] dt') \quad (3.4)$$

Fazendo t_0 tender a $-\infty$ e levando-se em conta a situação real do sistema físico tem-se que :

$$C_i(t) = \int_{-\infty}^t a_i \exp[-\lambda_i(t - t')] n(t') dt' \quad (3.5)$$

onde tem-se que

$$\lim_{t_0 \rightarrow -\infty} C_i(t_0) e^{\lambda_i t_0} = 0 \quad (3.6)$$

É possível simplificar a notação considerando $t' = t - u$, e assim escrever :

$$C_i(t) = \int_0^\infty a_i e^{-\lambda_i u} n(t - u) du \quad (3.7)$$

A equação (3.7) pode ser substituída na equação (3.1) e assim obtém-se uma equação integro-diferencial que depende apenas da variável $n(t)$.

$$\frac{\Lambda}{\beta} \frac{dn(t)}{dt} = [R(t) - 1]n(t) + \int_0^\infty D(u)n(t-u)du + \frac{\Lambda}{\beta}q(t) \quad (3.8)$$

onde a função $D(u)$ é definida como se segue :

$$D(u) = \sum_i \lambda_i a_i e^{-\lambda_i u} \quad (3.9)$$

Basta resolver a equação integro-diferencial (3.8) e substituir na equação (3.7) para se obter a solução dos precursores $C_i(t)$, onde $i = 1, 2, \dots, 6$.

Dependendo da função usada para definir a reatividade, a solução das equações (3.7) e (3.8) pode se tornar um problema bastante complexo. Isso, é claro, em se tratando de uma solução analítica. Mas para alguns casos mais simples, é possível obter soluções analíticas com relativa facilidade. Esses casos específicos podem se tornar inclusive uma referência na análise de outros métodos.

Exemplos desses casos específicos consistem na inserção de um degrau de reatividade (reatividade constante) e reatividade do tipo rampa (reatividade como uma função linear do tempo). Existem na literatura os resultados exatos para a potência nesses casos específicos, que são bastante úteis na análise do comportamento dinâmico de um reator.

3.2 O Método de Diferenças Finitas

Este método numérico pode ser considerado o mais simples, uma vez que implica na solução do sistema de equações acoplado de modo iterativo, sem requerer nenhuma sofisticação de cálculo. Este método é satisfatoriamente descrito em ALVIM [7]. No método de diferenças finitas consideramos a própria definição de derivada :

$$\frac{df(t)}{dt} = \lim_{\Delta t \rightarrow 0} \frac{f(t + \Delta t) - f(t)}{\Delta t} \simeq \frac{f(t + \Delta t) - f(t)}{\Delta t} \quad (3.10)$$

Note que esta aproximação será melhor a medida que o Δt for pequeno, ou seja, quanto menor for o Δt melhor será o desempenho do método de diferenças finitas. Mas não se pode esquecer que quanto menor for o Δt maior será o tempo computacional e o erro de arredondamento, o que nos impede de obter na prática um resultado exato, no sentido mais restrito da palavra.

Pode-se aplicar a aproximação de diferenças finitas para as equações (2.26) e (2.27) para seis grupos de precursores, obtendo-se :

$$\frac{n(t + \Delta t) - n(t)}{\Delta t} \simeq \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda} n(t) + \sum_i \lambda_i c_i(t) + q(t) \quad (3.11)$$

$$\frac{c_i(t + \Delta t) - c_i(t)}{\Delta t} \simeq \frac{\beta_i}{\Lambda} n(t) - \lambda_i c_i(t) \quad (3.12)$$

onde $i=1,2,\dots,6$

O Δt é escolhido de tal forma que tenha o menor valor possível e $q(t)$ é desprezada devido a fonte externa ao processo de fissão não ter influência no resultado quando o reator está próximo da condição de criticalidade, ou seja, se a reatividade for pequena.

Consideram-se as definições:

$$n_k \equiv n(t_k) \quad (3.13)$$

$$n_{k+1} \equiv n(t_{k+1}) \quad (3.14)$$

$$t_{k+1} \equiv t_k + \Delta t \quad (3.15)$$

Explicitando-se n_{k+1} e c_{ik+1} , tem-se que :

$$n_{k+1} = n_k + \Delta t \frac{\rho(t_k) - \beta}{\Lambda} n_k + \Delta t \sum_i \lambda_i c_{ik} \quad (3.16)$$

$$c_{ik+1} = c_{ik} + \Delta t \frac{\beta_i}{\Lambda} n_k - \Delta t \lambda_i c_{ik} \quad (3.17)$$

onde $i=1,2,\dots,6$

Nota-se que as equações (3.16) e (3.17) continuam acopladas e devem ser resolvidas no mesmo passo. Isso implica que a princípio esse método não contribui para a solução do problema do stiffness (rigidez). A vantagem de se usar o método de diferenças finitas consiste no fato de que este método é bastante simples e eficaz.

3.3 O Método PCA

KINARD & ALLEN [8] propõem um novo método para o eficiente cálculo das Equações da Cinética Pontual em um reator nuclear. São feitas aproximações de intervalo constante (piecewise constant approximations ou PCA) para a reatividade e as fontes. Este método propõe eliminar o problema da rigidez (stiffness) de forma mais eficaz do que os outros métodos desenvolvidos até então (de todos os métodos descritos neste capítulo, o PCA é o mais atual).

As Equações da Cinética Pontual (2.26) e (2.27) são reescritas em um formato matricial, a saber :

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = A\vec{X} + B(t)\vec{X} + \vec{F}(t) \quad (3.18)$$

$$\vec{X}(0) = \vec{X}_0 \quad (3.19)$$

onde os termos são definidos como se segue :

$$A = \begin{pmatrix} \frac{-\beta}{\Lambda} & \lambda_1 & \lambda_2 & \lambda_3 & \dots & \lambda_m \\ \frac{\beta_1}{\Lambda} & -\lambda_1 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \frac{\beta_2}{\Lambda} & 0 & -\lambda_2 & 0 & \dots & 0 \\ \frac{\beta_3}{\Lambda} & 0 & 0 & -\lambda_3 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \frac{\beta_m}{\Lambda} & 0 & 0 & 0 & \dots & -\lambda_m \end{pmatrix} \quad B(t) = \begin{pmatrix} \frac{\rho(t)}{\Lambda} & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \end{pmatrix}$$

$$\vec{F}(t) = \begin{pmatrix} q(t) \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \quad \vec{X}(t) = \begin{pmatrix} n(t) \\ c_1(t) \\ c_2(t) \\ c_3(t) \\ \vdots \\ c_m(t) \end{pmatrix}$$

Sendo que m é o número de precursores.

A aproximação proposta no método considera que $\rho(t)$ e $q(t)$ são constantes levando-se em conta uma partição (interstício) bem pequena, a saber :

$$\rho(t) \approx \rho\left(\frac{t_i + t_{i+1}}{2}\right) \equiv \rho_i \quad (3.20)$$

$$\vec{F}(t) \approx \vec{F}\left(\frac{t_i + t_{i+1}}{2}\right) \equiv \vec{F}_i \quad (3.21)$$

onde $t_{i+1} \geq t \geq t_i$.

Dessa forma, substituindo as definições (3.20) e (3.21) nas equações (3.18) e (3.19), pode-se obter as equações a seguir que serão resolvidas de forma exata.

$$\frac{d\vec{X}}{dt} = A\vec{X} + B_i\vec{X} + \vec{F}_i \quad (3.22)$$

$$\vec{X}(t_i) = \vec{X}_i \quad (3.23)$$

Multiplica-se a equação (3.22) pelo fator integrante $e^{-(A+B_i)t}$ de modo que esta equação possa ser reescrita como se segue:

$$\frac{d(e^{-(A+B_i)t}\vec{X})}{dt} = e^{-(A+B_i)t}\vec{F}_i \quad (3.24)$$

A seguir, integra-se ambos os lados da equação (3.24), obtendo-se :

$$e^{-(A+B_i)t_{i+1}}\vec{X}_{i+1} - e^{-(A+B_i)t_i}\vec{X}_i = \int_{t_i}^{t_{i+1}} e^{-(A+B_i)u}\vec{F}_i du \quad (3.25)$$

Por fim basta resolver a integral e se arrumar os termos para se obter finalmente:

$$\vec{X}_{i+1} = e^{(A+B_i)h_i}\vec{X}_i + (e^{(A+B_i)h_i} - I)(A + B_i)^{-1}\vec{F}_i \quad (3.26)$$

onde $h_i \equiv t_{i+1} - t_i$

O esquema do PCA se baseia exatamente nas equações (3.19) e (3.26), onde a primeira representa as condições iniciais necessárias ao início do método iterativo. No capítulo 5 faremos uma comparação dos resultados apresentados em KINARD & ALLEN [8] com

aqueles que foram obtidos neste trabalho, de modo a verificar se realmente este método resolve satisfatoriamente o nosso problema .

3.4 O Método Runge-Kutta Generalizado

SÁNCHEZ [9] obtém uma solução numérica para as Equações da Cinética Pontual usando o método de Runge-Kutta Generalizado. Este método também se propõe a resolver o problema do "stiffness"(rigidez) de forma rápida e acurada.

O método de Runge-Kutta Generalizado de quarta ordem para equações diferenciais ordinárias foi desenvolvido inicialmente por KAPS & RENTROP [10]. O que SÁNCHEZ [9] fez foi aplicar este método ao problema específico das equações da cinética pontual. Será apresentada na seqüência uma descrição do método de acordo com KAPS & RENTROP [10].

Considera-se inicialmente o problema de valor inicial :

$$\frac{dy(x)}{dx} = f(y(x)) \quad (3.27)$$

$$y(x_0) = y_0 \quad (3.28)$$

Uma solução numérica do seguinte tipo é encontrada :

$$y_h(x_0 + h) = y_0 + \sum_{i=1}^S c_i k_i \quad (3.29)$$

$$(I - \gamma h \dot{f}(y_0))k_i = h f(y_0 + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} k_j) + h \dot{f}(y_0) \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij} k_j \quad (3.30)$$

com $i=1,2,\dots,S$

Os coeficientes γ , c_i , α_{ij} , γ_{ij} são números reais e h define o passo ($t_{i+1} - t_i$). O termo I representa a matriz identidade $n \times n$, $f'(y_0)$ representa a matriz jacobiana e S o número de estágios. Os elementos de vetor k_i ($i=1,2,\dots,S$) são calculados resolvendo o sistema de equações lineares de ordem n .

O método usado para obter as equações (3.29) e (3.30) é chamado de método de Rosenbroock-Wanner. Para os casos em que $\gamma = \gamma_{ij} = 0$, este método se reduz ao método de Runge-Kutta usual. Portanto o método de Rosenbroock-Wanner pode ser considerado como um método de Runge-Kutta Generalizado.

Pode-se observar que SÁNCHEZ [9] se preocupa com métodos de ordem 3 ou 4 para o qual o número de fases S é igual à ordem do método. Análogo à aproximação seguida nos métodos de Runge-Kutta-Fehlberg, que são descritos em STOER & BULIRSH [11] para sistemas sem stiffness, o método de terceira-ordem é combinado com um método de quarta-ordem que usa o mesmo h para obter uma estimativa do erro de truncamento que por sua vez é utilizado para o controle do passo. Desta maneira, uma aproximação de quarta ordem, denotada por \bar{y} , é introduzida de acordo com a fórmula seguinte:

$$\bar{y}_{i+1} = \bar{y}_i + \sum_{k=1}^S c_k f_k^* \quad (3.31)$$

Onde f_k^* corresponde ao k_i da equação (3.30) e os coeficientes c_k são reais.

A determinação dos coeficientes requeridos pelo método é razoavelmente complexa. Eles podem ser obtidos através das chamadas equações de condição, que por sua vez são deduzidas de modo aproximadamente similar àqueles deduzidos no método de Runge-Kutta usual, com excessão de que neste método são usadas as séries de Butcher ao invés das séries de Taylor. As séries de Butcher podem ser encontradas em HAIRER & WANNER [12].

Em seguida, usou-se o grupo de coeficientes denotados pelo método de Runge-Kutta Generalizado em KAPS & RENTROP [10] para um método de terceira ordem como foi especificado pelas equações (3.29) e (3.30), que é introduzido em um método de quarta

ordem dado pela equação (3.31). Os coeficientes tem os valores apresentados na tabela 3.1. Eles foram definidos em KAPS & RENTROP [10].

Tabela 3.1 : Coeficientes do Método de Runge-Kutta Generalizado

γ	0,395			c_1	0,199293275701
γ_{21}	-0,767672395484	β_{21}	0,438	c_2	0,482645235674
γ_{31}	-0,851675323742	β_{31}	0,796920457938	c_3	0,0680614886256
γ_{32}	0,522967289188	β_{32}	0,0730795420615	c_4	0,25
γ_{41}	0,288463109545	β_{41}	β_{31}	\hat{c}_1	0,346325833758
γ_{42}	0,0880214273381	β_{42}	β_{32}	\hat{c}_2	0,285693175712
γ_{43}	-0,337389840627	β_{43}	0	\hat{c}_3	0,36798099053

Da equação (3.30), obtém-se o seguinte grupo de equações :

$$f_1^* = Bf(y) \quad (3.32)$$

$$f_2^* + \frac{1}{\gamma} f_1^* = \left(hf(y + \beta_{21} f_1^*) + \frac{\gamma_{21}}{\gamma} f_1^* \right) \quad (3.33)$$

$$f_3^* + \frac{1}{\gamma} \sum_{j=1}^2 \gamma_{3j} f_j^* = B \left(f(y + \sum_{j=1}^2 \beta_{3j} f_j^*) + \frac{1}{\gamma} \sum_{j=1}^2 \gamma_{3j} f_j^* \right) \quad (3.34)$$

$$f_4^* + \frac{1}{\gamma} \sum_{j=1}^3 \gamma_{4j} f_j^* = B \left(hf(y + \sum_{j=1}^3 \beta_{4j} f_j^*) + \frac{1}{\gamma} \sum_{j=1}^3 \gamma_{4j} f_j^* \right) \quad (3.35)$$

Nesta expressão, B é a inversa da matriz $(I - h\gamma \dot{f}(y_0))$.

Agora vamos aplicar este método ao problema das Equações da Cinética Pontual. Partindo das equações (2.26) e (2.27) com seis grupos de precursores, desprezando a fonte $q(t)$ e introduzindo a expressão (3.36):

$$\frac{d\tau}{dt} = 1 \quad (3.36)$$

Assim tem-se que :

$$y^1 = n, \quad y^k = c_{k-1} \quad (\text{onde } k=2,3,\dots,7) \quad \text{e } y^8 = \tau$$

$$\vec{f}(y) = \begin{pmatrix} \frac{\rho(y^8)-\beta}{\Lambda} y^1 + \sum_{j=1}^6 \lambda_j y^{j+1} \\ \frac{\beta_1}{\Lambda} y^1 - \lambda_1 y^2 \\ \frac{\beta_2}{\Lambda} y^1 - \lambda_2 y^3 \\ \vdots \\ \frac{\beta_6}{\Lambda} y^1 - \lambda_6 y^7 \\ 1 \end{pmatrix} \quad \vec{f}(y_0) = \begin{pmatrix} \frac{1}{\Lambda} [\rho(y^8) - \beta] & \lambda_1 & \lambda_2 & \dots & \lambda_6 & \frac{y^1}{\Lambda} \frac{\partial \rho}{\partial y^8} \\ \frac{\beta_1}{\Lambda} & -\lambda_1 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \frac{\beta_2}{\Lambda} & 0 & -\lambda_2 & \dots & 0 & 0 \\ \frac{\beta_3}{\Lambda} & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \frac{\beta_6}{\Lambda} & 0 & 0 & \dots & -\lambda_6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \end{pmatrix}$$

$$A = \begin{pmatrix} 1 - \frac{h\gamma}{\Lambda} [\rho(y^8) - \beta] & -h\gamma\lambda_1 & -h\gamma\lambda_2 & -h\gamma\lambda_3 & \dots & -h\gamma\lambda_6 & \frac{-h\gamma y^1}{\Lambda} \frac{\partial \rho}{\partial y^8} \\ \frac{-h\gamma\beta_1}{\Lambda} & h\gamma\lambda_1 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \frac{-h\gamma\beta_2}{\Lambda} & 0 & h\gamma\lambda_2 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \frac{-h\gamma\beta_3}{\Lambda} & 0 & 0 & h\gamma\lambda_3 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ \frac{-h\gamma\beta_6}{\Lambda} & 0 & 0 & 0 & \dots & h\gamma\lambda_6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

Sendo que a matriz $\vec{f}(y_0)$ é a matriz Jacobiana e A é a matriz $I - h\gamma\vec{f}(y_0)$. A determinação das funções f_k^* implica no cálculo da matriz inversa de A , o que pode ser obtido de modo

bastante sistemático aplicando-se o Teorema de Hamilton-Cayley, apresentado em STOER & BULIRSH [11], para se chegar à seguinte fórmula:

$$B = A^{-1} = -\frac{1}{(-1)^n \det(A)} (A^{n-1} + a_{n-1}A^{n-2} + \dots + a_2A + a_1I) \quad (3.37)$$

3.5 O Método SCM

CHAO & ATTARD [13] desenvolveram um método que se propõem a solucionar o problema da rigidez nas Equações da Cinética Pontual através do desacoplamento do sistema de equações (2.26) e (2.27). Dessa forma a rigidez fica confinada, pois ela existe para a equação (2.26) que envolve a potência e não para os precursores, ou seja, o problema aparece na solução para $n(t)$ e não para os $c_i(t)$. Esse método portanto foi chamado de SCM (Stiffness Confinement Method). Na sua proposta original obtem-se uma solução semi-analítica para a potência e uma solução por diferenças finitas para os precursores. Nossa proposta neste trabalho consiste em implementar o método SCM e buscar formas de aperfeiçoá-lo.

Para que se possa apresentar as idéias básicas do método SCM, considera-se a situação mais simples possível das Equações da Cinética Pontual com apenas um grupo de precursores, a inserção de uma reatividade constante e positiva e as fontes externas $q(t)$ são desprezadas. Assim as equações (2.26) e (2.27) podem ser reescritas como se segue:

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{\rho - \beta}{\Lambda} n(t) + \lambda c(t) \quad (3.38)$$

$$\frac{dc(t)}{dt} = \frac{\beta}{\Lambda} n(t) - \lambda c(t) \quad (3.39)$$

É possível desacoplar as equações (3.38) e (3.39) de diversas formas, dada a simplicidade do exemplo. Inicialmente derivamos a equação (3.38), obtendo-se :

$$\frac{d^2n(t)}{dt^2} = \frac{\rho - \beta}{\Lambda} \frac{dn(t)}{dt} + \lambda \frac{dc(t)}{dt} \quad (3.40)$$

Em seguida, multiplica-se a equação (3.39) por λ , de modo a se obter o último termo da equação (3.40). Substitui-se esta na equação (3.40), logo :

$$\frac{d^2n(t)}{dt^2} = \frac{\rho - \beta}{\Lambda} \frac{dn(t)}{dt} + \lambda \frac{\beta}{\Lambda} n(t) - \lambda^2 c(t) \quad (3.41)$$

Agora, multiplica-se a equação (3.38) por λ e em seguida reescreve-se:

$$\lambda^2 c(t) = \lambda \frac{dn(t)}{dt} - \lambda \frac{\rho - \beta}{\Lambda} n(t) \quad (3.42)$$

Substituindo a equação (3.42) na equação (3.41) obtém-se:

$$\frac{d^2n(t)}{dt^2} = \frac{\rho - \beta}{\Lambda} \frac{dn(t)}{dt} + \lambda \frac{\beta}{\Lambda} n(t) - \lambda \frac{dn(t)}{dt} + \lambda \frac{\rho - \beta}{\Lambda} n(t) \quad (3.43)$$

ou

$$\frac{d^2n(t)}{dt^2} + \left(\lambda - \frac{\rho - \beta}{\Lambda}\right) \frac{dn(t)}{dt} - \frac{\rho\lambda}{\Lambda} n(t) = 0 \quad (3.44)$$

Note que a equação (3.44) depende apenas de $n(t)$ e pode ser facilmente resolvida. Depois de obtida a sua solução, a mesma é substituída na equação (3.45) que vem diretamente da equação (3.38).

$$c(t) = \frac{1}{\lambda} \frac{dn(t)}{dt} - \frac{\rho - \beta}{\Lambda \lambda} n(t) \quad (3.45)$$

As soluções de (3.44) e de (3.45) podem ser escritas de modo geral como se segue :

$$n(t) = A1e^{m1t} + A2e^{m2t} \quad (3.46)$$

$$c(t) = \frac{A1}{\lambda} (m1 - \frac{\rho - \beta}{\Lambda}) e^{m1t} + \frac{A2}{\lambda} (m2 - \frac{\rho - \beta}{\Lambda}) e^{m2t} \quad (3.47)$$

onde $A1$ e $A2$ são constantes arbitrárias a serem determinadas pelas condições iniciais e ainda:

$$m1 = \frac{1}{2\Lambda} (- (\beta - \rho + \lambda\Lambda) + \sqrt{(\beta - \rho + \lambda\Lambda)^2 + 4\Lambda\lambda\rho}) \quad (3.48)$$

$$m2 = \frac{1}{2\Lambda} (- (\beta - \rho + \lambda\Lambda) - \sqrt{(\beta - \rho + \lambda\Lambda)^2 + 4\Lambda\lambda\rho}) \quad (3.49)$$

Considerando as condições iniciais $n(0) = 1$ (para obtermos a potência normalizada) e $c(0) = \frac{\beta}{\Lambda\lambda}$ e ainda algumas aproximações, qual sejam, $(\beta - \rho + \lambda\Lambda)^2 \gg 4\Lambda\lambda\rho$, $\frac{\lambda\Lambda}{\beta} \ll 1$ e $|\rho| \ll \beta$ pode-se simplificar as soluções (3.46) e (3.47), obtendo-se:

$$n(t) \simeq \frac{\beta}{\beta - \rho} \exp(\frac{\rho\lambda}{\beta - \rho}t) - \frac{\rho}{\beta - \rho} \exp(\frac{\rho - \beta}{\Lambda}t) \quad (3.50)$$

$$c(t) \simeq \frac{\beta}{\Lambda\lambda} \exp(\frac{\rho\lambda}{\beta - \rho}t) + \frac{\rho\beta}{(\beta - \rho)^2} \exp(\frac{\rho - \beta}{\Lambda}t) \quad (3.51)$$

As equações (3.50) e (3.51) são válidas quando ρ não é próximo de β , porque foi considerado nas aproximações que $|\rho| \ll \beta$, ou seja, $\rho \ll \beta$ ou $\rho \gg \beta$. O caso específico de $\rho \ll \beta$ é mostrado na figura (3.1).

