INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
Autarquia Associada à Universidade de São Paulo

**Monitoramento do Fator de Pico Nuclear em Reatores Compactos utilizando
uma abordagem baseada em Aprendizado de Máquina (Machine Learning)**

PRISCILA PALMA SANCHEZ

**Dissertação apresentada como parte dos
requisitos para obtenção do Grau de
Mestre em Ciências na Área
de Tecnologia Nuclear - Reatores**

**Orientador:
Prof. Dr. Adimir dos Santos**

**São Paulo
2021**

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
Autarquia Associada à Universidade de São Paulo

**Monitoramento do Fator de Pico Nuclear em Reatores Compactos utilizando
uma abordagem baseada em Aprendizado de Máquina (Machine Learning)**

Versão Corrigida

Versão Original disponível no IPEN

PRISCILA PALMA SANCHEZ

Dissertação apresentada como parte
dos requisitos para obtenção do Grau de
Mestre em Ciências na Área de
Tecnologia Nuclear - Reatores

Orientador:

Prof. Dr. Adimir dos Santos

São Paulo

2021

Autorizo a reprodução e divulgação total ou parcial deste trabalho, para fins de estudo e pesquisa, desde que citada a fonte.

Como citar:

PALMA SANCHEZ, P. ***Monitoramento do Fator de Pico Nuclear em Reatores Compactos utilizando uma abordagem baseada em Aprendizado de Máquina (Machine Learning)***. 2021. 90 f. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear), Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, IPEN-CNEN, São Paulo. Disponível em: <<http://repositorio.ipen.br/>> (data de consulta no formato: dd/mm/aaaa)

Ficha catalográfica elaborada pelo Sistema de geração automática da Biblioteca IPEN,
com os dados fornecidos pelo(a) autor(a).

Palma Sanchez, Priscila
Monitoramento do Fator de Pico Nuclear em Reatores Compactos utilizando uma abordagem baseada em Aprendizado de Máquina (Machine Learning) / Priscila Palma Sanchez; orientador Adimir dos Santos. -- São Paulo, 2021.
90 f.

Dissertação (Mestrado) - Programa de Pós-Graduação em Tecnologia Nuclear (Reatores) - Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo, 2021.

1. Reatores Compactos. 2. Monitoramento de Parâmetros de Segurança. 3. Aprendizado de Máquina. 4. Inteligência Artificial. I. dos Santos, Adimir, orient. II. Título.

FOLHA DE APROVAÇÃO

Autora: Priscila Palma Sanchez

Título: Monitoramento do Fator de Pico Nuclear em Reatores Compactos utilizando uma abordagem baseada em Aprendizado de Máquina (Machine Learning)

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Tecnologia Nuclear da Universidade de São Paulo para obtenção do título de Mestre em Ciências na área de Tecnologia Nuclear - Reatores.

Data: 15/07/2021

Banca Examinadora

Prof. Dr. Adimir dos Santos

Instituição: IPEN

Julgamento: Aprovado

Prof. Dr. Marcelo Ramos Martins

Instituição: EP-USP

Julgamento: Aprovado

Prof. Dr. Thiago Carluccio

Instituição: CTMSP

Julgamento: Aprovado

Dedico esta dissertação aos meus pais, Maria Aparecida e Valdemir, e ao meu irmão Fernando, pelo carinho e apoio para que eu alcançasse meus objetivos de vida, e às minhas amigas-irmãs, Larissa e Natália, que me deram todo o suporte emocional e incentivo nos momentos mais críticos da minha trajetória.

AGRADECIMENTOS

Agradeço, primeiramente, ao Alfredo Abe pela confiança na minha capacidade de aprendizado e incentivo a ingressar no Mestrado, tendo dedicado toda a paciência, tempo, apoio e conhecimento na minha formação.

Agradeço especialmente ao meu orientador, Adimir dos Santos, por ter me recebido como aluna, sem me conhecer, por ter me guiado e acreditado no meu potencial, mesmo com tão pouco tempo de atuação na área nuclear.