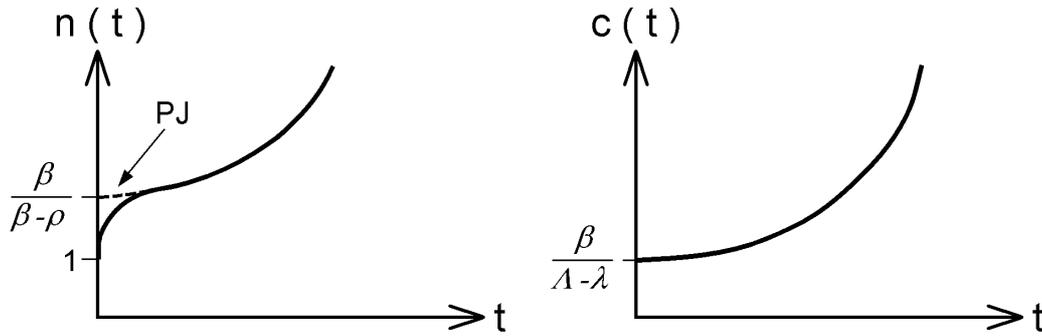


Figura 3.1 : Representação gráfica do problema da rigidez

É importante observar que há uma curva abrupta em $n(t)$, de um ρ/Λ de inclinação inicial muito íngreme para uma inclinação assintótica muito mais moderada, refletindo a característica da rigidez devido a uma certa diferença de magnitude entre as constantes de tempo Λ e $1/\lambda$ presentes na equação (3.38). Entretanto, o mesmo não se observa em $c(t)$. Isto sugere que a função $c(t)$ não é sensível ao problema da rigidez.

Uma aproximação bem conhecida usada para se evitar a rigidez é a aproximação de prompt jump (PJ), que corresponde ao termo ascendente da equação (3.50), como é mostrado na figura (3.1). Na aproximação de prompt jump consideramos que a variação de $n(t)$ é muito pequena com relação aos outros termos da equação (3.38). Dessa forma, pode-se escrever :

$$0 = \frac{\rho - \beta}{\Lambda} n(t) + \lambda c(t) \quad (3.52)$$

$$n_{PJ}(t) = \frac{\Lambda \lambda}{\beta - \rho} c(t) \quad (3.53)$$

Para se determinar o $c(t)$, que a seguir será chamado de $c_{PJ}(t)$, basta substituir a equação (3.53) na equação (3.39).

$$\frac{dc_{PJ}(t)}{dt} = \frac{\rho\lambda}{\beta - \rho} c_{PJ}(t) \quad (3.54)$$

Impondo-se as mesmas condições iniciais impostas para se chegar as equações (3.50) e (3.51), obtém-se a solução da equação (3.54), que se segue :

$$c_{PJ}(t) = \frac{\beta}{\Lambda\lambda} \exp\left(\frac{\rho\lambda}{\beta - \rho} t\right) \quad (3.55)$$

Substitui-se a equação (3.55) na equação (3.53) para se obter:

$$n_{PJ}(t) = \frac{\beta}{\beta - \rho} \exp\left(\frac{\rho\lambda}{\beta - \rho} t\right) \quad (3.56)$$

Note que a equação (3.56) corresponde exatamente ao primeiro termo da equação (3.50) e por isso chamado de componente PJ. Uma vez que este método SCM é bastante simples e demonstra de fato eliminar o problema da rigidez, ele foi o método escolhido para ser estudado de modo mais aprofundado.

Para a implementação do método SCM, procurou-se seguir com o maior rigor possível os procedimentos descritos no artigo de CHAO & ATTARD [11]. Há de se destacar que algumas lacunas no artigo tiveram que ser deduzidas. Assim será descrito a seguir o procedimento que foi adotado.

Em primeiro lugar, desprezaram-se as fontes externas $q(t)$ e considerou-se o número de precursores igual a seis. Em seguida foi feito o desacoplamento das equações (2.26) e (2.27), usando-se as definições:

$$c_i(t) \equiv \bar{c}_i(t) e^{\int_0^t u(s) ds} \quad (3.57)$$

$$S(t) \equiv \sum_i \lambda_i c_i(t) e^{\int_0^t u(s) ds} \quad (3.58)$$

Primeiramente substituiu-se (3.57) em (2.27), obtendo-se :

$$\frac{d\bar{c}_i(t)}{dt} = \frac{\beta_i}{\Lambda} n(t) e^{-\int_0^t u(s) ds} - (u(t) + \lambda_i) \bar{c}_i(t) \quad , \quad i = 1, 2, \dots, 6 \quad (3.59)$$

Em seguida, substituiu-se (3.57) em (2.26) e levando-se em conta a definição (3.58), obteve-se :

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda} n(t) + S(t) \quad (3.60)$$

Divide-se a equação (3.60) por $n(t)$,

$$\frac{\frac{dn(t)}{dt}}{n(t)} = \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda} + \frac{S(t)}{n(t)} \quad (3.61)$$

onde usando a definição:

$$w(t) \equiv \frac{\frac{dn(t)}{dt}}{n(t)} = \frac{d \log(n(t))}{dt} \quad (3.62)$$

é possível se obter:

$$n(t) = \frac{S(t)}{w(t) - \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda}} \quad (3.63)$$

Substitui-se finalmente as equações (3.58) e (3.63), na equação (3.59):

$$\frac{d\bar{c}_i(t)}{dt} = \frac{\beta_i \sum_j \lambda_j c_j(t)}{\Lambda w(t) - \rho(t) + \beta} - (u(t) + \lambda_i) \bar{c}_i(t) \quad , \quad i = 1, 2, \dots, 6 \quad (3.64)$$

Note que as equações (3.60) e (3.64) são equivalentes as equações (2.26) e (2.27) respectivamente, mas não estão mais acopladas. Para efetuar o desacoplamento usaram-se as funções $w(t)$ e $u(t)$ definidas como se segue:

$$w(t) \equiv \frac{d \log(n(t))}{dt} \quad (3.65)$$

$$u(t) \equiv \frac{d \log(S(t))}{dt} \quad (3.66)$$

As equações (3.60), (3.64), (3.65) e (3.66) formam o conjunto completo de equações do SCM. As condições iniciais a serem satisfeitas são:

$$u(0) = 0 \quad ; \quad w(0) = \frac{\rho(0)}{\Lambda} \quad ; \quad n(0) = n_0 \quad ; \quad c_i(0) = \frac{n_0 \beta_i}{\Lambda \lambda_i} \quad (3.67)$$

A equação (3.60) pode facilmente ser resolvida analiticamente, pois se trata de uma equação diferencial linear de primeira ordem. A sua solução analítica é :

$$n(t) = n_0 e^{\int_0^t \frac{\rho(v)-\beta}{\Lambda} dv} + e^{\int_0^t \frac{\rho(v)-\beta}{\Lambda} dv} \int_0^t S(\xi) e^{-\int_0^\xi \frac{\rho(v)-\beta}{\Lambda} dv} d\xi \quad (3.68)$$

Note que a integral $\int_0^t \frac{\rho(v)-\beta}{\Lambda} dv$ pode ser resolvida analiticamente pois a princípio a função $\rho(t)$ é conhecida. Mas a integral $\int_0^t S(\xi) e^{-\int_0^\xi \frac{\rho(v)-\beta}{\Lambda} dv} d\xi$ envolve a função $S(t)$ que não tem

forma analítica e é definida pelos pontos anteriores. Isso implica que esta integral só pode ser resolvida através de algum método numérico.

Já a equação (3.64) é resolvida pelo método de discretização por diferenças finitas e de modo geral pode ser escrita como se segue:

$$c_{i\ k+1} = c_{i\ k}(1 - (u_k + \lambda_i)\Delta t) + \frac{\beta_i \sum_j \lambda_j c_{j\ k} \Delta t}{\Lambda w_k - \rho(t_k) + \beta} \quad (3.69)$$

Onde w_k e u_k são determinados através das equações (3.65) e (3.66) para cada passo k anterior ao passo atual.

Foi feito o estudo para alguns casos específicos de reatividade. De início tratamos do problema de reatividade constante $\rho(t) = \rho_0$, onde a discretização da equação (3.68) resulta na equação (3.70) a seguir:

$$n_{k+1} = (n_k + S_k \frac{\Delta t}{2}) e^{\frac{\rho_0 - \beta}{\Lambda} \Delta t} + S_{k+1} \frac{\Delta t}{2} \quad (3.70)$$

Para o caso da reatividade do tipo rampa, onde tem-se que $\rho(t) = \rho_0 t$, pode-se escrever que:

$$n_{k+1} = (n_k + S_k \frac{\Delta t}{2}) e^{\frac{\rho_0(t + \Delta t/2) - \beta}{\Lambda} \Delta t} + S_{k+1} \frac{\Delta t}{2} \quad (3.71)$$

E para a reatividade senoidal, com $\rho(t) = \rho_0 \text{sen}(\frac{\pi t}{T})$ tem-se que:

$$n_{k+1} = (n_k + S_k \frac{\Delta t}{2}) e^{[\frac{\rho_0 T}{\pi \Lambda} \text{sen}(\frac{\pi t}{T}) \text{sen}(\frac{\pi \Delta t}{T}) - \frac{\beta \Delta t}{T}]} + S_{k+1} \frac{\Delta t}{2} \quad (3.72)$$

Usou-se a equação (3.65) para realimentar a função $w(t)$ na equação (3.64) e repetiu-se o processo até $w(t)$ convergir (o que requer apenas duas ou três iterações). O cálculo para o

passo de tempo atual termina com o cálculo dos valores de $w(t)$ e $u(t)$ através das equações (3.65) e (3.66), respectivamente. Os seus valores futuros são previstos por extrapolação linear e repetimos todo o processo para o passo seguinte. Note-se que é necessária apenas a convergência de $w(t)$ e não de $u(t)$, pois esta representa apenas um recurso de cálculo, sendo a princípio arbitrária .

Capítulo 4

O Aperfeiçoamento do Método SCM

Com o objetivo de aperfeiçoar o método SCM original, que foi descrito no capítulo anterior, foram introduzidas modificações que tornam o método mais preciso e eficiente. Essas modificações foram divididas em quatro etapas, que serão apresentadas neste capítulo. A intenção é obter resultados melhores que aqueles obtidos pelo método proposto por CHAO & ATTARD [13].

Na primeira modificação proposta foi considerado que a função $U(t)$ pode ser desprezada no cálculo. Segundo CHAO & ATTARD [13], o seu uso não é relevante ao método SCM, tendo sido utilizada apenas como um recurso de implementação do cálculo. Na implementação que fizemos do método SCM, julgamos que o uso da função $U(t)$ não representa nenhum ganho em termos de velocidade de cálculo e nem em termos de precisão, porque o valor da função $S(t)$ permanece aproximadamente constante, o que implica que a função $U(t)$ é, de fato, desprezível.

Na segunda modificação proposta, ainda permanece sendo considerado que a função $U(t)$ é desprezível, mas o cálculo dos precursores $c_i(t)$ passa a ser feito de modo analítico, ao invés de ser feito de modo discreto (como na primeira modificação). O cálculo de $n(t)$ continua sendo feito da mesma forma, ou seja, de modo analítico. Assim, todas as soluções das Equações da Cinética Pontual são obtidas de modo analítico. É bom deixar bem claro que quando é afirmado que determinada solução é analítica estamos na verdade afirmando que a

solução das equações desacopladas é obtida pelo método matemático de obtenção de solução para uma equação diferencial linear de primeira ordem e partir desta solução obtém-se uma expressão discretizada.

Na terceira modificação proposta, ainda permanece sendo considerado que a função $U(t)$ é desprezível, mas o cálculo de $n(t)$ passa a ser feito de modo discreto, ao invés de ser feito de modo analítico (como na primeira modificação). O cálculo dos precursores $c_i(t)$ continua sendo feito da mesma forma, ou seja, de modo discreto. Assim, todas as soluções das Equações da Cinética Pontual são obtidas de modo discreto. É bom deixar bem claro que quando é afirmado que determinada solução é discreta estamos na verdade afirmando que a solução das equações desacopladas é obtida pelo método de diferenças finitas, ou seja, primeiro desacoplamos e depois aplicamos diferenças finitas.

Na quarta modificação proposta, ainda permanece sendo considerado que a função $U(t)$ é desprezível, mas o cálculo de $n(t)$ passa a ser feito de modo discreto, ao invés de ser feito de modo analítico (como na primeira modificação). O cálculo dos precursores $c_i(t)$ passa a ser feito de modo analítico, ao invés de ser feito de modo discreto (como na primeira modificação).

Na seqüência, serão apresentadas as quatro modificações básicas efetuadas no método proposto originalmente por CHAO & ATTARD [11], a fim de ser possível apreciá-las com detalhes.

4.1 Aproximação da função $U(t)$

É proposto por CHAO & ATTARD [13] o uso da função $U(t)$ a fim de otimizar a implementação do seu método. Ela foi definida como se segue:

$$U(t) = \frac{d \log(S(t))}{dt} \quad (4.1)$$

onde tem-se que :

$$S(t) = \sum_j \lambda_j c_j(t) e^{\int_0^t U(s) ds} \quad (4.2)$$

Da equação (4.1) pode-se escrever que :

$$U(t) = \frac{d \log(S(t))}{dt} = \frac{\frac{dS(t)}{dt}}{S(t)} \quad (4.3)$$

Partindo da hipótese de que $S(t)$ varia muito suavemente ao longo do tempo, ou seja, de que $S(t)$ é aproximadamente constante, a equação (4.3) se reduz à:

$$U(t) \simeq 0, \quad (4.4)$$

uma vez que:

$$\frac{dS(t)}{dt} \simeq 0 \quad \text{pois } S(t) \simeq \text{constante} \quad (4.5)$$

Na verdade, foram os resultados obtidos através da implementação do método SCM original que nos sugeriram que a função $S(t)$ seria aproximadamente constante. Os resultados estão apresentados no capítulo 5, mas é possível obter uma justificativa matemática para essa aproximação.

Substituindo-se a equação (4.1) na equação (4.2) :

$$S(t) = \sum_j \lambda_j c_j(t) e^{\int_0^t \frac{d \log(S(s))}{ds} ds} \quad (4.6)$$

$$S(t) = \sum_j \lambda_j c_j(t) e^{[\log(S(t)) - \log(S(0))]} \quad (4.7)$$

$$S(t) = \sum_j \lambda_j c_j(t) e^{\log\left(\frac{S(t)}{S(0)}\right)} \quad (4.8)$$

$$S(t) = \sum_j \lambda_j c_j(t) \frac{S(t)}{S(0)} \quad (4.9)$$

$$S(0) = \sum_j \lambda_j c_j(t) \quad (4.10)$$

Esta equação (4.10) sugere que realmente a função $S(t)$ é aproximadamente constante porque o valor do somatório $\sum_j \lambda_j c_j(t)$ é sempre igual ao valor inicial $S(0)$. Considerando $U(t)$ igual a zero na equação (4.2), obtem-se :

$$S(t) = \sum_j \lambda_j c_j(t) \quad (4.11)$$

Essa mudança implica que os cálculos feitos no capítulo anterior devem ser refeitos, como mostrado a seguir.

Primeiramente é dispensada a mudança de $c_i(t)$ por $\bar{c}_i(t)$. Assim , obtem-se :

$$\frac{dc_i(t)}{dt} = \frac{\beta_i}{\Lambda} n(t) - \lambda_i c_i(t) \quad , \quad i = 1, 2, \dots, 6 \quad (4.12)$$

Em seguida , substituiu-se (4.11) em (2.26) :

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda} n(t) + S(t) \quad (4.13)$$

Divide-se a equação (4.13) por $n(t)$,

$$\frac{\frac{dn(t)}{dt}}{n(t)} = \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda} + \frac{S(t)}{n(t)} \quad (4.14)$$

onde usando a definição abaixo :

$$W(t) = \frac{\frac{dn(t)}{dt}}{n(t)} = \frac{d \log(n(t))}{dt} \quad (4.15)$$

é possível obter:

$$n(t) = \frac{S(t)}{W(t) - \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda}} \quad (4.16)$$

Substitui-se finalmente a equação (4.16) na equação (4.12) :

$$\frac{dc_i(t)}{dt} = \frac{\beta_i S(t)}{\Lambda W(t) - \rho(t) + \beta} - \lambda_i c_i(t) \quad , \quad i = 1, 2, \dots, 6 \quad (4.17)$$

As equações (4.13), (4.15) e (4.17) formam o conjunto completo das equações necessárias ao método SCM com a primeira proposta de modificação implementada. As equações que foram efetivamente implementadas computacionalmente são obtidas a partir destas. Os resultados obtidos dessa forma fazem parte do capítulo seguinte, onde serão devidamente analisados .

De modo análogo ao artigo de CHAO & ATTARD [13], foi obtida a solução analítica da equação (4.13) através de sua integração.

$$n(t) = n_0 e^{\int_0^t \frac{\rho(v)-\beta}{\Lambda} dv} + e^{\int_0^t \frac{\rho(v)-\beta}{\Lambda} dv} \int_0^t S(\xi) e^{-\int_0^\xi \frac{\rho(v)-\beta}{\Lambda} dv} d\xi \quad (4.18)$$

Nota-se que, no caso desta equação não houve alteração em relação ao método original, o que implica que as equações decorrentes desta permanecem as mesmas.

A partir da equação (4.17) usando-se diferenças finitas, pode-se obter:

$$c_{ik+1} = (1 - \lambda_i \Delta t) c_{ik} + \Delta t \frac{\beta_i S_k}{\Lambda W_k - \rho(t) + \beta}, \quad i = 1, 2, \dots, 6 \quad (4.19)$$

Dessa forma, nesta primeira modificação, fizemos apenas a eliminação da função $U(t)$, sendo que todos os outros procedimentos continuaram os mesmos.

4.2 Cálculo da potência e dos precursores de modo analítico

A fim de verificar o comportamento do SCM com ambas as equações, da potência e dos precursores, calculadas de modo analítico, efetuou-se essa modificação, mas mantendo-se a primeira modificação que diz respeito à função $U(t)$.

Na primeira parte do problema, ou seja, o cálculo da equação da potência de modo analítico, vamos obter novamente a equação (4.18) a partir da equação (4.13). O procedimento adotado consistiu em multiplicar a equação (4.13) pelo fator integrante $e^{-\int_0^t \frac{\rho(v)-\beta}{\Lambda} dv}$, de modo a obter-se:

$$\frac{dn(t)}{dt} e^{-\int_0^t \frac{\rho(v)-\beta}{\Lambda} dv} - \frac{\rho(t) - \beta}{\Lambda} n(t) e^{-\int_0^t \frac{\rho(v)-\beta}{\Lambda} dv} = S(t) e^{-\int_0^t \frac{\rho(v)-\beta}{\Lambda} dv} \quad (4.20)$$

$$\frac{d\left(n(t) e^{-\int_0^t \frac{\rho(v)-\beta}{\Lambda} dv}\right)}{dt} = S(t) e^{-\int_0^t \frac{\rho(v)-\beta}{\Lambda} dv} \quad (4.21)$$

Integrando-se os dois lados da equação (4.21) é possível obter a equação (4.18).

Um procedimento análogo é aplicado na equação (4.17), a fim de que seja possível obter uma solução analítica. Multiplica-se a equação (4.17) pelo fator integrante $e^{\lambda_i t}$, como se segue:

$$\frac{dc_i(t)}{dt}e^{\lambda_i t} + \lambda_i c_i(t)e^{\lambda_i t} = \frac{\beta_i S(t)e^{\lambda_i t}}{\Lambda W(t) - \rho(t) + \beta} \quad , \quad i = 1, 2, \dots, 6 \quad (4.22)$$

$$\frac{d(c_i(t)e^{\lambda_i t})}{dt} = \frac{\beta_i S(t)e^{\lambda_i t}}{\Lambda W(t) - \rho(t) + \beta} \quad , \quad i = 1, 2, \dots, 6 \quad (4.23)$$

Integra-se os dois lados da equação (4.23), obtendo-se :

$$c_i(t)e^{\lambda_i t} - c_i(0) = \int_0^t \frac{\beta_i S(s)e^{\lambda_i s}}{\Lambda W(s) - \rho(s) + \beta} ds \quad , \quad i = 1, 2, \dots, 6 \quad (4.24)$$

$$c_i(t) = c_i(0)e^{-\lambda_i t} + e^{-\lambda_i t} \int_0^t \frac{\beta_i S(s)e^{\lambda_i s}}{\Lambda W(s) - \rho(s) + \beta} ds \quad , \quad i = 1, 2, \dots, 6 \quad (4.25)$$

Na verdade essas soluções expressas pelas equações (4.18) e (4.25) não são totalmente analíticas porque envolvem as funções $S(t)$ e $w(t)$ que não possuem uma forma analítica, mas são facilmente determinadas de modo iterativo. Para se aplicar as equações (4.25), são feitas as suas discretizações de modo que se obtém:

$$c_{ik+1} = \left(c_{ik} + \frac{\beta_i S_k}{\Lambda W_k - \rho_k + \beta} \right) e^{-\lambda_i \Delta t} + \frac{\beta_i S_{k+1}}{\Lambda W_{k+1} - \rho_{k+1} + \beta} \quad , \quad i = 1, 2, \dots, 6 \quad (4.26)$$

Note-se que $\rho(t)$ é uma função conhecida para todo o tempo t pertencente ao intervalo onde ocorreu a integração e portanto ρ_k e ρ_{k+1} e também todos os outros valores de ρ

são conhecidos antecipadamente, ou seja, a função $\rho(t)$ é conhecida em todo o intervalo de integração.