Agradeço a todos os colegas de trabalho, principalmente, Thiago Carluccio, Gregório Souza, Pamela Piovezan, Nanami Kosaka, Arlindo Gilson e Ilka Rios, que ao longo desses anos compartilharam ensinamentos que contribuíram para o meu crescimento, sempre acrescentando valiosas ideias. Mas, acima de tudo, agradeço pela compreensão das minhas manias e momentos de desespero, por terem me recebido de braços abertos, tornando-se além de colegas, amigos.

Agradeço ao Presidente da Comissão de Pós-Graduação, Delvonei Andrade, por ter me fornecido todo o suporte e aconselhamento durante o programa.

Agradeço aos comandantes do CTMSP e DDNM por viabilizarem a minha liberação para atender às aulas e para o desenvolvimento do trabalho. Todo o conhecimento adquirido colaborou fortemente para um desempenho profissional mais sólido e de maior impacto para o programa nuclear brasileiro.

Agradeço, ainda, a todos os professores que contribuíram para que eu adquirisse a maturidade necessária para o desenvolvimento desse trabalho. Em especial, a Julian Shorto e Renato Semmler, por terem possibilitado uma visão distinta e mais lúcida dos conhecimentos adquiridos na graduação.

“Nothing in life is to be feared, it is only to be understood. Now is the time to understand more, so that we may fear less.”

Marie Skłodowska Curie

RESUMO

SANCHEZ, Priscila P. ***Monitoramento do Fator de Pico Nuclear em Reatores Compactos utilizando uma abordagem baseada em Aprendizado de Máquina (Machine Learning)***. 2021. 90 p. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear) Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares – IPEN-CNEN/SP. São Paulo.

A fim de garantir a segurança em uma planta nuclear de potência, os sistemas de operação e proteção devem considerar parâmetros de segurança, seja para guiar os operadores ou para desligar o reator em caso de emergência. Especialmente em reatores modulares compactos (*SMR*) isentos de boro nos quais a reatividade e a potência são controladas exclusivamente por bancos de controle, a distribuição de potência é majoritariamente influenciada por suas movimentações afetando o Fator de Pico Nuclear (*PF*), que é um parâmetro importante a ser considerado. O *PF* relaciona a densidade de potência linear local máxima com a densidade de potência média em uma vareta combustível, indicando elevado fluxo de nêutrons que pode causar dano à vareta combustível. Neste trabalho, 2.117 amostras de simulações de um *SMR* livre de boro idealizado e controlado exclusivamente por bancos foram usadas para gerar um modelo de Máquina de Vetores de Suporte (*SVM*) capaz de estimar *PF* como função da posição dos bancos de controle. Tal modelo pode ser usado na predição e no monitoramento em tempo real de *PF* realizando cálculos simples como uma maneira de superar os desafios das metodologias existentes aplicadas a núcleos compactos. Residindo na busca em grade dos parâmetros da *SVM* e no processo de validação cruzada de 10 subgrupos no conjunto de dados de treino para alcançar um modelo otimizado e robusto, os resultados mostraram Raiz do Erro Quadrático Médio (*RMSE*) de aproximadamente 0,1% consistente para ambos os conjuntos de treino e teste.

Palavras-chave: vetores de suporte; fator de pico nuclear; reator compacto modular; monitoramento do reator; isento de boro.

ABSTRACT

SANCHEZ, Priscila P. ***Power Peaking Factor monitoring in Small Reactors using an approach based on Machine Learning***. 2021. 90 p. Dissertação (Mestrado em Tecnologia Nuclear) Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares – IPEN-CNEN/SP. São Paulo.

In order to ensure safety in a nuclear power plant, operation and protection systems must take into account safety parameters, whether to guide operators or to trip the reactor in emergency cases. Especially in a boron-free Small Modular Reactor (SMR) where reactivity and power are controlled exclusively by rod banks, the power distribution is mostly influenced by its movements affecting the Power Peaking Factor (PF), which is an important parameter to be considered. The PF relates the maximum local linear power density to the average power density in a fuel rod, indicating a high neutron flux that can cause fuel rod damage. In this work, 2,117 samples from simulations of an idealized boron-free SMR controlled exclusively by rod banks were used to generate a Support Vector Machine (SVM) model capable of estimating the PF as a function of control rod bank positions. Such model could be used to predict and online monitoring PF by carrying out simple calculation as a way of overcoming the existent methodologies challenges applied to small cores. Residing in a SVM parameter grid search and a 10-cross validation process in the training set to reach an optimized and robust model, the results have shown a Root Mean Squared Error (RMSE) of about 0.1% consistent for both training and testing sets.

Keywords: Support vector; power peaking factor; small modular reactor; reactor monitoring; boron free.

LISTA DE TABELAS

	Página
Tabela 5.1 – Buscas em grade realizadas nas constantes de regularização e da função radial de base sobre o conjunto de dados de treino para otimização do modelo <i>SVM</i>	60
Tabela 5.2 – Buscas em grade realizadas na constante da função de perda e sobre o conjunto de dados de treino para otimização do modelo <i>SVM</i>	61
Tabela 5.3 – Características do modelo <i>SVM</i> final otimizado sobre o conjunto de dados de treino.....	62
Tabela 5.4 – Análise das figuras de mérito do modelo <i>SVM</i> nos conjuntos de dados de treino e teste.....	67
Tabela 5.5 – Comparação entre os estudos já realizados de monitoramento do Fator de Pico Nuclear (<i>PF</i>) e o estudo presente.....	70

LISTA DE FIGURAS

	Página
Figura 4.1 – SVR não-linear utilizando a função de perda ε -insensível de Vapnik.....	29
Figura 4.2 – Comportamento do erro de predição para 100 conjuntos de dados genéricos de treino de tamanho 50 cada com o aumento da complexidade do modelo.....	32
Figura 4.3 – Elemento de volume dV e elemento direcional $d\Omega$ referente ao ângulo sólido Ω	33
Figura 4.4 – Direções de movimento do nêutron antes e após o espalhamento....	38
Figura 4.5 – Configuração esquemática transversal do elemento combustível central.....	48
Figura 4.6 – Configuração esquemática transversal do núcleo do reator com barras de controle e segurança, <i>baffle</i> e barril.....	50
Figura 5.1 – Fluxograma do processo de modelagem SVM.....	55
Figura 5.2 – Comportamento 3D e 2D do Fator de Pico Nuclear (PF) de acordo com a inserção dos bancos C1 e C2 no núcleo do reator.....	56
Figura 5.3 – Detalhe 2D e curvas de nível do comportamento do Fator de Pico Nuclear (PF) de acordo com a inserção dos bancos C1 e C2 no núcleo do reator.....	57
Figura 5.4 – Fator de Pico Nuclear (PF) obtido a partir da simulação do CITATION e previsto pelo modelo SVR para o conjunto de dados de treino.....	64
Figura 5.5 – Fator de Pico Nuclear (PF) obtido a partir da simulação do CITATION e previsto pelo modelo SVR para o conjunto de dados de teste.....	64
Figura 5.6 – Distribuição do resíduo ponderado do Fator de Pico Nuclear (PF) nos conjuntos de dados de treino e teste.....	65
Figura 5.7 – Distribuição do erro relativo de estimativa do modelo SVM para o Fator de Pico Nuclear (PF) nos conjuntos de dados de treino e teste.....	69