Os resultados obtidos a partir desta segunda modificação são apresentados no capítulo seguinte. O que se pode esperar destes resultados é que se obtenha uma melhora na solução do problema da rigidez ("stiffness") em relação aos resultados obtidos a partir da proposta original de CHAO & ATTARD [13].

Está implícito em todo esse procedimento o fato de que o valor de $S(t)$ não varia muito ao longo do tempo. Note-se que como o passo dos precursores é maior, é feita uma grande quantidade de cálculos para a potência com o mesmo valor de $S(t)$ que é determinado pela soma do produto de cada precursor por seu λ_i correspondente. Isso pode ser mais claramente observado na figura 4.1.

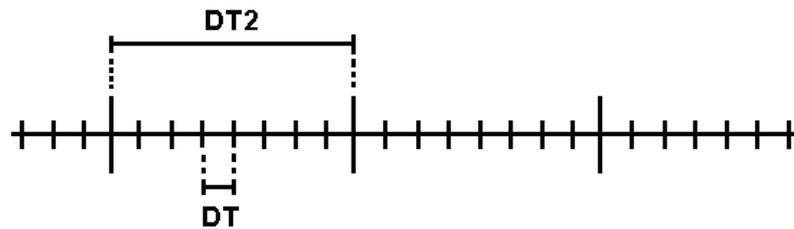


Figura 4.1: Passos para os cálculos da potência e dos precursores.

Na figura 4.1 tem-se que o DT corresponde ao passo usado para o cálculo da potência e o DT2 corresponde ao passo usado para o cálculo dos precursores, que também é o passo onde o valor de $S(t)$ é atualizado. É importante deixar bem claro que a quantidade de passos DT que aparecem na figura 4.1 dentro de DT2 são bem menores que a quantidade efetivamente implementada (existem 100 intervalos DT dentro de cada intervalo DT2). A figura 4.1 é, portanto, apenas ilustrativa.

Já está implicitamente considerada a hipótese da função $S(t)$ variar muito pouco ao longo do tempo, porque a atualização da função $S(t)$ ocorre depois de serem feitas cerca de cem

iterações para a potência normalizada $n(t)$.

4.3 Cálculo da potência e dos precursores de modo discreto

As expressões finais decorrentes da modificação feita no item anterior, ou seja, as equações (4.25) e todas decorrentes da equação (4.18), a saber as equações (3.70), (3.71) e (3.72) são mais complexas e elaboradas do que as expressões que podem ser deduzidas aplicando-se direto o método de diferenças finitas nas equações (4.13) e (4.17).

Nas expressões deduzidas de modo "semi-analítico" aparecem exponenciais que requerem um tempo de cálculo computacional considerável. Já as expressões obtidas pela discretização direta das citadas equações não apresentam expressões deste tipo. São expressões matemáticas bem mais simples e, portanto, de cálculo mais rápido.

Note-se que estas expressões deduzidas por diferenças finitas a partir das equações (4.13) e (4.17) não implicam nas mesmas expressões do método de diferenças finitas apresentado no capítulo 3 deste trabalho, porque neste primeiro aplicou-se a discretização direta nas equações (2.26) e (2.27) que continuam acopladas e, portanto, suscetíveis ao problema da rigidez. Já no caso atual, como estamos discretizando a partir das equações (4.13) e (4.17) que já são desacopladas, o espírito do método SCM foi mantido.

As deduções das expressões são bastante simples, sendo obtidas pela aplicação da aproximação (3.10) nas equações (4.13) e (4.17), obtendo-se:

$$n_{k+1} = \left(1 + \Delta t \frac{\rho_{k+1} - \beta}{\Lambda}\right) n_k + \Delta t S_k \quad (4.27)$$

$$c_{ik+1} = (1 - \lambda_i \Delta t) c_{ik} + \Delta t \frac{\beta_i S_k}{\Lambda W_k - \rho_{k+1} + \beta} \quad , \quad i = 1, 2, \dots, 6 \quad (4.28)$$

Todos os valores de $\rho(t)$ são conhecidos para todo o tempo t onde efetuamos o cálculo,

pois $\rho(t)$ é uma função conhecida analiticamente e assim, tem-se que :

$$\rho_{k+1} = \rho(t_{k+1}) \quad (4.29)$$

onde t_{k+1} é o tempo correspondente ao passo $k+1$

O resultado se encontra no capítulo seguinte , mas pode-se esperar que esta modificação possua um gasto de tempo computacional bastante reduzido.

4.4 Cálculo da potência de modo discreto e dos precursores de modo analítico

Nas seções anteriores, foram feitas modificações no modo como se calcula a potência e os precursores, mas em todas essas modificações se considerou a aproximação da função $U(t)$. Na primeira seção foi feita apenas a modificação de $U(t)$, mantendo o cálculo da potência de modo analítico e dos precursores de modo discreto. Na segunda seção considerou-se tanto o cálculo da potência, quanto o cálculo dos precursores de modo analítico. Na terceira seção considerou-se tanto o cálculo da potência, quanto o cálculo dos precursores de modo discreto. Por questão de simetria e para se completar todas as modificações possíveis, dentro desta idéia inicial, considera-se agora o cálculo da potência de modo discreto e o cálculo dos precursores de modo analítico.

Quando se faz o cálculo da potência e dos precursores de modo discreto, o que se espera a princípio é que com expressões matemáticas mais simples seja possível obter uma redução no gasto de tempo computacional, em relação ao método originalmente implementado. Quando se faz o cálculo da potência e dos precursores de modo analítico, o que se espera é que se tenha um ganho em relação a precisão do cálculo e em relação ao problema da rigidez ("stiffness"), em relação ao SCM.

Em CHAO & ATTARD [13] o problema da rigidez é apresentado como decorrente da solução obtida para o $n(t)$, que corresponde à potência normalizada, e dessa forma não

teria relação com a solução para os $c_i(t)$, os precursores. Essa modificação então se torna importante para se confirmar essa afirmação de CHAO & ATTARD [13], pois para o problema da rigidez ("stiffness"), esta modificação deve ter um desempenho quase igual ao método com potência e precursores calculados de modo discreto, mas deve ter um desempenho pior em se tratando do método com potência e precursores calculados de modo analítico.

As expressões matemáticas usadas neste método já foram deduzidas nos métodos modificados apresentados neste capítulo. Estas equações são bastante diversas daquelas obtidas pelo método original. São elas as equações (4.24), (4.25) e (4.27).

Capítulo 5

Resultados

Foram realizados testes de acordo com a mesma metodologia e com os parâmetros utilizados em outros trabalhos com a finalidade de comparar os resultados obtidos neste trabalho com os resultados de trabalhos similares existentes na literatura. O desempenho do método SCM foi analisado em face das diversas modificações nele implementadas, sendo comparado com o desempenho das implementações feitas do método de diferenças finitas e do SCM na sua versão original.

Quatro casos específicos foram testados e avaliados. Antes da apresentação dos resultados, é feita uma breve explicação de cada caso e de sua importância. Esses quatro casos são os mesmos que foram analisados em diversos artigos publicados anteriormente, como pode ser visto na seqüência desta seção.

5.1 Caso 1 - Degrau de Reatividade

A inserção de um degrau de reatividade ("step") consiste em se introduzir uma reatividade constante, dentro de um determinado intervalo de tempo. É lógico que se mantivermos uma reatividade positiva constante por um longo tempo, teremos a potência atingindo os valores máximos de operação e seremos forçados a inserir uma reatividade negativa, a fim de que não ocorra um risco de acidente. Se inserimos uma reatividade negativa por um longo tempo

o reator irá tender ao desligamento. Com isso, na prática, a inserção de um degrau de reatividade implica em nível de controle, que seja por um tempo reduzido. Na figura 5.1 pode-se observar essa questão, onde foi usado o método de diferenças finitas para se efetuar o cálculo. Ao término de 20 s verifica-se que a potência atingiu um valor cerca de 28 vezes maior que o valor da potência inicial. Para se fazer o efetivo controle do reator nuclear devemos manter a potência aproximadamente constante a custa de uma variação adequada da reatividade. Mas esse exemplo se aplica muito bem a situação de início de operação e de desligamento, quando efetivamente a intenção é de se alterar o nível de potência.

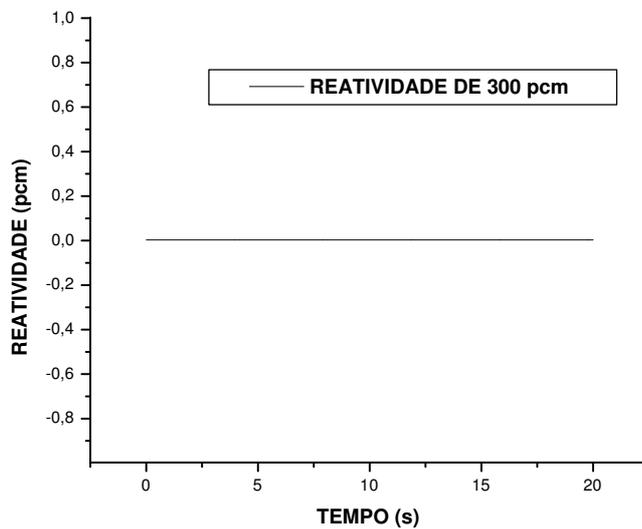


Figura 5.1 : Gráfico da Reatividade em função do tempo

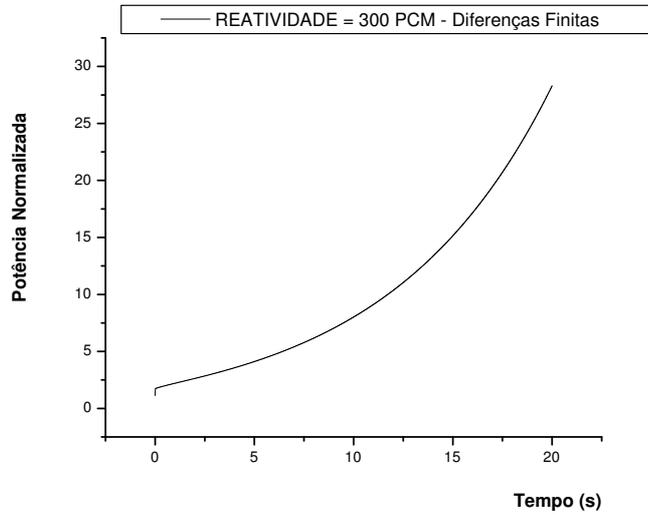


Figura 5.2 : Gráficos da Potência Normalizada em função do tempo

Nos testes feitos para este caso de inserção de reatividade constante ρ_0 , utilizamos as seguintes expressões para as modificações do método SCM.

Cálculo Analítico

$$n_{k+1} = \left(n_k + S_k \frac{\Delta t}{2}\right) e^{\frac{\rho_0 - \beta}{\Lambda} \Delta t} + S_{k+1} \frac{\Delta t}{2} \quad (5.1)$$

Cálculo Discreto

$$n_{k+1} = \left(1 + \Delta t \frac{\rho_0 - \beta}{\Lambda}\right) n_k + \Delta t S_k \quad (5.2)$$

Cálculo Analítico

$$c_{ik+1} = \left(c_{ik} + \frac{\beta_i S_k}{\Lambda W_k - \rho_0 + \beta} \right) e^{-\lambda_i \Delta t} + \frac{\beta_i S_{k+1}}{\Lambda W_{k+1} - \rho_0 + \beta} , \quad i = 1, 2, \dots, 6 \quad (5.3)$$

Cálculo Discreto

$$c_{ik+1} = (1 - \lambda_i \Delta t) c_{ik} + \Delta t \frac{\beta_i S_k}{\Lambda W_k - \rho_0 + \beta} , \quad i = 1, 2, \dots, 6 \quad (5.4)$$

Para a implementação do método SCM original usou-se a equação (5.1) e a seguinte equação:

$$c_{i \ k+1} = c_{i \ k} (1 - (u_k + \lambda_i) \Delta t) + \frac{\beta_i \sum_j \lambda_j c_{j \ k} \Delta t}{\Lambda W_k - \rho(t) + \beta} \quad (5.5)$$

Para a implementação do método de diferenças finitas usou-se as equações (3.11) e (3.12)

Nas tabelas 5.1 a 5.4 são apresentados os resultados e é feita a comparação com aqueles obtidos em CHAO & ATTARD [13] e também em outras referências , tais como KINARD & ALLEN [8] e SÁNCHEZ [9] . O cálculo do tempo computacional relativo TR foi feito dividindo-se o tempo computacional TC pelo tempo de reator (tempo real em que os processos físicos descritos ocorrem no reator) correspondente ao término do cálculo, o qual foi chamado de tempo máximo (T_{max}). Desta definição tem-se que TR é uma grandeza adimensional.

$$TR = \frac{TC}{T_{max}} \quad (5.6)$$

Para se conseguir a convergência da função $W(t)$ usou-se a seguinte relação:

$$\frac{W_{k+1} - W_k}{W_k} < \epsilon \quad (5.7)$$

onde o valor de ϵ é escolhido de modo a garantir a convergência do resultado.

Tabela 5.1 : Resultados para o caso 1 : STEP de reatividade com $\rho = 300$ pcm, passo de

$$DT = 10^{-6} \text{ s e } \epsilon = 10^{-5}$$

Metodo	T_{max} (s)	TC (s)	TR	$n(t)$ p/ t=1s	$n(t)$ p/ t=10s	$n(t)$ p/ t=20s
EXATO	—	—	—	2,2098	8,0192	28,297
PCA	—	—	—	2,2098	8,0192	28,297
RKG	—	—	—	2,20985	8,01891	28,2948
SCM(artigo)	—	—	—	2,2254	8,0324	28,351
Diferenças Finitas	20	6,469	0,323	2,2098	8,0192	28,2974
SCM (implem.)	20	4,813	0,241	2,2098	8,0194	28,2985
SCMM1 (da seq. 4.1)	20	4,547	0,227	2,2098	8,0194	28,2985
SCMM2 (da seq. 4.2)	20	4,625	0,231	2,2098	8,0192	28,2974
SCMM3 (da seq. 4.3)	20	4,406	0,220	2,2098	8,0194	28,2985
SCMM4 (da seq. 4.4)	20	4,427	0,221	2,2098	8,0192	28,2974

Tabela 5.2 : Resultados para o caso 1 : STEP de reatividade com $\rho = 550$ pcm, passo de $dt = 10^{-6}$ s e $\epsilon = 10^{-5}$

Metodo	T_{max} (s)	TC (s)	TR	$n(t)$ (t=0,1s)	$n(t)$ (t=2s)	$n(t)$ (t=10s)
EXATO	—	—	—	5,2100	43,025	1,3886+5
PCA	—	—	—	5,2100	43,025	1,3886+5
RKG	—	—	—	5,21000	43,0220	1,3880+5
SCM(artigo)	—	—	—	5,2057	43,024	1,3875+5
Diferenças Finitas	10	3,172	0,317	5,2100	43,0251	1,38860+5
SCM (implem.)	10	2,500	0,250	5,2101	43,0282	1,38903+5
SCMM1 (da seq. 4.1)	10	2,338	0,234	5,2101	43,0282	1,3890+5
SCMM2 (da seq. 4.2)	10	2,417	0,242	5,2100	43,0250	1,3886+5
SCMM3 (da seq. 4.3)	10	2,270	0,227	5,2101	43,0283	1,3890+5
SCMM4 (da seq. 4.4)	10	2,302	0,230	5,2100	43,0251	1,3886+5

Tabela 5.3 : Resultados para o caso 1 : STEP de reatividade com $\rho = 700$ pcm, passo de $dt = 10^{-6}$ s e $\epsilon = 10^{-5}$

Metodo	T_{max} (s)	TC (s)	TR	$n(t)$ (t=0,01s)	$n(t)$ (t=0,5s)	$n(t)$ (t=2s)
EXATO	—	—	—	4,5088	5,3459+3	2,0591+11
PCA	—	—	—	4,5088	5,3459+3	2,0591+11
RKG	—	—	—	4,50885	5,3445+3	2,05697+11
SCM(artigo)	—	—	—	4,5001	5,3530+3	2,0627+11
DF	2	0,635	0,318	4,5089	5,3457+3	2,0589+11
SCM	2	0,500	0,250	4,5088	5,3464+3	2,0602+11
SCMM1 (da seq. 4.1)	2	0,484	0,242	4,5088	5,3464+3	2,0602+11
SCMM2 (da seq. 4.2)	2	0,479	0,239	4,5088	5,3457+3	2,0588+11
SCMM3 (da seq. 4.3)	2	0,458	0,229	4,5089	5,3465+3	2,0603+11
SCMM4 (da seq. 4.4)	2	0,463	0,231	4,5089	5,3458+3	2,0590+11

Tabela 5.4 : Resultados para o caso 1 : STEP de reatividade com $\rho = 800$ pcm, passo de $dt = 10^{-6}$ s e $\epsilon = 10^{-5}$

Metodo	T_{max} (s)	TC (s)	TR	$n(t)$ (t=0,01s)	$n(t)$ (t=0,1s)	$n(t)$ (t=1s)
EXATO	—	—	—	6,2029	1,4104+3	6,1634+23
PCA	—	—	—	6,2029	1,4104+3	6,1634+23
RKG	—	—	—	6,20276	1,4101+3	6,1486+23
SCM(artigo)	—	—	—	6,2046	1,4089+3	6,1574+23
DF	1	0,318	0,318	6,2027	1,4102+3	6,1548+23
SCM	1	0,250	0,250	6,2028	1,4104+3	6,1560+23
SCMM1 (da seq. 4.1)	1	0,213	0,213	6,2028	1,4104+3	6,1560+23
SCMM2 (da seq. 4.2)	1	0,219	0,219	6,2027	1,4102+3	6,1559+23
SCMM3 (da seq. 4.3)	1	0,219	0,219	6,2028	1,4104+3	6,1553+23
SCMM4 (da seq. 4.4)	1	0,213	0,213	6,2027	1,4102+3	6,1552+23

O cálculo do tempo computacional TC foi feito através da média aritmética entre três execuções do código computacional usando-se o mesmo computador, programa e dados de entrada. Para que nenhum fator externo interferisse no cálculo, o computador utilizado para executar o programa foi desconectado da rede local, sendo desligado o antivírus de modo que nenhum outro aplicativo interferisse no tempo computacional. Apesar de todos esses cuidados, ainda assim ocorreu uma pequena diferença entre os tempos computacionais para o mesmo conjunto de parâmetros nucleares e passos DT e $DT2$. Já os resultados dos cálculos foram exatamente os mesmos, para cada conjunto de parâmetros e passos.

Foi calculado o erro relativo de cada resultado como se segue:

$$\delta n = \frac{|n_{CALCULADO} - n_{EXATO}|}{n_{EXATO}} \quad (5.8)$$

O erro relativo médio é calculado através da média aritmética de cada um dos erros relativos. O tempo relativo médio é obtido pela média aritmética dos tempos relativos das

tabelas anteriores. Pode-se observar na tabela 5.5 a seguir o desempenho de cada um deles. Para tanto, foi inventado um coeficiente de desempenho definido pelo inverso da soma do erro relativo médio com o tempo relativo médio e acrescido de um, ou seja,

$$\eta = \frac{1}{TR_{MEDI0} + ERRO_{MEDI0} + 1} \quad (5.9)$$

Note que os valores de TR_{MEDI0} e $ERRO_{MEDI0}$ são absolutos, embora nas tabelas apresentadas o $ERRO_{MEDI0}$ e o coeficiente de desempenho sejam apresentados na forma percentual. Com um tempo computacional tendendo a zero (resposta imediata) e com um erro igual zero o coeficiente de desempenho será igual a 1 (máximo desempenho ou 100%). Se ambos forem muito grandes o coeficiente de desempenho será semelhante a zero (mínimo desempenho).

Tabela 5.5 : Desempenho para o caso 1 : STEP de reatividade com $DT=10^{-6}$ s

Metodo	TR_{MEDI0}	$ERRO_{MEDI0}$ (%)	η (coef. de desempenho) (%)
DF	0,3190	0,015	75,8
SCM	0,2476	0,020	80,1
SCMM1 (da seq. 4.1)	0,2292	0,020	81,3
SCMM2 (da seq. 4.2)	0,2328	0,013	81,1
SCMM3 (da seq. 4.3)	0,2238	0,022	81,7
SCMM4 (da seq. 4.4)	0,2242	0,014	81,7

É de grande importância analisar o problema no aspecto de sua rigidez. Para tanto, verificamos o quanto a precisão do método se altera quando fazemos variar o valor dos passos DT e $DT2$. Escolhemos apresentar os resultados graficamente para o valor da reatividade igual a 800 pcm, pois é com este valor de reatividade que o problema aparece de forma mais clara, como pode ser visto nas figuras 5.3 até 5.8.