SUMÁRIO

	Página
1	INTRODUÇÃO.....13
2	OBJETIVOS.....18
3	REVISÃO BIBLIOGRÁFICA.....20
4	METODOLOGIA.....25
4.1	Máquina de Vetores de Suporte (SVM).....25
4.1.1	Considerações sobre a aplicação da SVM.....29
4.2	Solução da equação de transporte de nêutrons e suas aproximações.....32
4.3	Aproximação de difusão em multigrupos de energia.....37
4.3.1	Criticalidade e espectro de fissão.....44
4.4	Descrição do modelo de reator.....46
4.5	Fator de Pico Nuclear (PF).....51
5	RESULTADOS E DISCUSSÃO.....54
5.1	Obtenção e análise da base de dados.....54
5.2	Criação e otimização do modelo SVM.....58
5.3	Análise do modelo SVM otimizado.....62
5.3.1	Análise preliminar.....62
5.3.2	Figuras de mérito.....65
5.3.2.1	Raiz do Erro Quadrático Médio (RMSE) e Erro Absoluto Médio (MAE).....66
5.3.2.2	Erro Relativo Máximo (MRE).....66
5.3.2.3	Índice de Concordância de Willmot (WIA).....67
5.3.3	Análise das figuras de mérito.....67
5.3.4	Comparação com estudos anteriores de SVM para predição do Fator de Pico Nuclear (PF).....69
5.3.5	Aplicabilidade do método.....73

6	CONCLUSÃO.....	74
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS.....	77
	APÊNDICE A – Comandos em R.....	85

1 INTRODUÇÃO

O crescimento da Inteligência Artificial, decorrente da evolução tecnológica, tornou possível a abordagem de problemas através de técnicas de Aprendizado de Máquina caracterizando-se por sistemas capazes de interpretar corretamente um determinado conjunto de dados e atuar de maneira específica, com adaptação e flexibilidade, quando outro conjunto similar é abordado.

Mesmo com toda a capacidade computacional disponível atualmente, não seria factível calcular cada estado do reator durante sua operação utilizando códigos que consideram os fenômenos físicos envolvidos e aplicar os resultados nos sistemas de monitoramento e controle do reator. Esses sistemas normalmente são de lógica simples a fim de evitar mau funcionamento e, além do cálculo do reator em si, o pós-processamento seria custoso considerando-se a escala de tempo de resposta demandada para atuação. Assim, a tecnologia associada a reatores também vem enveredando na direção de técnicas de Inteligência Artificial utilizando modelos mais simples e acurados que podem ser adotados no controle e diagnóstico [1-4] com o objetivo de prever, em tempo real, parâmetros como fluxo de calor crítico, fator de pico nuclear, entre outros, geralmente associados à segurança. Com a aplicação dessas técnicas e a partir de alguns resultados de simulações do projeto do reator, podem ser criados modelos antecipadamente de forma a prever os valores possíveis para os parâmetros de segurança durante a operação apenas a partir de variáveis de estado, permitindo a atuação dos sistemas em uma escala de tempo menor.

O parâmetro denominado Fator de Pico Nuclear é uma grandeza importante pois está diretamente associada à informação quanto às distorções locais na distribuição de potência que podem resultar em pontos quentes no núcleo do reator além dos limites preestabelecidos para a remoção do calor.

Especificamente para reatores de potência, de acordo com a base normativa americana (NRC), o critério geral de projeto (GDC-13) estabelece que durante a operação de um reator é necessário prover sistemas de instrumentação capazes de monitorar e permitir ações que garantam a integridade do núcleo. Dessa forma, a maioria dos reatores do tipo *PWR* (*Pressurized Water Reactor*) de grande porte possui diversos sistemas de monitoramento: detectores *in-core* móveis denominados *aeroballs* como na usina de Angra-2 [5] e/ou detectores *in-core* fixos que fornecem mapeamentos da distribuição do fluxo de nêutrons de forma mais frequente do que os detectores *in-core* móveis [6].

A informação da distribuição espacial do fluxo de nêutrons pode ser associada à distribuição espacial da potência e consequentemente, seu mapeamento após processado, permite estabelecer o Fator de Pico Nuclear para uma determinada condição operacional do reator.