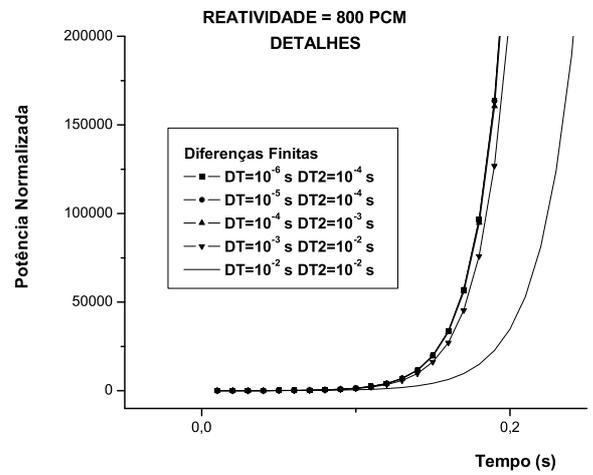
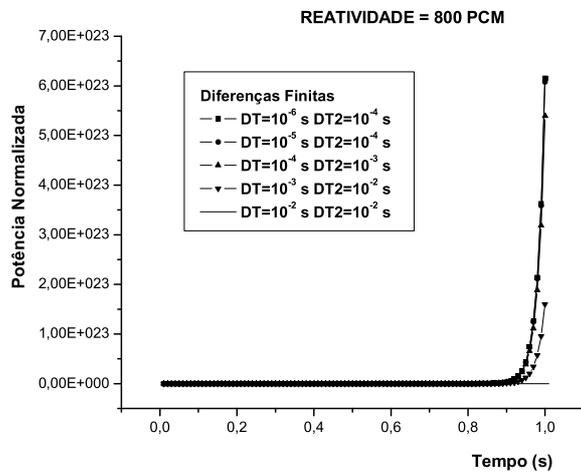


Figura 5.3 : Gráficos da Potência Normalizada em função do tempo para uma reatividade de 800 pcm calculada pelo Método de Diferenças Finitas

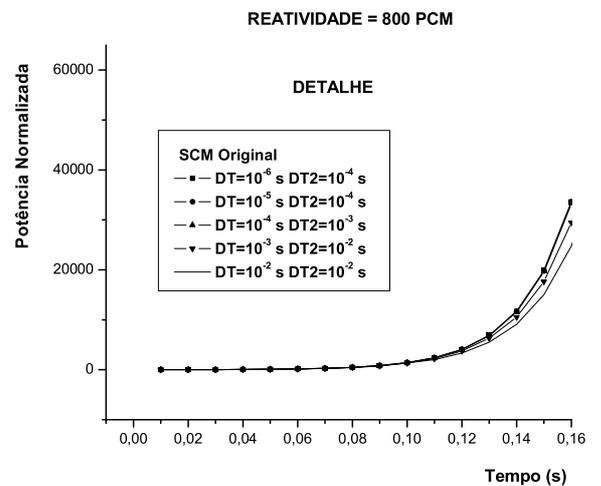
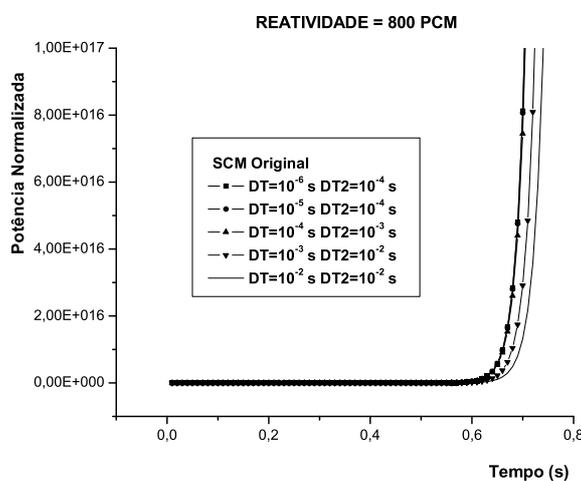


Figura 5.4 : Gráficos da Potência Normalizada em função do tempo para uma reatividade de 800 pcm calculada pelo Método SCM Original

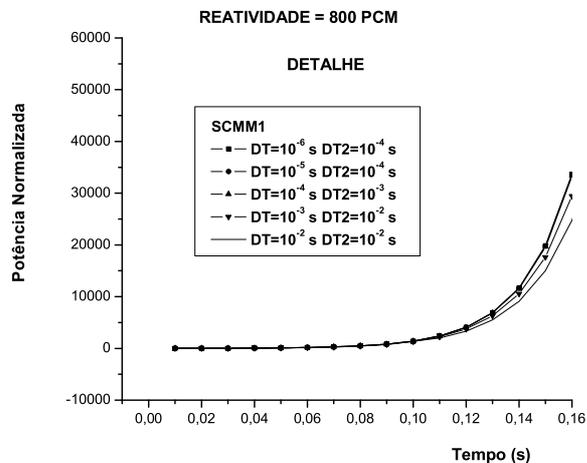
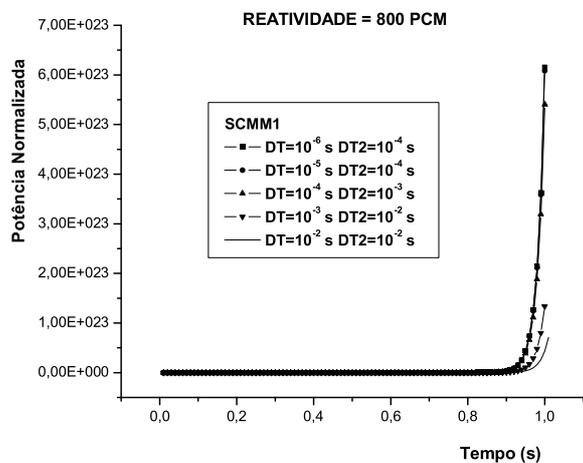


Figura 5.5 : Gráficos da Potência Normalizada em função do tempo para uma reatividade de 800 pcm calculada pelo Método SCMM1

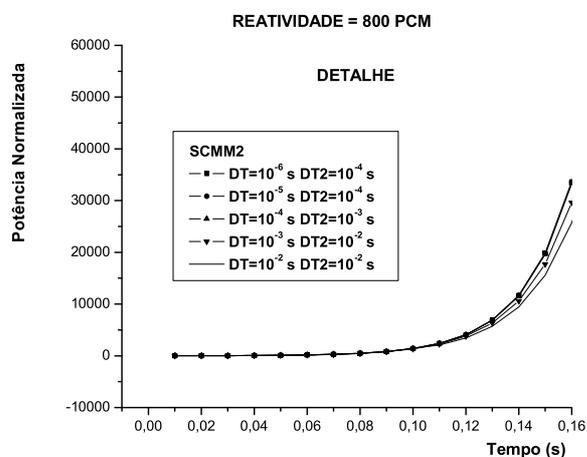
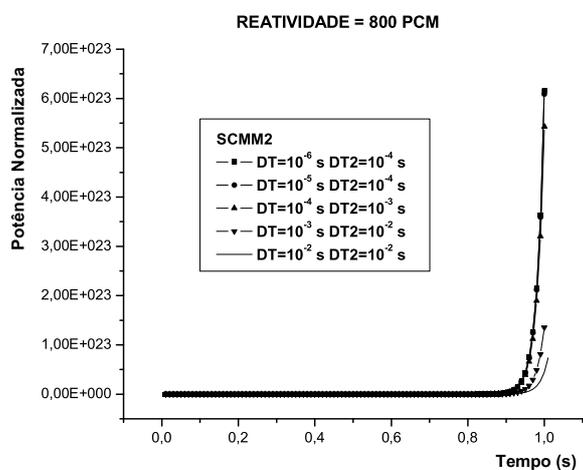


Figura 5.6 : Gráficos da Potência Normalizada em função do tempo para uma reatividade de 800 pcm calculada pelo Método SCMM2

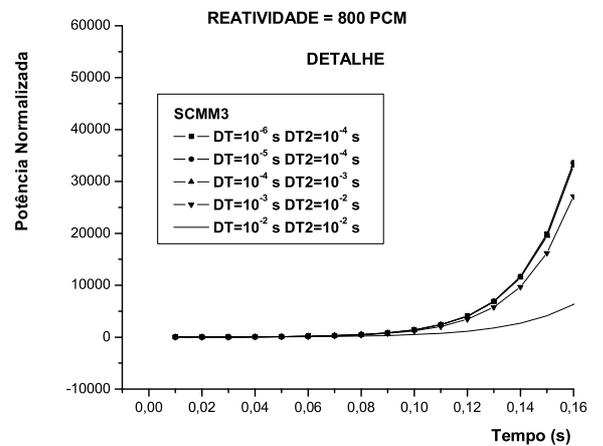
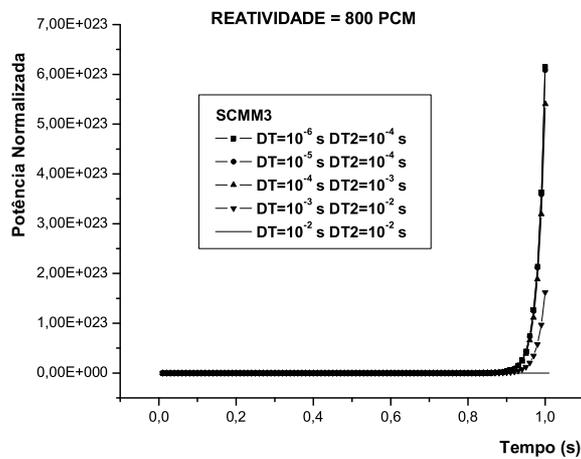


Figura 5.7 : Gráficos da Potência Normalizada em função do tempo para uma reatividade de 800 pcm calculada pelo Método SCMM3

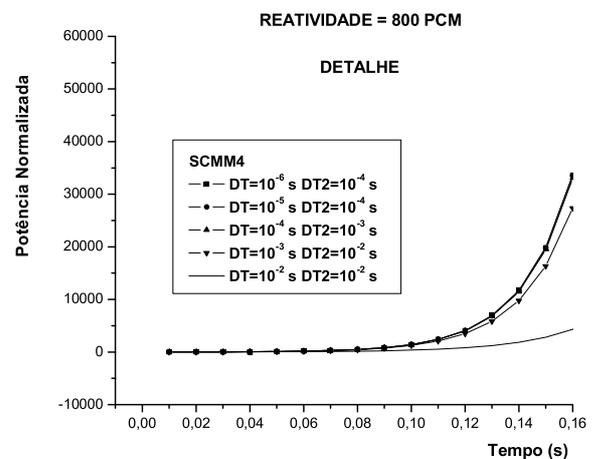
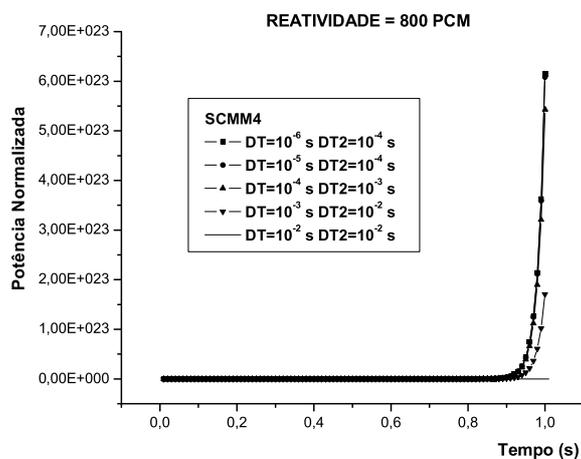


Figura 5.8 : Gráficos da Potência Normalizada em função do tempo para uma reatividade de 800 pcm calculada pelo Método SCMM4

O primeiro fato a ser destacado, pela observação das figuras 5.3 até 5.8, é que o método SCM na sua formatação original realmente reduz sensivelmente o problema do stiffness

(rigidez). Nos detalhes das figuras 5.3 e 5.4, pode-se observar com clareza que o efeito provocado pela rigidez para o início do processo iterativo é muito menor no resultado do SCM original do que no resultado por Diferenças Finitas. É possível dessa forma comprovar que o SCM de fato reduz o problema da rigidez.

Note que esse teste levou o método a um extremo de um DT tão grande quanto o tempo inicial, no caso da reatividade igual a 800 pcm. Verifica-se um erro médio bastante elevado. Isso ocorre porque os métodos numéricos usados para a discretização das Equações da Cinética Pontual neste trabalho não conseguem ter uma boa eficiência para um passo muito grande. Assim, buscou-se comparar as várias possibilidades testadas em uma situação exageradamente adversa de modo intencional, para se ressaltar o efeito da rigidez.

Os gráficos correspondentes aos testes de rigidez realizados para os casos de reatividade igual a 300, 550 e 700 pcm de modo análogo ao que foi feito no caso da reatividade igual a 800, não foram apresentados para não saturar o texto.

Foram feitas análises semelhantes a que foi apresentada na tabela 5.5 com $DT=10^{-6}$ s para DTs iguais a 10^{-5} s, 10^{-4} s, 10^{-3} s e 10^{-2} s. Esses resultados são apresentados nas tabelas 5.6 até 5.9.

Tabela 5.6 :Desempenho para o caso 1 : STEP de reatividade com $DT=10^{-5}$ s

Metodo	TR_{MEDIO}	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho)
DF	0,6450	0,144	60,7
SCM	0,5050	0,133	66,4
SCMM1 (da seq. 4.1)	0,4675	0,134	68,1
SCMM2 (da seq. 4.2)	0,4700	0,123	68,0
SCMM3 (da seq. 4.3)	0,4375	0,143	69,5
SCMM4 (da seq. 4.4)	0,4675	0,131	68,1

Tabela 5.7 :Desempenho para o caso 1 : STEP de reatividade com $DT=10^{-4}$ s

Metodo	TR_{MEDIO}	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho)
DF	0,0850	1,360	91,0
SCM	0,0550	1,277	93,7
SCMM1 (da seq. 4.1)	0,0525	1,278	93,9
SCMM2 (da seq. 4.2)	0,0725	1,168	92,2
SCMM3 (da seq. 4.3)	0,0400	1,360	94,9
SCMM4 (da seq. 4.4)	0,0425	1,245	94,8

Tabela 5.8 :Desempenho para o caso 1 : STEP de reatividade com $DT=10^{-3}$ s

Metodo	TR_{MEDIO}	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho)
DF	0,0300	8,821	89,4
SCM	0,0000	8,660	92,0
SCMM1 (da seq. 4.1)	0,0150	8,660	90,8
SCMM2 (da seq. 4.2)	0,0000	7,981	92,6
SCMM3 (da seq. 4.3)	0,0000	9,159	91,6
SCMM4 (da seq. 4.4)	0,0275	8,249	90,1

Tabela 5.9 :Desempenho para o caso 1 : STEP de reatividade com $DT=10^{-2}$ s

Metodo	TR_{MEDIO}	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho)
DF	0,0000	175,111	36,3
SCM	0,0000	25,966	79,4
SCMM1 (da seq. 4.1)	0,0000	25,966	79,4
SCMM2 (da seq. 4.2)	0,0000	24,896	80,1
SCMM3 (da seq. 4.3)	0,0000	168,838	37,2
SCMM4 (da seq. 4.4)	0,0000	44,897	69,0

Na média de todos os testes de desempenho, apresentados nas tabelas 5.5, 5.6, 5.7, 5.8 e 5.9, o melhor desempenho é o da segunda modificação aplicada ao método SCM, ou seja, aquela onde os cálculos de $n(t)$ e de $c_i(t)$ são feitos de modo analítico. Isso pode ser verificado na tabela 5.10.

Tabela 5.10 :Teste da Rigidez para o caso 1 : STEP de reatividade com a media dos resultados dos testes anteriores

Metodo	TR_{MEDIO}	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho)
DF	0,2158	37,09	63,0
SCM	0,1615	7,21	81,1
SCMM1 (da seq. 4.1)	0,1528	7,21	81,6
SCMM2 (da seq. 4.2)	0,1551	6,84	81,7
SCMM3 (da seq. 4.3)	0,1403	35,90	66,7
SCMM4 (da seq. 4.4)	0,1523	10,91	79,3

5.2 Caso 2 - Rampa de Reatividade

Uma rampa de reatividade consiste em uma reatividade linear, de acordo com a expressão abaixo. Esta reatividade é também representada na figura 5.9.

$$\rho(t) = \rho_0 t \quad (5.10)$$

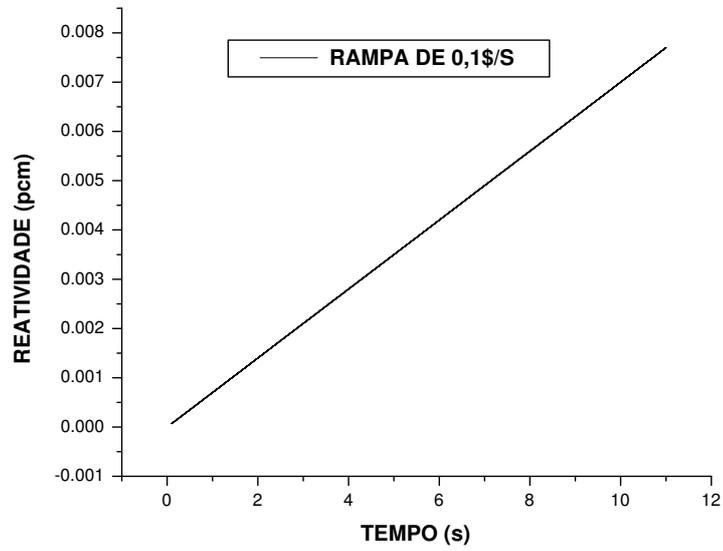


Figura 5.9 : Gráfico da reatividade em função do tempo entre 0 e 11 s

Para obter-se as expressões matemáticas necessárias para a implementação do método, substituímos a equação (5.10) nas equações (4.18), (4.19), (4.26) e (4.27), lembrando que:

$$\rho_{k+1} = \rho_0 t_{k+1} \quad (5.11)$$

e ainda

$$t_{k+1} = t_k + DT = (k + 1)DT \quad (5.12)$$

onde DT é o passo definido no capítulo 4.

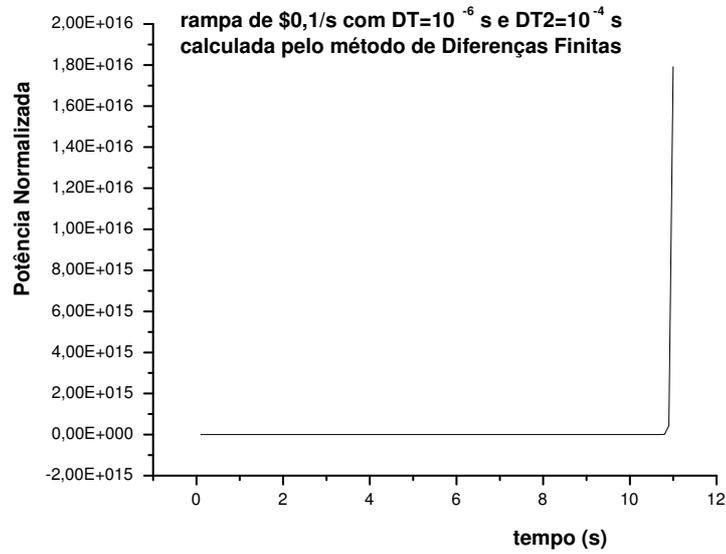


Figura 5.10 : Potência Normalizada em função do tempo para uma rampa de \$0,1/s\$,
 $DT=10^{-6}$ s e $DT2=10^{-4}$ s

As equações usadas na implementação do método de SCM com as quatro modificações estão apresentadas a seguir:

Cálculo Discreto

$$c_{ik+1} = (1 - \lambda_i \Delta t_2) c_{ik} + \Delta t_2 \frac{\beta_i S_k}{\Lambda W_k - \rho_{k+1} + \beta} \quad (5.13)$$

Cálculo Analítico

$$c_{ik+1} = \left(c_{ik+1} + \frac{\Delta t_2}{2} \frac{\beta_i S_k}{\Lambda W_k - \rho_{k+1} + \beta} \right) e^{-\lambda_i \Delta t_2} + \frac{\Delta t_2}{2} \frac{\beta_i S_{k+1}}{\Lambda W_{k+1} - \rho_{k+1} + \beta - \rho_0 \Delta t_2} \quad (5.14)$$

Cálculo Analítico

$$n_{k+1} = \left(n_k + S_k \frac{\Delta t}{2}\right) e^{\frac{\rho_{k+1}}{\Lambda} \Delta t + \frac{\rho_0 \Delta t / 2 - \beta}{\Lambda} \Delta t} + S_{k+1} \frac{\Delta t}{2} \quad (5.15)$$

Cálculo Discreto

$$n_{k+1} = \left(1 + \Delta t \frac{\rho_{k+1} - \beta}{\Lambda}\right) n_k + \Delta t S_k \quad (5.16)$$

Para os testes com o SCM original, usou-se as seguintes expressões:

Cálculo Discreto

$$c_{ik+1} = (1 - (\lambda_i + u_k) \Delta t) c_{ik} + \Delta t \frac{\beta_i S_k}{\Lambda W_k - \rho_{k+1} + \beta} \quad (5.17)$$

Cálculo Analítico

$$n_{k+1} = \left(n_k + S_k \frac{\Delta t}{2}\right) e^{\frac{\rho_{k+1}}{\Lambda} \Delta t + \frac{\rho_0 \Delta t / 2 - \beta}{\Lambda} \Delta t} + S_{k+1} \frac{\Delta t}{2} \quad (5.18)$$

E no caso da implementação pelo método de diferenças finitas, tem-se que:

$$n_{k+1} = n_k + \Delta t \frac{\rho_{k+1} - \beta}{\Lambda} n_k + \Delta t \sum_i \lambda_i c_{ik} \quad (5.19)$$

$$c_{ik+1} = c_{ik} + \Delta t \frac{\beta_i}{\Lambda} n_k - \Delta t \lambda_i c_{ik} \quad (5.20)$$

Procurou-se seguir o mesmo procedimento de teste exposto em CHAO & ATTARD [13], a fim de que fosse possível uma comparação. Foi utilizada uma rampa com $\rho_0 = \$0,1/s$ e os mesmos parâmetros nucleares dos testes feitos com a inserção de um degrau de reatividade na seção anterior. Os resultados são apresentados na tabela 5.11 e na figura 5.10 (calculado pelo método de diferenças finitas) para um $DT=10^{-6}$ e um $DT2=10^{-4}$.

Tabela 5.11 : Resultados para o caso 2 :reatividade do tipo rampa com $\rho_0 = \$0,1/s$ com o passo de $dt = 10^{-6}$ s , $\epsilon = 10^{-5}$ e $T_{MAX} = 11$ s

Metodo	TC (s)	TR	t=2s	t=4s	t=6s	t=8s	t=9s	t=10s	t=11s
EXATO	—	—	1,3382	2,2283	5,5815	42,781	487,45	4,5109+5	1,7919+16
PCA	—	—	1,3382	2,2278	5,5802	42,772	487,35	—	—
RKG	—	—	1,3382	2,2284	5,582	42,786	487,51	4,5115+5	1,7904+16
SCM(art.)	—	—	1,3382	2,2284	5,5819	42,788	487,81	4,5391+5	1,9593+16
DF	3,56	0,32	1,3382	2,2284	5,5820	42,786	487,52	4,5116+5	1,7916+16
SCM	4,51	0,41	1,3382	2,2285	5,5822	42,7887	487,58	4,5131+5	1,7916+16
SCMM1	4,34	0,40	1,3382	2,2285	5,5822	42,7887	487,58	4,5131+5	1,7916+16
SCMM2	4,30	0,39	1,3382	2,2285	5,5822	42,7888	487,59	4,5139+5	1,7949+16
SCMM3	2,35	0,21	1,3382	2,2285	5,5822	42,7888	487,58	4,5132+5	1,7929+16
SCMM4	2,38	0,22	1,3382	2,2285	5,5822	42,7888	487,59	4,5139+5	1,7950+16

Nas tabelas 5.12 até 5.15 são apresentados os desempenhos de cada método aperfeiçoado para os DTs variando de 10^{-6} s até 10^{-2} s.

Tabela 5.12 : Desempenho para o caso 2 : Reatividade do tipo Rampa com $DT=10^{-6}$ s

Metodo	TR	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho) (%)
DF	0,324	0,018	75,5
SCM	0,410	0,027	70,9
SCMM1 (da seq. 4.1)	0,395	0,027	71,7
SCMM2 (da seq. 4.2)	0,391	0,054	71,9
SCMM3 (da seq. 4.3)	0,214	0,036	82,4
SCMM4 (da seq. 4.4)	0,216	0,055	82,2

Tabela 5.13 : Desempenho para o caso 2 : Reatividade do tipo Rampa com $DT=10^{-5}$ s

Metodo	TR	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho) (%)
DF	0,033	0,038	96,8
SCM	0,045	0,037	95,7
SCMM1 (da seq. 4.1)	0,043	0,037	95,8
SCMM2 (da seq. 4.2)	0,044	0,018	95,8
SCMM3 (da seq. 4.3)	0,025	0,034	97,6
SCMM4 (da seq. 4.4)	0,026	0,026	97,5

Tabela 5.14 : Desempenho para o caso 2 : Reatividade do tipo Rampa com $DT=10^{-4}$ s

Metodo	TR	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho) (%)
DF	0,0033	0,473	99,2
SCM	0,0052	0,419	99,1
SCMM1 (da seq. 4.1)	0,0052	0,419	99,1
SCMM2 (da seq. 4.2)	0,0047	0,236	99,3
SCMM3 (da seq. 4.3)	0,0023	0,389	99,4
SCMM4 (da seq. 4.4)	0,0028	0,204	99,5

Tabela 5.15 : Desempenho para o caso 2 : Reatividade do tipo Rampa com $DT=10^{-3}$ s

Metodo	TR	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho) (%)
DF	0,0000	4,16	96,0
SCM	0,0000	4,10	96,1
SCMM1 (da seq. 4.1)	0,0000	4,10	96,1
SCMM2 (da seq. 4.2)	0,0000	2,42	97,6
SCMM3 (da seq. 4.3)	0,0000	3,53	96,6
SCMM4 (da seq. 4.4)	0,0000	1,74	98,3

Tabela 5.15 : Desempenho para o caso 2 : Reatividade do tipo Rampa com $DT=10^{-2}$ s

Metodo	TR	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho) (%)
DF	0,0000	238,5	29,5
SCM	0,0000	30,1	76,8
SCMM1 (da seq. 4.1)	0,0000	30,1	76,8
SCMM2 (da seq. 4.2)	0,0000	30,0	76,9
SCMM3 (da seq. 4.3)	0,0000	72,7	57,9
SCMM4 (da seq. 4.4)	0,0000	84,2	54,3

O procedimento aqui adotado foi exatamente o mesmo da seção 5.1, onde o tempos relativos, erro percentual médio e coeficiente de desempenho são definidos da mesma forma.

Para se verificar a questão da rigidez variamos o DT de 10^{-6} até 10^{-2} do mesmo modo que foi feito na seção anterior. Esses resultados estão nas figuras 5.11 até 5.16.

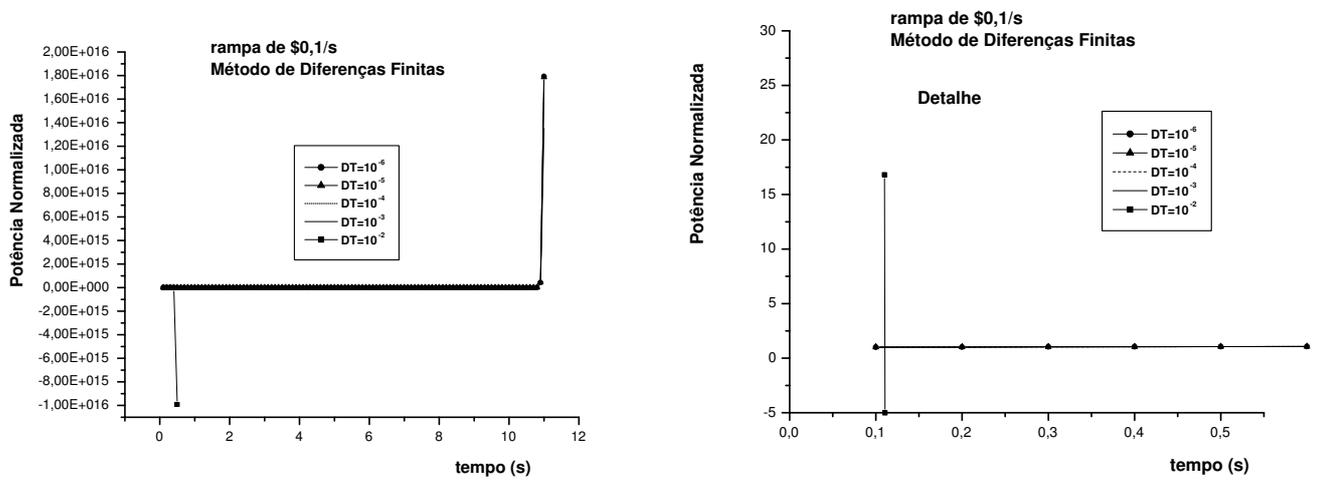


Figura 5.11 : Gráfico da potência normalizada em função do tempo para o método de diferenças finitas

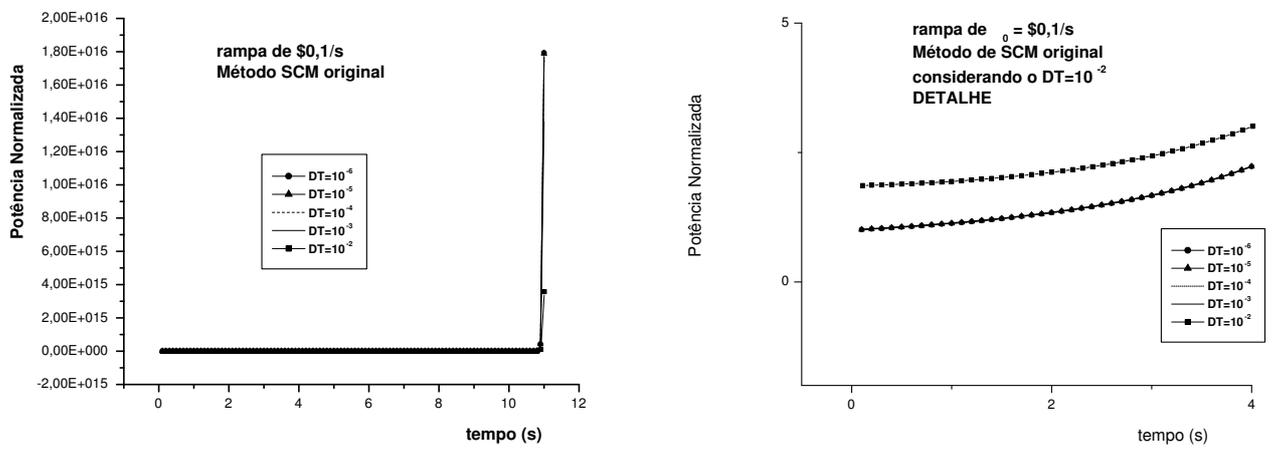


Figura 5.12 : Gráfico da potência normalizada em função do tempo para o método SCM Original

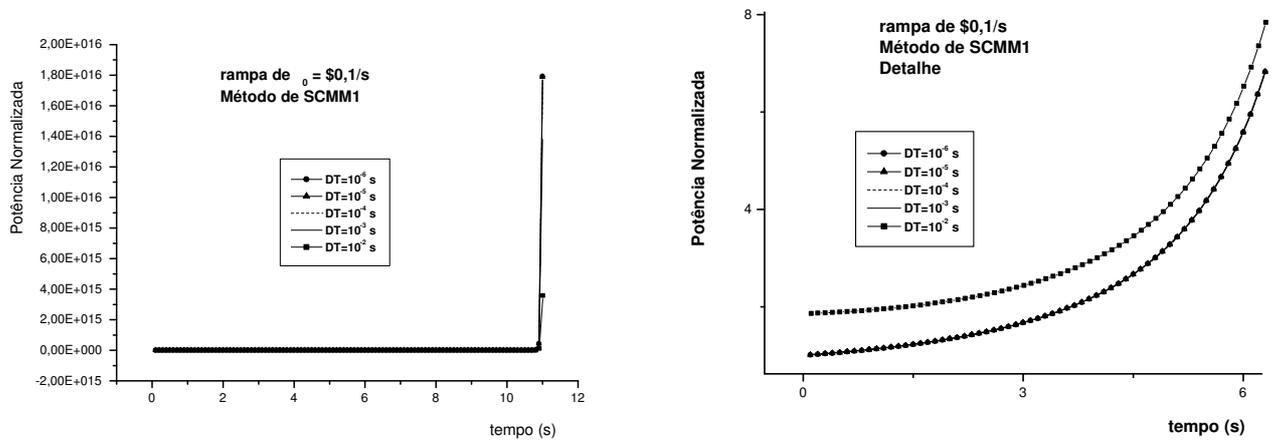


Figura 5.13 : Gráfico da potência normalizada em função do tempo para o método SCMM1

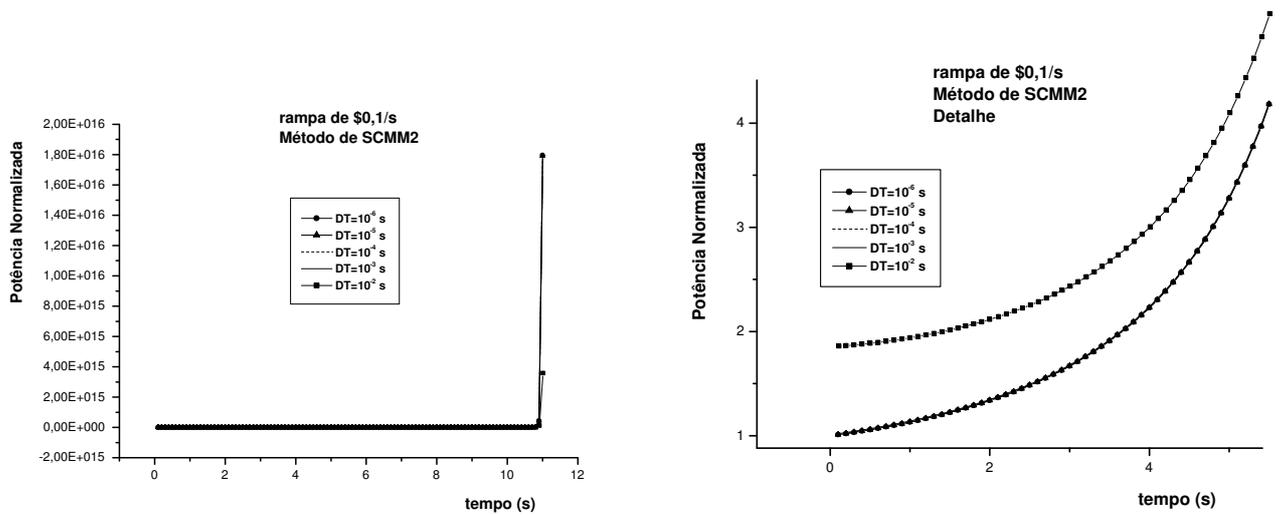


Figura 5.14 : Gráfico da potência normalizada em função do tempo para o método SCMM2

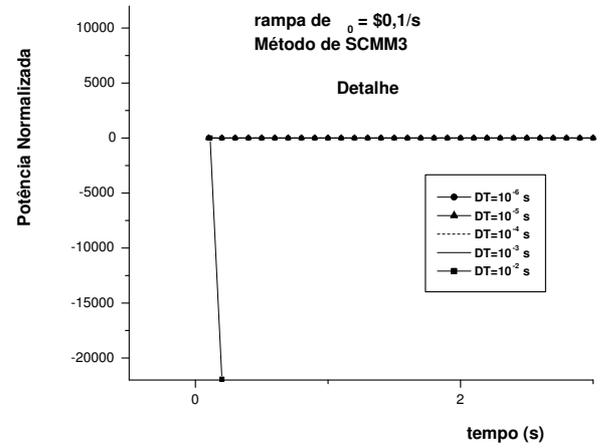
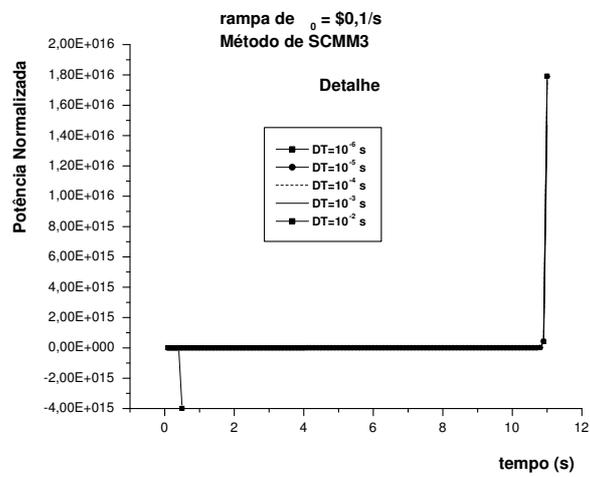


Figura 5.15 : Gráfico da potência normalizada em função do tempo para o método SCMM3

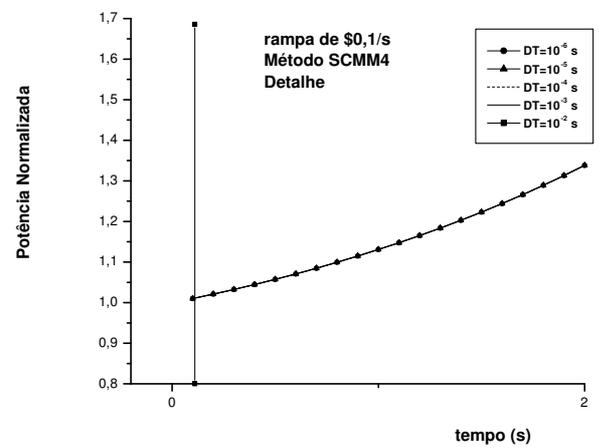
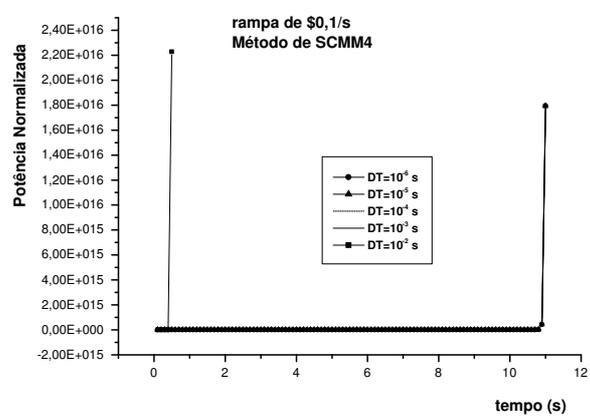


Figura 5.16 : Gráfico da potência normalizada em função do tempo para o método SCMM4

Tabela 5.16 : Teste de rigidez para o caso 2 : Reatividade do tipo Rampa

Metodo	TR_{MEDIO}	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho) (%)
DF	0,072	48,63	64,2
SCM	0,092	6,94	86,1
SCMM1 (da seq. 4.1)	0,089	6,94	86,4
SCMM2 (da seq. 4.2)	0,088	6,55	86,7
SCMM3 (da seq. 4.3)	0,048	15,33	83,2
SCMM4 (da seq. 4.4)	0,049	17,25	81,9

Os valores apresentados na tabela 5.16 correspondem à média daqueles das tabelas 5.12 até 5.15, sempre para $t=2s$, $t=4s$, $t=6s$, $t=8s$, $t=9s$, $t=10s$ e $t=11s$. O cálculo dos valores médios (TR e ERRO) foi feito pela média aritmética dos valores obtidos para o cálculo com os DTs diferentes.

Nota-se que os melhores desempenhos foram para os métodos implementados com as modificações das seções 4.1 e 4.2, considerando-se o efeito da rigidez.

5.3 Caso 3 - Reatividade Senoidal

A inserção de uma reatividade senoidal representa uma situação bastante interessante de ser analisada, porque na situação real de um reator nuclear a variação da reatividade pode ser tratada como uma variação oscilatória quando essa variação aleatória tende a um valor médio nulo, da mesma forma que uma função senoidal também tende a um valor médio nulo. Esse caso foi discutido em HETRICK [3], mas com apenas um grupo de precursores sendo considerado. Isso foi feito por questão de simplicidade.

A reatividade senoidal é espessa como se segue:

$$\rho(t) = \rho_0 \text{sen}(\pi t/T) \quad (5.21)$$

Onde a amplitude da reatividade é $\rho_0 = 0,005333$ (533 pcm ou 68 cents) e a metade do período, o qual chamamos simplesmente de meio-período, é $T = 50$ s.

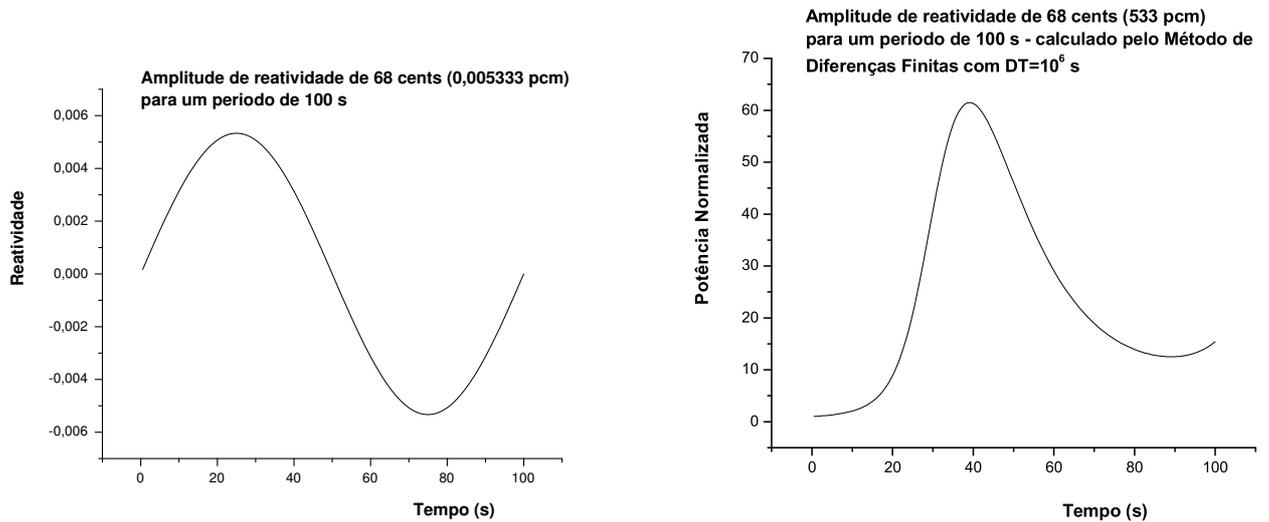


Figura 5.17 : Gráficos da potência normalizada em função do tempo e da reatividade em função do tempo para uma reatividade senoidal

Em HETRICK [3], pode-se notar um valor máximo da função da potência normalizada em relação ao tempo em torno de 60 s, para uma amplitude de reatividade de $\rho_0 = 0,005333$. Na figura (5.16) verifica-se que para diferenças finitas tem-se um valor máximo menor. A solução apresentada por Hetrick é de fato um valor aproximado (prompt jump) e a sua validade é discutida a seguir.