As variações na distribuição espacial da potência que ocorrem durante a operação de um reator podem estar associadas com a distribuição da temperatura, posicionamento das barras de controle ou distribuição do produto de fissão xenônio no núcleo. No entanto, as variações além das condições preestabelecidas podem ocasionar oscilações espaciais acima do limite de projeto. Dessa forma, no projeto de reatores de grande porte limita-se a variação da distribuição de potência na direção radial (quadrante *tilt*) e também na direção axial (axial *off-set*) restringindo as margens de operação dos sistemas de forma conservadora para garantir a segurança. A limitação da distribuição de potência é feita por meio do sistema de controle e proteção utilizando-se as informações fornecidas pelos detectores internos (*in-core*) e externos (*ex-core*) ao núcleo e ao vaso do reator. A correta distribuição e posicionamento dos detectores internos e externos permite inferir a distribuição do fluxo de nêutrons e consequentemente a distribuição espacial da potência.

Nas últimas décadas, os reatores compactos avançados (abaixo de 300 MWe) têm se tornado de especial interesse na geração de eletricidade devido à

sua simplicidade, aplicação de sistemas de segurança passiva, além do fornecimento de energia a regiões distantes das redes de distribuição [7]. Esses reatores também são estratégicos por sua aplicação nos projetos de navios e submarinos que necessitam de maior disponibilidade de propulsão tanto para uso militar como comercial, tendo como característica notável, a possibilidade de construção modular: grandes partes mecânicas e estruturais podem ser montadas em outro local e serem então trazidas para instalação na planta.

Atualmente, a maioria dos reatores compactos está em fase conceitual, porém, alguns já estão licenciados (SMART, República da Coréia), em construção (HTR-PM, China e KLT-40S, Rússia) ou em operação (IPHWR-220, Índia) [8].

No caso de um reator compacto cuja reatividade e potência são modificadas apenas pela movimentação de barras de controle (sem controle químico de boro) o Fator de Pico Nuclear torna-se um parâmetro ainda mais importante pois, nesses reatores, a perturbação local é mais relevante em decorrência do tamanho reduzido do núcleo e da inserção acentuada das barras de controle. Assim, para que seja realizado o monitoramento do Fator de Pico Nuclear em tempo real em reatores compactos, algumas questões devem ser abordadas de forma a obter sistemas mais adequados e confiáveis aplicáveis a seus projetos considerando os requisitos operacionais específicos, como nos casos em que os reatores serão utilizados para propulsão e devem atuar como seguidores de carga exigindo o movimento automático de barras de controle.

Primeiramente, deve-se examinar que os detetores de nêutrons auto-acionados (*SPND – Self-Powered Neutron Detectors*) de sinal rápido feitos de cobalto e disponíveis na indústria nuclear são muito menos acurados que os detetores de rádio que possuem tempo de resposta mais lento [9], sem considerar o atraso adicionado ao processo de cálculo do Fator de Pico Nuclear a partir do mapa de distribuição de potência desses detetores *in-core*. Em segundo lugar, as proporções dos reatores compactos são comparáveis às dimensões das regiões sensíveis dos detetores *ex-core*, podendo causar medidas de distribuição de potência

não-realistas ao longo da direção axial já que os detetores *ex-core* posicionados na parte superior e inferior ao redor do vaso de pressão poderiam não discriminar efetivamente a contribuição de cada parte do núcleo ativo. Portanto, as técnicas de Inteligência Artificial poderiam ser exploradas no desenvolvimento de novos reatores compactos considerando-se as limitações dos atuais sistemas de detecção adotados nos reatores de grande porte no monitoramento do Fator de Pico Nuclear com as condições de contorno expostas.

Dentre os vários métodos disponíveis de Aprendizado de Máquina que poderiam ser utilizados na estimativa do Fator de Pico Nuclear, aquele que vem se mostrando mais promissor é o de Máquinas de Vetores de Suporte (*SVM – Support Vector Machine*) com acurácia de predição da ordem de 0,1% [10, 11]. Outros métodos como, por exemplo, Redes Neurais Artificiais (*ANNs – Artificial Neural Networks*) também foram estudados na estimativa desse parâmetro. Trabalhos recentes em áreas distintas mostram que as *SVMs* têm obtido acurácia de predição maior, principalmente em modelos de menor complexidade e de acordo com a quantidade de dados disponíveis para a criação do modelo, quando comparadas às *ANNs* [12-14].