Sendo considerado apenas um grupo de precursores, as Equações da Cinética Pontual podem ser reescritas:

$$\frac{dn(t)}{dt} = \left(\frac{\rho_0 \text{sen}(\pi t/T) - \beta}{\Lambda} \right) n(t) + \lambda c(t) \quad (5.22)$$

$$\frac{dc(t)}{dt} = \frac{\beta}{\Lambda}n(t) - \lambda c(t) \quad (5.23)$$

Um modo, proposto nesta tese, de se resolver as equações (5.22) e (5.23), consiste em se derivar a segunda vez e isolar os termos relativos a $n(t)$, como se segue:

$$\frac{dn(t)}{dt} = \frac{\Lambda}{\beta} \frac{d^2c(t)}{dt^2} + \frac{\Lambda\lambda}{\beta} \frac{dc(t)}{dt} \quad (5.24)$$

$$n(t) = \frac{\Lambda}{\beta} \frac{dc(t)}{dt} + \frac{\Lambda\lambda}{\beta} c(t) \quad (5.25)$$

Em seguida substituem-se as equações (5.24) e (5.25) na equação (5.22), obtendo-se:

$$\frac{d^2c(t)}{dt^2} + \left(\frac{-\rho_0 \text{sen}(\pi t/T) + \beta + \Lambda\lambda}{\Lambda} \right) \frac{dc(t)}{dt} + \left(-\frac{\lambda\rho_0 \text{sen}(\pi t/T)}{\Lambda} \right) c(t) = 0 \quad (5.26)$$

O problema estaria resolvido caso fosse possível obter uma solução geral para a equação diferencial expressa em (5.26). Mas é possível obter uma solução particular no caso em que a segunda derivada de $c(t)$ for nula. Isso se justifica se considerarmos que $c(t)$ varia quase linearmente ao longo de um certo intervalo de tempo e que portanto a sua primeira derivada é aproximadamente constante, ou seja, está sendo considerado que o comportamento sabidamente exponencial de $c(t)$ é bastante suave, de modo que na região analisada possa ser considerado linear.

$$\frac{dc(t)}{dt} + \left(\frac{\lambda\rho_0 \text{sen}(\pi t/T)}{\rho_0 \text{sen}(\pi t/T) - (\lambda\Lambda + \beta)} \right) c(t) = 0 \quad (5.27)$$

A equação (5.27) pode ser resolvida com simplicidade, obtendo-se a equação geral descrita abaixo :

$$c(t) = C1e^{-\lambda \int_t \mu(t') dt'} \quad (5.28)$$

onde tem-se que :

$$\mu(t) = \left(\frac{\text{sen}(\pi t/T)}{\text{sen}(\pi t/T) - \frac{(\lambda\Lambda + \beta)}{\rho_0}} \right) \quad (5.29)$$

A integral indefinida de $\mu(t)$ pode ser obtida através da consulta na tabela de integrais de GRADSHTEYN & RYZHIK [14], onde tem-se que :

$$\int \frac{A + B\text{sen}(x)}{a + b\text{sen}(x)} dx = \frac{B}{b}x + \frac{Ab - aB}{b} \left(\frac{2}{\sqrt{a^2 - b^2}} \arctan\left(\frac{a \tan(x/2) + b}{\sqrt{a^2 - b^2}}\right) \right) \quad (5.30)$$

Identificando $A=0$, $B=1$, $a=-\frac{\lambda\Lambda + \beta}{\rho_0}$, $b=1$ e $x=\frac{\pi t}{T}$ pode se obter a solução geral da equação (5.27).

$$c(t) = C1 \exp\left(-\lambda t - \frac{2\lambda(\lambda\Lambda + \beta)T}{\pi\sqrt{(\lambda\Lambda + \beta)^2 - \rho_0^2}} \arctan\left(\frac{\rho_0 - (\lambda\Lambda + \beta)\tan(\frac{\pi t}{2T})}{\sqrt{(\lambda\Lambda + \beta)^2 - \rho_0^2}}\right) \right) \quad (5.31)$$

Para se obter o valor da constante $C1$ foi usada a condição inicial $c(0) = \frac{n_0\beta}{\Lambda\lambda}$. Assim pode-se reescrever a equação (5.31) como se segue.

$$c(t) = \frac{n_0\beta}{\Lambda\lambda} \exp\left(-\lambda t + \frac{2\lambda(\lambda\Lambda + \beta)T}{\pi\sqrt{(\lambda\Lambda + \beta)^2 - \rho_0^2}} \left(\arctan\left(\frac{\rho_0}{\sqrt{(\lambda\Lambda + \beta)^2 - \rho_0^2}}\right) - \arctan\left(\frac{\rho_0 - (\lambda\Lambda + \beta)\tan(\frac{\pi t}{2T})}{\sqrt{(\lambda\Lambda + \beta)^2 - \rho_0^2}}\right) \right) \right) \quad (5.32)$$

Substitui-se a equação (5.32) na equação (5.25), obtendo-se finalmente:

$$n(t) = \frac{(\lambda\Lambda + \beta)^2 \sec^2(\frac{\pi t}{2T})}{(\lambda\Lambda + \beta)^2 - \rho_0^2 + (\rho_0 - (\lambda\Lambda + \beta)\tan(\frac{\pi t}{2T}))^2} \exp\left(-\lambda t + \frac{2\lambda(\lambda\Lambda + \beta)T}{\pi\sqrt{(\lambda\Lambda + \beta)^2 - \rho_0^2}} \left(\arctan\left(\frac{\rho_0}{\sqrt{(\lambda\Lambda + \beta)^2 - \rho_0^2}}\right) - \arctan\left(\frac{\rho_0 - (\lambda\Lambda + \beta)\tan(\frac{\pi t}{2T})}{\sqrt{(\lambda\Lambda + \beta)^2 - \rho_0^2}}\right)\right)\right) \quad (5.33)$$

Um outro modo de obter uma solução aproximada para $n(t)$ e $c(t)$ consiste em se usar a aproximação prompt jump, conforme foi feito em HETRICK [3], obtendo-se:

$$\frac{dn(t)}{dt} \simeq 0 \Rightarrow \left(\frac{\rho_0 \operatorname{sen}(\pi t/T) - \beta}{\Lambda}\right)n(t) + \lambda c(t) \simeq 0 \quad (5.34)$$

$$n_{PJ}(t) = \frac{\Lambda\lambda}{\rho_0 \operatorname{sen}(\pi t/T) - \beta} c_{PJ}(t) \quad (5.35)$$

Substitui-se a equação (5.35) na equação (5.23), resultando em uma equação diferencial semelhante a equação (5.27), a saber:

$$\frac{dc(t)}{dt} + \left(\frac{\lambda\rho_0 \operatorname{sen}(\pi t/T)}{\rho_0 \operatorname{sen}(\pi t/T) - \beta}\right)c(t) = 0 \quad (5.36)$$

Nota-se que a equação (5.36) é quase idêntica à equação (5.27), com a diferença que na equação (5.36) tem-se β e na equação (5.27) tem-se $(\Lambda\lambda + \beta)$. Quando Λ tender a zero, ou seja, quando for muito menor que β , uma equação será idêntica a outra.

Assim o procedimento de resolução da equação (5.36) é totalmente análogo ao procedimento de resolução da equação (5.27), não sendo necessária a sua reprodução com detalhes.

$$c_{PJ}(t) = \frac{n_0\beta}{\Lambda\lambda} \exp\left(-\lambda t + \frac{2\lambda\beta T}{\pi\sqrt{\beta^2 - \rho_0^2}} \left(\arctan\left(\frac{\rho_0}{\sqrt{\beta^2 - \rho_0^2}}\right) - \arctan\left(\frac{\rho_0 - \beta \tan\left(\frac{\pi t}{2T}\right)}{\sqrt{\beta^2 - \rho_0^2}}\right) \right)\right) \quad (5.37)$$

Para se obter a solução pela aproximação prompt jump basta substituir a equação (5.37) na equação (5.35).

$$n_{PJ}(t) = \frac{n_0\beta}{\rho_0 \text{sen}(\pi t/T) - \beta} \exp\left(-\lambda t + \frac{2\lambda\beta T}{\pi\sqrt{\beta^2 - \rho_0^2}} \left(\arctan\left(\frac{\rho_0}{\sqrt{\beta^2 - \rho_0^2}}\right) - \arctan\left(\frac{\rho_0 - \beta \tan\left(\frac{\pi t}{2T}\right)}{\sqrt{\beta^2 - \rho_0^2}}\right) \right)\right) \quad (5.38)$$

Foi verificado através dos exemplos anteriores (degrau e rampa) que um passo na ordem de 10^{-6} s determina resultados muito precisos. Sendo assim, a melhor aproximação entre as duas que apresentamos, seria aquela que fosse mais próxima dessa solução. De fato a aproximação que sugerimos se aproxima bem mais, conforme pode ser observado na figura (5.18). Para se determinar isso com absoluta certeza é necessário uma análise mais detalhada através da comparação com uma solução que possa ser considerada exata.

Muitos artigos consideram esta solução prompt jump para uma reatividade senoidal com um grupo de precursores como referência, mas não se pode esquecer que é uma aproximação usada para simplificar este problema.

Nas figuras (5.18) até (5.21) apresentamos a comparação entre as soluções aproximadas e as modificações implementadas e a implementação do método SCM original considerando os passos $DT=10^{-6}$ s e $DT2=10^{-4}$ s. Na comparação com outras soluções (aproximada e por diferenças finitas) nota-se que existe uma excelente sobreposição entre os resultados por diferenças finitas e aqueles obtidos por meio de implementação e/ou modificações do método SCM. Nas figuras (5.22) e (5.23) isso pode ser visto com detalhe.

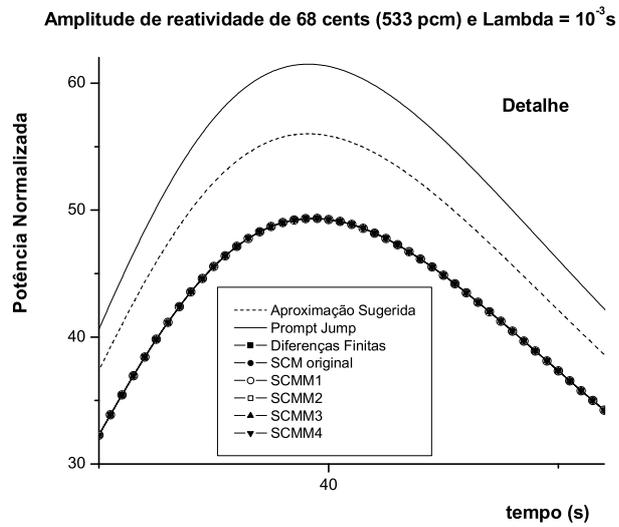


Figura 5.18 : Comparação das soluções aproximadas com os métodos de Diferenças Finitas, SCM e SCM modificados para $\rho_0=68$ cents e $\Lambda = 10^{-3}$ s

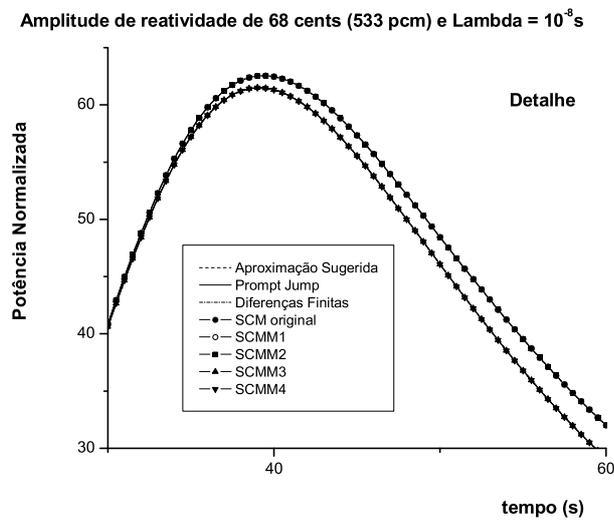


Figura 5.19 : Comparação das soluções aproximadas com os métodos de Diferenças Finitas, SCM e SCM modificados para $\rho_0=68$ cents e $\Lambda = 10^{-8}$ s

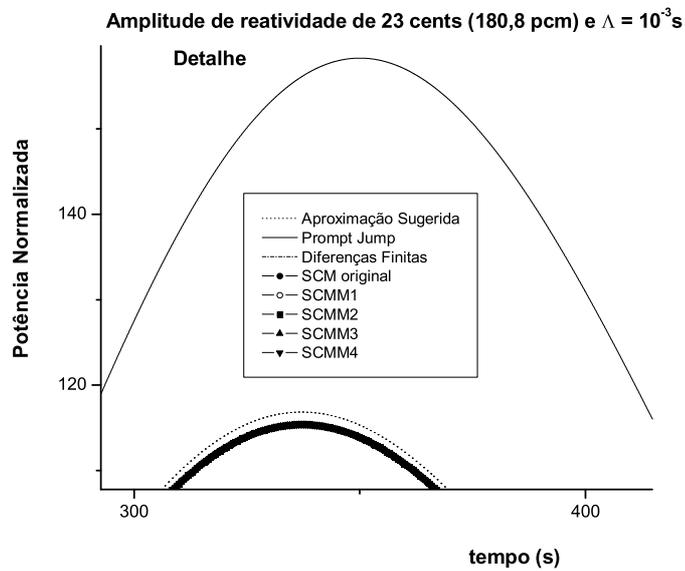


Figura 5.20 : Comparação das soluções aproximadas com os métodos de Diferenças Finitas, SCM e SCM modificados para $\rho_0=23$ cents e $\Lambda = 10^{-3}$ s

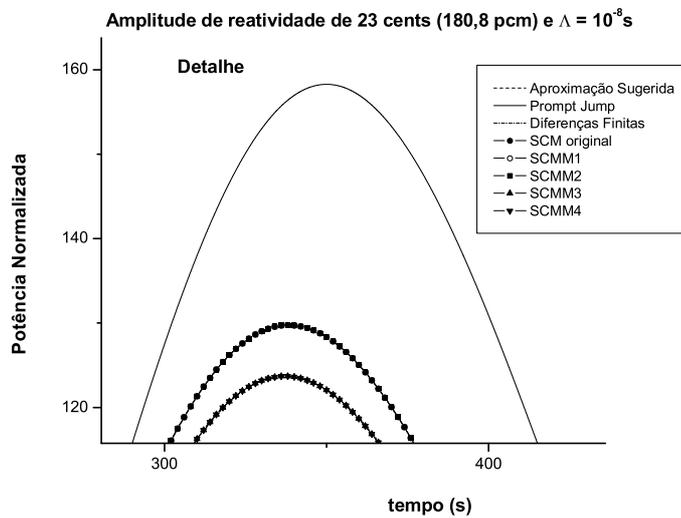


Figura 5.21 : Comparação das soluções aproximadas com os métodos de Diferenças Finitas, SCM e SCM modificados para $\rho_0=23$ cents e $\Lambda = 10^{-8}$ s

Seguindo o mesmo procedimento executado por CHAO e ATTARD [11], vamos analisar o erro em relação ao ponto de máximo da curva da potência em relação ao tempo. Estes resultados estão expressos nas tabelas (5.17) até (5.19). A comparação foi feita em relação a três valores considerados como referência, o primeiro foi a aproximação prompt jump, o segundo a aproximação que sugerimos e por fim com os valores obtidos por diferenças finitas. Todos os resultados apresentados nestas tabelas correspondem ao cálculo com o $DT=10^{-6}$ s e $DT2=10^{-4}$ s.

Nota-se que o erro calculado em relação a aproximação que sugerimos é bem menor do que o erro calculado em relação a aproximação Prompt Jump. Isso reforça a idéia de que a aproximação sugerida é melhor que a aproximação de Prompt Jump que foi feita por HETRICK [3] e adotada por CHAO & ATTARD [13] como referência. Esta aproximação que sugerimos tem a vantagem de ser uma solução obtida de forma bem simples, tanto quanto a solução obtida pela aproximação de Prompt Jump.

Tabela 5.17 : Comparação dos erros percentuais para cada implementação com relação ao resultado obtido pela aproximação Prompt Jump

ρ_0 (cent)	T (s)	Λ (s)	SCM	SCMM1	SCMM2	SCMM3	SCMM4
23	350	10^{-8}	18,3446	18,3446	18,3443	22,1179	22,1176
23	350	10^{-3}	27,3599	27,3599	27,3599	27,3596	27,3596
68	50	10^{-8}	2,0029	2,0029	2,0047	0,2558	0,2558
68	50	10^{-3}	19,7927	19,7927	19,7927	19,7914	19,7914

Tabela 5.18 : Comparação dos erros percentuais para cada implementação com relação ao resultado obtido pela aproximação sugerida

ρ_0 (cent)	T (s)	Λ (s)	SCM	SCMM1	SCMM2	SCMM3	SCMM4
23	350	10^{-8}	4,9001	4,9001	4,9005	0,2820	0,2819
23	350	10^{-3}	1,2677	1,2677	1,2677	1,2673	1,2673
68	50	10^{-8}	2,0030	2,0030	2,0048	0,2558	0,2558
68	50	10^{-3}	11,9529	11,9529	11,9529	11,9515	11,9515

Tabela 5.19 : Comparação dos erros percentuais para cada implementação com relação ao resultado obtido por diferenças finitas

ρ_0 (cent)	T (s)	Λ (s)	SCM	SCMM1	SCMM2	SCMM3	SCMM4
23	350	10^{-8}	4,8994	4,8994	4,8998	0,000412	0,000073
23	350	10^{-3}	0,001699	0,001699	0,001690	0,002106	0,002123
68	50	10^{-8}	2,1503	2,1503	2,1520	0,00195	0,00016
68	50	10^{-3}	0,001175	0,001175	0,001175	0,002797	0,002797

Nas figuras (5.22) até (5.27) pode se observar o comportamento das curvas correspondentes as tabelas. Nota-se que no caso onde $\rho_0=68$ cents e $\Lambda=10^{-8}$ ocorre uma menor dispersão dos diversos resultados.

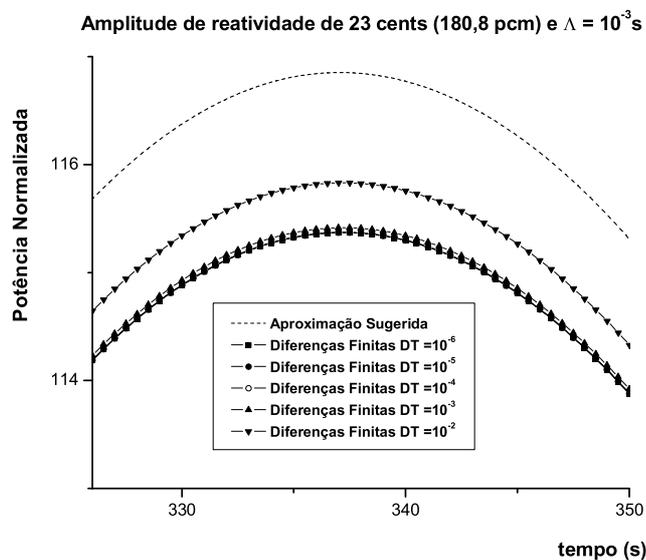


Figura 5.22 : Comparação das soluções aproximadas com o método de Diferenças Finitas (teste de rigidez) para $\rho_0=23$ cents e $\Lambda = 10^{-3}$ s

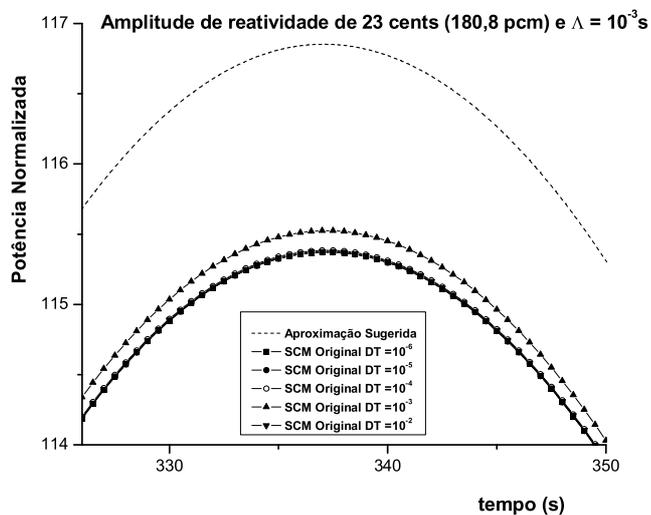


Figura 5.23 : Comparação das soluções aproximadas com o método de SCM Original (teste de rigidez) para $\rho_0=23$ cents e $\Lambda = 10^{-3}$ s

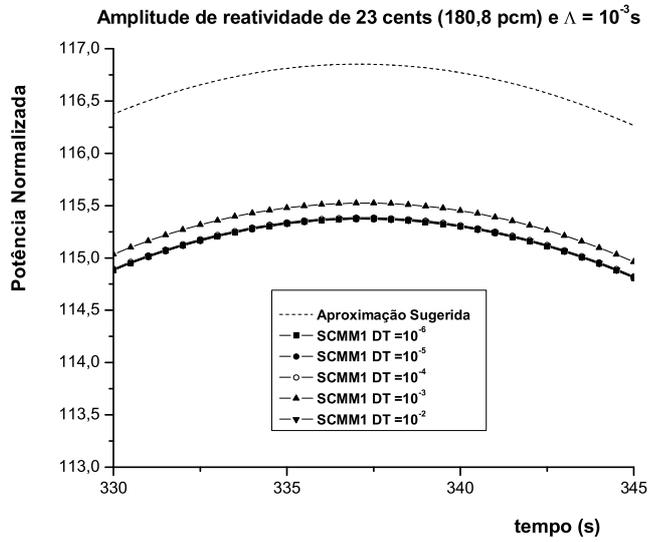


Figura 5.24 : Comparação das soluções aproximadas com o método de SCMM1 (teste de rigidez) para $\rho_0=23$ cents e $\Lambda = 10^{-3}$ s

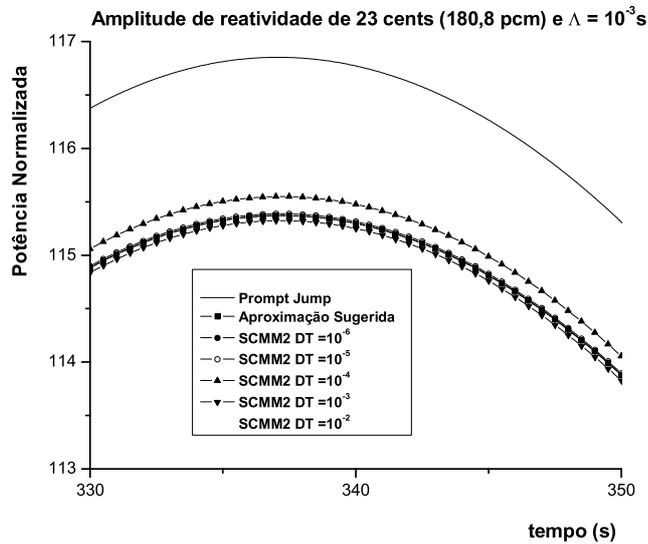


Figura 5.25 : Comparação das soluções aproximadas com o método de SCMM2 (teste de rigidez) para $\rho_0=23$ cents e $\Lambda = 10^{-3}$ s

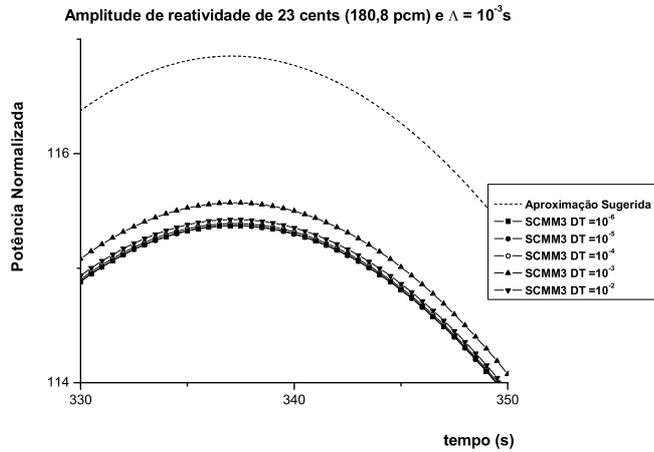


Figura 5.26 : Comparação das soluções aproximadas com o método de SCMM3 (teste de rigidez) para $\rho_0=23$ cents e $\Lambda = 10^{-3}$ s

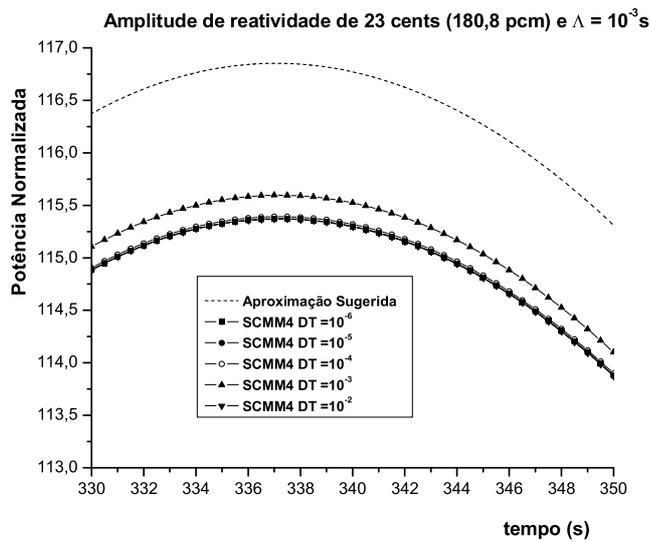


Figura 5.27 : Comparação das soluções aproximadas com o método de SCMM4 (teste de rigidez) para $\rho_0=23$ cents e $\Lambda = 10^{-3}$ s

Foi feito o teste de rigidez para o caso de uma reatividade senoidal com amplitude de 23 cents e $\Lambda = 10^{-3}$. Compararam-se os resultados para os passos DT indo de 10^{-6} s até 10^{-2}

s e o DT2 indo de 10^{-4} s até 10^{-2} s, conforme foi feito na seção anterior. Nas tabelas 5.20 até 5.25 são apresentados os resultados dos cálculos do erro médio percentual e do tempo relativo, como também do coeficiente de desempenho, de acordo com as definições da seção 5.1.

Tabela 5.20: Desempenho para o caso 2: Reatividade Senoidal com $\rho_0=23$ cents,
 $\Lambda = 10^{-3}$ s, $T_{MAX} = 700$ s e $DT = 10^{-6}$ s

Método	TR	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho) (%)
DF	0,683	6,734	57,1
SCM Original	1,514	6,733	38,7
SCMM1	1,466	6,733	39,5
SCMM2	1,461	6,733	39,6
SCMM3	1,145	6,732	45,2
SCMM4	1,159	6,732	44,9

Tabela 5.21: Desempenho para o caso 2: Reatividade Senoidal com $\rho_0=23$ cents,
 $\Lambda = 10^{-3}$ s, $T_{MAX} = 700$ s e $DT = 10^{-5}$ s

Método	TR	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho) (%)
DF	0,069	6,7338	88,0
SCM Original	0,156	6,7330	81,8
SCMM1	0,148	6,7330	82,2
SCMM2	0,152	6,7328	82,0
SCMM3	0,116	6,7326	84,5
SCMM4	0,122	6,7324	84,1

Tabela 5.22: Desempenho para o caso 2: Reatividade Senoidal com $\rho_0=23$ cents,

$$\Lambda = 10^{-3} \text{ s}, T_{MAX} = 700 \text{ s e DT} = 10^{-4} \text{ s}$$

Método	TR	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho) (%)
DF	0,0071	6,7305	93,1
SCM Original	0,0159	6,7217	92,3
SCMM1	0,0152	6,7217	92,4
SCMM2	0,0156	6,7196	92,4
SCMM3	0,0118	6,7179	92,7
SCMM4	0,0124	6,7159	92,6

Tabela 5.23: Desempenho para o caso 2: Reatividade Senoidal com $\rho_0=23$ cents,

$$\Lambda = 10^{-3} \text{ s}, T_{MAX} = 700 \text{ s e DT} = 10^{-3} \text{ s}$$

Método	TR	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho) (%)
DF	0,0008	6,697	93,66
SCM Original	0,0017	6,609	93,65
SCMM1	0,0017	6,609	93,66
SCMM2	0,0016	6,588	93,67
SCMM3	0,0013	6,571	93,72
SCMM4	0,0014	6,551	93,73

Tabela 5.24: Desempenho para o caso 2: Reatividade Senoidal com $\rho_0=23$ cents,

$$\Lambda = 10^{-3} \text{ s}, T_{MAX} = 700 \text{ s e } DT = 10^{-2} \text{ s}$$

Método	TR	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho) (%)
DF	0,0002	6,361	94,01
SCM Original	0,0003	6,727	93,67
SCMM1	0,0002	6,727	93,68
SCMM2	0,0002	6,772	93,64
SCMM3	0,0002	6,689	93,71
SCMM4	0,0003	6,734	93,66

Tabela 5.25: Desempenho para o caso 2: Reatividade Senoidal com $\rho_0=23$ cents,

$$\Lambda = 10^{-3} \text{ s}, T_{MAX} = 700 \text{ s e } DT = 10^{-2} \text{ s}$$

Método	TR	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho) (%)
DF	0,152	6,651	82,07
SCM Original	0,338	6,705	71,19
SCMM1	0,326	6,705	71,77
SCMM2	0,326	6,709	71,78
SCMM3	0,255	6,689	75,66
SCMM4	0,259	6,693	75,42

5.4 Caso 4 - Reatividade do tipo Zig-Zag

A nossa última aplicação consiste em uma combinação de reatividades do tipo rampa e step, chamada de Zig Zag. Na equação (5.39) e na figura (5.28) é representada a função correspondente a essa reatividade. CHAO & ATTARD [13] compararam os seus resultados

com aqueles obtidos por NÓBREGA [15] que utilizou a aproximação de Padé. Neste capítulo também é feita uma comparação dos nossos resultados com ambos.

$$\rho(t) = \begin{cases} \rho_0 t & \text{para } 0 \leq t \leq 0,5 \text{ s;} \\ -\rho_0 t + \rho_0 & \text{para } 0,5 \leq t \leq 1,0 \text{ s;} \\ \rho_0 t - \rho_0 & \text{para } 1,0 \leq t \leq 1,5 \text{ s;} \\ \frac{\rho_0}{2} & \text{para } t \geq 1,5 \text{ s.} \end{cases} \quad (5.39)$$

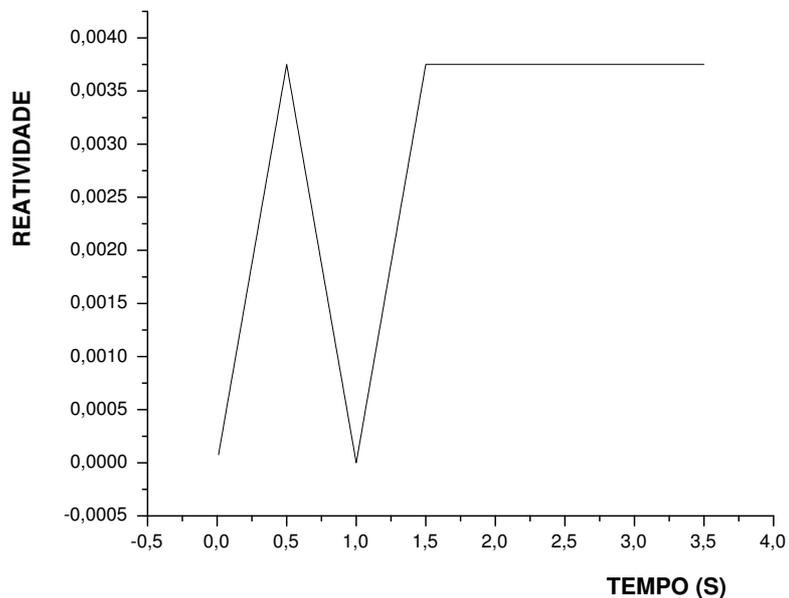


Figura 5.28 : Reatividade do tipo Zig Zag em função do tempo

Para se calcular as expressões matemáticas específicas desta aplicação basta refazer os cálculos para a reatividade do tipo rampa, com as três expressões de reatividade com o tempo entre 0 e 1,5 s e se repetir o resultado do degrau de reatividade para $\rho(t) = \rho_0/2$. Como o procedimento de cálculo é inteiramente análogo, apenas serão escritas as expressões finais.

No instante de tempo entre $t=0$ s e $t=0,5$ s as expressões são exatamente as mesmas do caso 2 da rampa de reatividade, a saber as equações (5.11) até (5.20).

Para o tempo entre $t=0,5$ s e $t=1,0$ s começamos a partir das equações já desacopladas (3.60) e (3.64), onde pode-se substituir nelas a expressão da reatividade correspondente a este intervalo de tempo.

$$\frac{dn(t)}{dt} = \left(\frac{\rho_0(1-t) - \beta}{\Lambda} \right) n(t) + S(t) \quad (5.40)$$

$$\frac{dc_i(t)}{dt} = \left(\frac{\beta S(t)}{\Lambda W(t) + \rho_0(1-t) + \beta} \right) - \lambda_i c_i(t) \quad (5.41)$$

Para as modificações propostas neste trabalho, onde a função $U(t)$ foi em todos os casos desprezada, as equações (5.40) e (5.41) podem ser resolvidas de modo discreto ou de modo analítico. Assim, tem-se que:

Cálculo Discreto

$$c_{ik+1} = (1 - \lambda_i \Delta t_2) c_{ik} + \Delta t_2 \frac{\beta_i S_k}{\Lambda W_k - \rho_0(t_k - 1) + \beta} \quad (5.42)$$

Cálculo Analítico

$$c_{ik+1} = \left(c_{ik} + \frac{\Delta t_2}{2} \frac{\beta_i S_k}{\Lambda W_k + \rho_0(t_k - 1) + \beta} \right) e^{-\lambda_i \Delta t_2} + \frac{\Delta t_2}{2} \frac{\beta_i S_{k+1}}{\Lambda W_{k+1} + \rho_0(t_{k+1} - 1) + \beta} \quad (5.43)$$

Cálculo Analítico

$$n_{k+1} = \left(n_k + S_k \frac{\Delta t}{2}\right) e^{\frac{\rho_0(1-t_k - \Delta t/2) - \beta}{\Lambda} \Delta t} + S_{k+1} \frac{\Delta t}{2} \quad (5.44)$$

Cálculo Discreto

$$n_{k+1} = \left(1 + \frac{\rho_0(1-t_k) - \beta}{\Lambda} \Delta t\right) n_k + S_k \Delta t \quad (5.45)$$

Para os testes com o SCM original, usaram-se as seguintes expressões:

Cálculo Discreto

$$c_{ik+1} = (1 - (\lambda_i + U_k) \Delta t) c_{ik} + \Delta t \frac{\beta_i S_k}{\Lambda W_k - \rho_0(t_k - 1) + \beta} \quad (5.46)$$

Cálculo Analítico

$$n_{k+1} = \left(n_k + S_k \frac{\Delta t}{2}\right) e^{\frac{\rho_0(1-t_k - \Delta t/2) - \beta}{\Lambda} \Delta t} + S_{k+1} \frac{\Delta t}{2} \quad (5.47)$$

E no caso da implementação pelo método de diferenças finitas, tem-se que:

$$n_{k+1} = n_k + \Delta t \frac{\rho_0(1-t_k) - \beta}{\Lambda} n_k + \Delta t \sum_i \lambda_i c_{ik} \quad (5.48)$$

$$c_{ik+1} = c_{ik} + \Delta t \frac{\beta_i}{\Lambda} n_k - \Delta t \lambda_i c_{ik} \quad (5.49)$$

Nas tabelas 5.26 e 5.27 são apresentados os resultados obtidos pela implementação dos métodos de Diferenças Finitas e SCM (original e com as quatro modificações) em comparação com Padé, RKG e o SCM de CHAO & ATTARD [13]. Os tempos computacional (TC) e relativo (TR) foram obtidos pela média entre três tomadas de dados para o $DT = 10^{-6}$ s com o $DT2 = 10^{-4}$ s. Também é possível se observar esses resultados de forma gráfica na figura (5.29).

Tabela 5.26 : Resultados para o caso 4 :reatividade do tipo Zig Zag com $\rho_0 = 1/s$, passo de $DT = 10^{-6}$ s , $\epsilon = 10^{-5}$

Metodo	t=0,5s	t=1,0s	t=1,5s	t=2,0s	t=2,5s	t=3,0s	t=10s
Exato	1,721422	1,211127	1,892226	2,521601	—	—	12,04711
Padé	1,717182	1,207827	1,887466	2,521165	—	—	12,04653
RKG	1,721419	1,211137	1,892227	2,521625	—	—	12,04720
SCM(art.)	1,721770	1,210467	1,892754	2,521085	—	—	12,04678
DF	1,721425	1,211126	1,892229	2,521601	2,866104	3,210516	12,04710
SCM	1,721427	1,211130	1,892234	2,521617	2,866128	3,210549	12,04743
SCMM1	1,721427	1,211130	1,892234	2,521617	2,866128	3,210549	12,04743
SCMM2	1,721443	1,211120	1,892239	2,521675	2,866261	3,210769	12,05170
SCMM3	1,721427	1,211130	1,892234	2,521617	2,866129	3,210550	12,04744
SCMM4	1,721442	1,211119	1,892239	2,521676	2,866262	3,210770	12,05170

Nas tabelas 5.27 até 5.31 foram feitos os testes no desempenho dos diversos métodos para os DTs variando de 10^{-6} s até 10^{-2} s. Esses resultados são usados a seguir no teste da rigidez do método.

Tabela 5.27 : Resultados para o caso 4 :reatividade do tipo Zig Zag com $\rho_0 = \$1/s$, passo de $DT = 10^{-6} s$, $\epsilon = 10^{-5}$

Método	T_{MAX} (s)	TC (s)	TR	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho) (%)
RKG	20			0,00055	
SCM(art.)	20			0,02516	
DF	20	7,8958	0,3948	0,00009	71,7
SCM	20	9,2656	0,4633	0,00085	68,3
SCMM1	20	8,9844	0,4492	0,00085	69,0
SCMM2	20	9,0000	0,4500	0,00010	69,0
SCMM3	20	5,2969	0,2648	0,00087	79,1
SCMM4	20	5,4219	0,2711	0,00009	78,7

Tabela 5.28 : Resultados para o caso 4 :reatividade do tipo Zig Zag com $\rho_0 = \$1/s$, passo de $DT = 10^{-5} s$, $\epsilon = 10^{-5}$

Método	T_{MAX} (s)	TC (s)	TR	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho) (%)
RKG	20			0,00055	
SCM(art.)	20			0,02516	
DF	20	0,7969	0,0398	0,0008	96,2
SCM	20	1,0156	0,0508	0,0012	95,2
SCMM1	20	0,9531	0,0477	0,0012	95,5
SCMM2	20	0,9740	0,0487	0,0010	95,4
SCMM3	20	0,5781	0,0289	0,0014	97,2
SCMM4	20	0,6094	0,0305	0,0009	97,0

Tabela 5.29 : Resultados para o caso 4 :reatividade do tipo Zig Zag com $\rho_0 = \$1/s$, passo de $DT = 10^{-4} s$, $\epsilon = 10^{-5}$

Método	T_{MAX} (s)	TC (s)	TR	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho) (%)
RKG	20			0,00055	
SCM(art.)	20			0,02516	
DF	20	0,0781	0,0039	0,00008	99,60
SCM	20	0,1094	0,0055	0,00013	99,44
SCMM1	20	0,0938	0,0047	0,00013	99,52
SCMM2	20	0,1094	0,0055	0,00009	99,45
SCMM3	20	0,0625	0,0031	0,00014	99,67
SCMM4	20	0,0625	0,0031	0,00009	99,68

Tabela 5.30 : Resultados para o caso 4 :reatividade do tipo Zig Zag com $\rho_0 = \$1/s$, passo de $DT = 10^{-3} s$, $\epsilon = 10^{-5}$

Método	T_{MAX} (s)	TC (s)	TR	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho) (%)
RKG	20			0,00055	
SCM(art.)	20			0,02516	
DF	20	0,0000	0,0000	0,0008	99,92
SCM	20	0,0156	0,0008	0,0013	99,80
SCMM1	20	0,0156	0,0008	0,0013	99,80
SCMM2	20	0,0156	0,0008	0,0009	99,84
SCMM3	20	0,0156	0,0008	0,0014	99,78
SCMM4	20	0,0052	0,0003	0,0009	99,88

Tabela 5.31 : Resultados para o caso 4 :reatividade do tipo Zig Zag com $\rho_0 = \$1/s$, passo de $DT = 10^{-2} s$, $\epsilon = 10^{-5}$

Método	T_{MAX} (s)	TC (s)	TR	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho) (%)
RKG	20			0,00055	
SCM(art.)	20			0,02516	
DF	20	0,0156	0,0008	0,0081	99,12
SCM	20	0,0000	0,0000	0,0077	99,24
SCMM1	20	0,0000	0,0000	0,0077	99,24
SCMM2	20	0,0000	0,0000	0,0038	99,62
SCMM3	20	0,0000	0,0000	0,0081	99,19
SCMM4	20	0,0000	0,0000	0,0038	99,62

Tabela 5.32 : Teste da Rigidez para o caso 4 :reatividade do tipo Zig Zag com $\rho_0 = \$1/s$, passo de $DT = 10^{-6} s$ até $DT = 10^{-2} s$ e $\epsilon = 10^{-5}$

Método	TR_{MEDIO}	$ERRO_{MEDIO}$ (%)	η (coef. de desempenho) (%)
DF	0,0879	0,181	91,8
SCM	0,1041	0,182	90,4
SCMM1	0,1005	0,182	90,7
SCMM2	0,1010	0,095	90,7
SCMM3	0,0595	0,194	94,2
SCMM4	0,0610	0,095	94,2

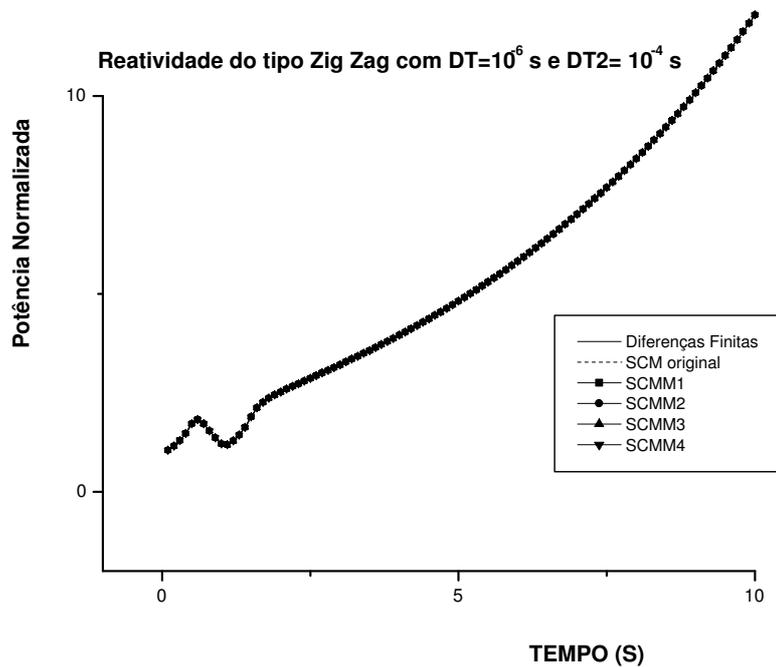


Figura 5.29 : Potência Normalizada em função do tempo para uma reatividade do tipo Zig Zag

Foi feito o teste dos efeitos da rigidez com os passos variando de 10^{-6} s até 10^{-3} s, onde foi feita a comparação dos resultados para cada método com suas diversas modificações implementadas neste trabalho e esses resultados são apresentados na tabela 5.32 e nas figuras 5.30 até 5.35, com a média do desempenho para cada passo.

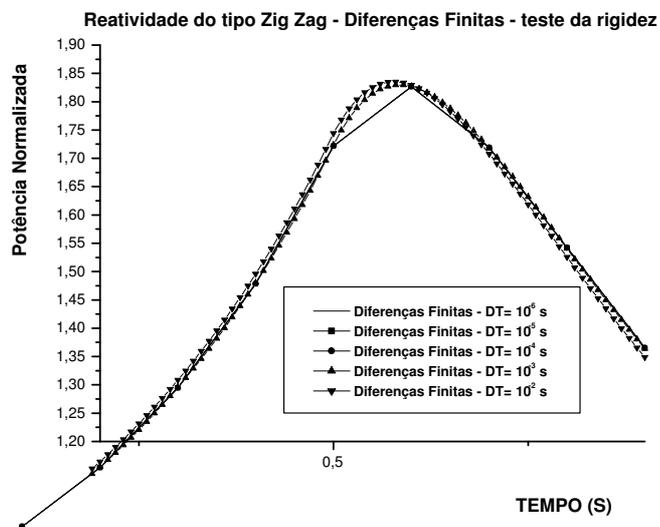


Figura 5.30 : Teste da Rigidez para uma reatividade do tipo Zig Zag calculada pelo método de Diferenças Finitas

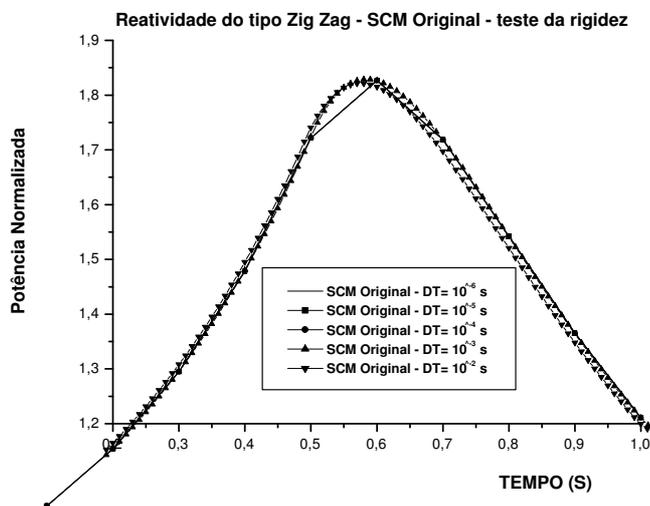


Figura 5.31 : Teste da Rigidez para uma reatividade do tipo Zig Zag calculada pelo método SCM Original

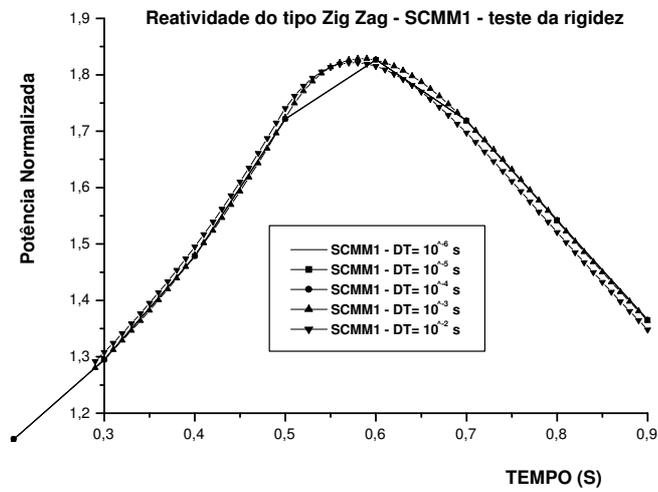


Figura 5.32 : Teste da Rigidez para uma reatividade do tipo Zig Zag calculada pelo método SCMM1

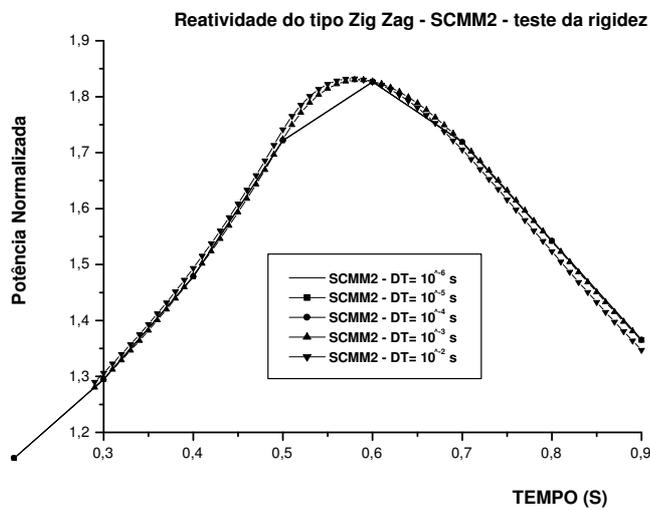


Figura 5.33 : Teste da Rigidez para uma reatividade do tipo Zig Zag calculada pelo método SCMM2

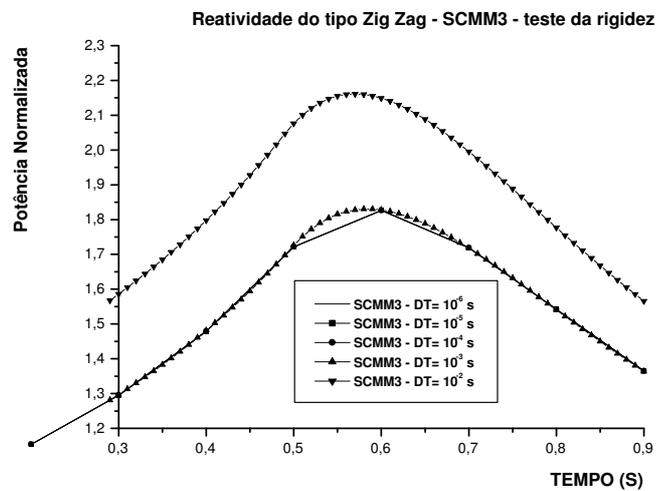


Figura 5.34 : Teste da Rigidez para uma reatividade do tipo Zig Zag calculada pelo método SCMM3

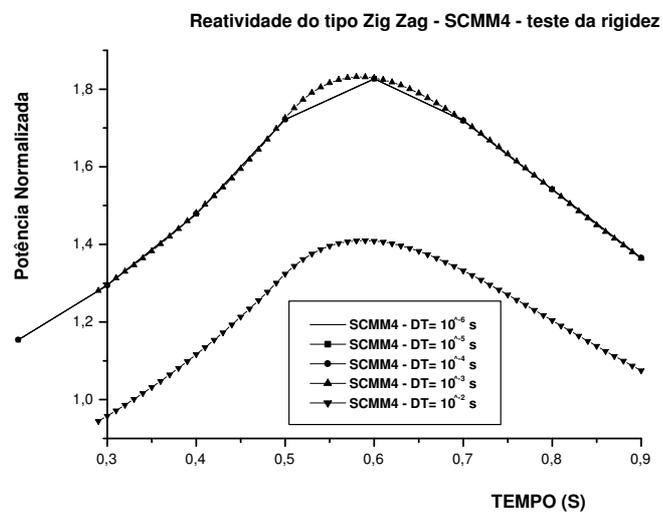


Figura 5.35 : Teste da Rigidez para uma reatividade do tipo Zig Zag calculada pelo método SCMM4

Capítulo 6

Conclusões

Em linhas gerais, os resultados apresentados no capítulo precedente podem ser considerados satisfatórios, uma vez que implicam algum tipo de ganho em relação à implementação do SCM na sua versão original. Pode-se ir mais longe e verificar que a versão implementada neste trabalho, com base no artigo de CHAO & ATTARD [13], apresenta resultados melhores que aqueles apresentados no próprio artigo.

Em relação ao caso 1 (inserção de um degrau de reatividade) foram feitas algumas observações. Notamos que a modificação implementada na seção 4.4, onde efetuamos o cálculo do $n(t)$ de modo discreto e do $c_i(t)$ de modo analítico, gasta um tempo computacional bem próximo daquele obtido através da modificação da seção 4.3, onde ambos os cálculos foram feitos de modo discreto. Por outro lado os valores também ficaram muito próximos dos valores exatos, tanto quanto o cálculo feito de acordo com o método apresentado na seção 4.2 com $n(t)$ e $c(t)$ calculados de modo analítico. Por isso, a modificação implementada na seção 4.4 apresentou o maior coeficiente de desempenho. Nota-se que ela apresenta o segundo menor tempo relativo médio e também o segundo menor erro médio. O seu desempenho é bom tanto em nível de tempo computacional, quanto em nível de precisão. Não adianta o método ser o mais rápido e o menos preciso. Ele tem que ser ao mesmo tempo rápido e preciso.

Das modificações implementadas no método SCM, as duas primeiras também reduzem o

problema da rigidez. Elas têm em comum o fato de que em ambas o cálculo de $dn(t)$ é feito de modo analítico. Já nas duas últimas modificações, onde o cálculo de $dn(t)$ é feito de modo discreto, o problema da rigidez se apresenta de modo inequívoco.

Apesar da quarta modificação ter em média o melhor desempenho, foi possível verificar, no caso da inserção de um degrau de reatividade, que ela não elimina de modo satisfatório o problema da rigidez. Utilizando os valores específicos de $T=0,01$ s, $T=0,1$ s e $T=1$ s, obtivemos os resultados apresentados na tabela 5.10.

O melhor desempenho no teste efetuado foi exatamente no caso em que a modificação feita no método SCM foi executar ambos os cálculos de modo analítico (segunda modificação). Considerando um $DT=10^{-6}$ s para $DT2=10^{-4}$ s o melhor desempenho, considerando-se a média dos resultados para todas as reatividades inseridas, são os desempenhos da quarta e da terceira modificação no SCM, de acordo com a tabela 5.5. Agora fixando o valor da reatividade em 800 pcm e considerando-se os valores de DT e DT2 variando entre 10^{-6} s e 10^{-2} s, o melhor desempenho é o da segunda modificação SCM. De qualquer forma, é inegável a vantagem de todos os cálculos efetuados a partir das modificações implementadas no SCM em relação ao método de diferenças finitas. Sempre, em todos os testes o valor do DT2 foi menor do que o valor de DT, a não ser no caso de $DT = 10^{-2}$ s, onde o DT2 teve que assumir o mesmo valor.

Para o caso 2 (uma rampa de reatividade) nota-se que o melhor desempenho obtido foi aquele onde a modificação básica feita no método original consistiu em se efetuar os cálculos da potência e dos precursores de modo discreto. Como o erro percentual foi bem pequeno, prevaleceu no cálculo do desempenho o menor tempo relativo que, sem dúvida, ocorre nessa forma de cálculo.

Observa-se que em todos os casos de cálculo discreto da potência (Diferenças Finitas, SCMM3 e SCMM4) o cálculo para o $DT=10^{-2}$ s divergem de forma absurda logo no início do processo iterativo, ao passo que para os casos de cálculo analítico para a potência (SCM original, SCMM1 e SCMM2) a discrepância não chega a ser absurda, ficando o erro num patamar próximo da média da tabela 5.16. Isso ocorre porque o problema da rigidez se

acentua a medida que o DT aumenta. Assim, está bem estabelecido, pelos casos 1 e 2, que os cálculos analíticos da potência normalizada e dos precursores reduzem o efeito da rigidez.

No caso 3, onde inserimos uma reatividade senoidal, nota-se a presença de um valor máximo de potência na figura (5.17). Isso implica que aplicando uma reatividade senoidal o valor da potência ficará restrita a um máximo, o que não ocorre com a inserção de um degrau ou uma rampa de reatividade, em outras palavras, para uma reatividade senoidal a solução da potência é finita para um tempo t tendendo a infinito, enquanto que as outras tendem ao infinito quando t tende a infinito.

Foi feita a análise dos resultados considerando como referência o valor aproximado obtido pela aproximação Prompt Jump, de acordo com HETRICK [3], pelo cálculo feito através do método de diferenças finitas com o passo de 10^{-6} s e uma segunda aproximação desenvolvida neste trabalho e descrita com mais detalhes no capítulo precedente. O erro de cada método implementado foi calculado em relação a essas referências pela comparação do ponto correspondente ao valor máximo da potência.

A conclusão preliminar que pode ser tirada da análise dos resultados das tabelas 5.14 até 5.16 é que a aproximação que introduzimos aqui apresenta melhor precisão em relação aos métodos estudados do que a aproximação Prompt Jump. Não foi feito um estudo muito aprofundado sobre essa aproximação por absoluta falta de tempo e a necessidade primordial do cumprimento dos prazos, mas sem dúvida cabe um futuro estudo mais aprofundado onde seja possível a comparação com valores mais exatos. Seria então possível, de forma categórica, afirmar que a aproximação aqui demonstrada é melhor do que a aproximação de Prompt Jump.

O melhor método modificado comparado com a aproximação aqui sugerida e com o método de diferenças finitas é aquele apresentado na seção 4.4, o que coincide com os casos anteriores. Também no teste feito para se analisar os efeitos da rigidez, variando o passo, esse método modificado também teve um bom desempenho como pode ser observado na tabela 5.17 .

Para o caso 4 com a inserção de uma reatividade do tipo Zig Zag, que se comporta de acordo com a figura 5.32, obtém-se resultados que são a sobreposição dos resultados do casos

1 e 2. Neste caso também tem-se o melhor coeficiente de desempenho para o método com a quarta modificação (seção 4.4) quando se faz o teste da rigidez e um dos melhores com o passo $DT = 10^{-6}$ s, como pode ser observado nas tabelas 5.18, 5.19 e 5.20.

É difícil se estabelecer qual o melhor método para qualquer situação possível, pois sempre existe algo a se melhorar e aperfeiçoar, mas é possível destacar os pontos positivos e negativos de cada método modificado desenvolvido neste trabalho.

No primeiro método modificado foi feita a aproximação de $U(t)$ o que resultou em uma otimização do cálculo, ou seja, foi possível realizar o mesmo cálculo em um tempo menor. A desvantagem desta modificação é que, de forma isolada, ela não melhora a precisão do método, uma vez que os valores calculados são exatamente os mesmos daqueles obtidos pelo SCM, implementado rigorosamente de acordo com CHAO & ATTARD [11]. Constatando que esta modificação não alterava os valores calculados ela foi adotada nas outras três modificações.

O segundo método modificado consistiu em se calcular a potência e os precursores pelo método analítico. Na verdade não se trata de um método totalmente analítico, uma vez que $S(t)$ e $W(t)$ não possuem uma forma analítica, conforme já descrito. Pode-se observar uma boa precisão quando se aumenta o tamanho do passo e também uma melhor precisão de quando o cálculo é feito de modo discreto. Mas essa diminuição do erro implica em um gasto maior de tempo em se realizar os cálculos, pois as expressões matemáticas obtidas, como foi possível observar, são maiores e mais complexas. É de fato o método modificado mais lento dos quatro, mas acaba melhorando o seu desempenho devido ao fato de ter a melhor precisão.

No terceiro método modificado o cálculo discreto sendo realizado para a potência e para os precursores, possibilita o melhor ganho de tempo, ou seja, é o método modificado onde obtém-se o resultado com o menor gasto de tempo. A desvantagem consiste no fato de que este método é menos preciso que o segundo método modificado. Nota-se que essa discrepância não é tão grande, o que pode ser minimizado se a margem de incerteza com que se queira trabalhar não seja tão pequena.

No quarto método modificado realizamos o cálculo dos precursores de modo analítico e o da potência de modo discreto. Dessa forma, como para a potência o passo é menor (o que implica em melhor precisão e maior gasto de tempo) sendo feito de forma discreta, não se compromete tanto a precisão, mas se gasta bem menos tempo. Ao passo que calculando os precursores de modo analítico se consegue uma melhor precisão sem comprometer tanto assim o tempo computacional geral porque o passo dos precursores é bem maior. Este foi o método de melhor desempenho em média, apesar de não ser o mais rápido e nem o mais preciso. E ele é quase tão rápido quanto o terceiro método modificado, sendo porém mais preciso.

CHAO & ATTARD [13] consideram que para se solucionar o problema da rigidez, o melhor seria calcular a potência de modo analítico e os precursores de modo discreto. Calculando os dois de modo analítico se consegue reduzir bastante o efeito da rigidez e usando o método com a quarta modificação tem-se o melhor desempenho em média.

Uma possibilidade de aplicação deste método, e que não foi tratada aqui por falta de tempo, trata-se do uso deste método SCM, onde as equações são desacopladas para se tratar o efeito da rigidez, para se resolver as equações da cinética com realimentação termohidráulica. Essas equações são mencionadas em alguns trabalhos, como por exemplo, EDWARDS, LEE & SCHULTZ [4] , CARVALHO [5] e EDWARDS, LEE & RAY [16]. As possibilidades de aplicação do método de confinamento da rigidez aumentam bastante com a sua extensão para este outro problema que com certeza representa de forma mais realista a situação de um reator nuclear.

Bibliografia

- [1] CHUNG, K. C. *Introdução à Física Nuclear*. Rio de Janeiro, ed. UERJ, 2001.
- [2] DUDERSTADT, James J. & HAMILTON, L. J. *Nuclear Reactor Analysis*. New York , John Wiley & Sons , 1987.
- [3] HERTRICK, David L. *Dynamics of Nuclear Reactors*. 1ª edição. Chicago e Londres, The University of Chicago Press Ltda. 1971 .
- [4] EDWARDS, Robert M. , LEE, Kwang Y. & SCHULTZ, M. A. "State Feedback Assisted Classical Control: An Incremental Approach to Control Modernization of Existing and Future Nuclear Reactors and Power Plants". *Nuclear Technology* vol. 92 , pp. 167-185 , 1990.
- [5] CARVALHO, Eduardo Camões Diógenes de , *Simulador Digital de Princípios Básicos de uma Planta Nuclear PWR*. Dissertação de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil, 2003.
- [6] AKCASU, Ziya , LELLOUCHE, Gerald S. & SHOTKIN, Louis M. *Mathematical Methods in Nuclear Reactor Dynamics* New York and London , Academic Press , 1971.
- [7] ALVIM, Antônio Carlos Marques, *Métodos Numéricos Aplicados à Engenharia Nuclear*. Rio de Janeiro, COPPE/UFRJ, 2003.

- [8] KINARD, Matthew & ALLEN, E.J., . "Efficient numerical solution of the point kinetics equations in nuclear reactors dynamics ". *Annals of Nuclear Energy* vol. 31, 1039-1051, 2003.
- [9] SÁNCHEZ, J. "On the Numerical Solution of the Point Reactor Kinetics Equations by Generalized Runge-Kutta Methods". *Nuclear Science and Engineering*, vol. 103, pp. 94-99, 1989.
- [10] KAPS, Peter & RENTROP, Peter . "Generalized Runge-Kutta Methods of Order Four with Stepsize Control for Stiff Ordinary Differential Equations". *Numerische Mathematik*, vol. 33, pp. 55-68, 1979.
- [11] STOER, J. & BURLISH, R. *Introduction to Numerical Analysis* . Springer-Verlag, New York, 1980.
- [12] HAIRER, E. & WANNER, G. *Computing*, 13, 1, 1974.
- [13] CHAO, Yung-An & ATTARD, Anthony , "A Resolution of the Stiffness Problem of Reactor Kinetics", *Nuclear Science and Engineering*, vol. 90, pp. 40-46, 1985.
- [14] GRADSHTEYN, I. S. & RYZHIK, I. M. , *Table of Integrals, Series and Products* Orlando, Florida , Academic Press Ltda. 1980 . p. 147.
- [15] NÓBREGA, J. A. W. , "A New Solution of the Point Kinetics Equations", *Nuclear Science and Engineering* , vol. 46, pp 366, 1971.
- [16] EDWARDS, Robert M. , LEE, Kwang Y. & RAY, Asok . "Robust Optimal Control of Nuclear Reactors and Power Plants". *Nuclear Technology* vol. 98 , pp. 137-148 , 1992.