As *SVMs* foram inicialmente utilizadas em problemas de classificação e reconhecimento de padrões mas, com algumas modificações do método, tornou-se possível sua utilização na solução de problemas de regressão mais complexos. A partir de então, o método vem sendo amplamente utilizado em variadas áreas do conhecimento [13, 15, 16] e em diversas disciplinas da área nuclear [17-23].

Apesar de trabalhos similares já terem sido apresentados abordando a estimativa do Fator de Pico através de *SVMs*, nenhum deles tratou da aplicação da ferramenta e seu comportamento em reatores compactos que não utilizam boro, apenas em reatores comerciais *PWR* padrão para geração de energia. Os reatores padrão mencionados são aqueles com características de projeto similares que foram construídos no fim da década de 90 e são considerados de 2ª geração. Esse tipo de reator possui comprimento ativo muito maior e deve apresentar comportamento

distinto quando comparado a reatores compactos sem boro diluído no moderador, principalmente devido à distribuição não-homogênea de xenônio e menor inserção relativa de barras de controle no núcleo do reator.

Pelo exposto, o presente trabalho visa examinar a aplicação da metodologia de predição do Fator de Pico Nuclear a partir da posição dos bancos de controle de um reator utilizando o modelo de regressão baseado no algoritmo de Aprendizado de Máquina definido como Máquina de Vetores de Suporte com o objetivo de fornecer uma alternativa ao monitoramento desse parâmetro durante a operação de reatores compactos.

2 OBJETIVOS

O objetivo principal deste trabalho é desenvolver e aplicar uma metodologia de monitoramento do Fator de Pico Nuclear em reatores compactos utilizando uma abordagem baseada em Aprendizado de Máquina de forma a apresentar uma alternativa às técnicas atuais disponíveis na indústria, cuja aplicabilidade em reatores compactos é limitada considerando as características de monitoramento desses sistemas e os desafios a serem superados.

Com base nesse objetivo, a etapa inicial consiste na revisão bibliográfica (Capítulo 3) para a escolha do método de Aprendizado de Máquina, através da avaliação do desempenho e aplicação das várias técnicas que vêm sendo utilizadas na área nuclear e, mais especificamente, na predição do Fator de Pico Nuclear.

Com a escolha do método de Aprendizado de Máquina, uma segunda etapa corresponde ao aprofundamento de seu entendimento (Seção 4.1) de forma a conhecer os conceitos e técnicas que envolvem a criação e otimização do modelo.

Baseando-se na seleção do reator em si, a etapa seguinte corresponde à avaliação dos recursos disponíveis para sua simulação (Seção 4.2) e à investigação da metodologia de solução escolhida para a aquisição da base de dados de Fator de Pico Nuclear que será aplicada na criação do modelo de Aprendizado de Máquina (Seção 4.3). A metodologia do código de Física de Reatores adotada para a simulação do reator deve ser simples o suficiente para a obtenção de uma ampla quantidade de dados, em um espaço de tempo reduzido e de acordo com a capacidade computacional disponível.

Após a modelagem do reator (Seção 4.4) e a abordagem de cálculo do Fator de Pico Nuclear (Seção 4.5), a aquisição da base de dados traduz-se na simulação dos vários estados do reator. Previamente à construção do modelo de

predição para monitoramento, é necessário o conhecimento e análise dessa base de dados para um melhor entendimento do comportamento da distribuição de potência e do Fator de Pico Nuclear (Seção 5.1). Com a percepção dos dados que compõe a base, é possível separá-los em dados de treino e teste construindo um modelo de predição de maneira mais sóbria com a otimização dos parâmetros disponíveis (Seção 5.2).

Com o modelo final otimizado estabelecido, a próxima fase consiste na análise do desempenho do modelo comparando o Fator de Pico Nuclear obtido a partir da predição com os valores originais que compõem a base de dados. Para tal, deve ser realizada uma análise gráfica preliminar da concordância dos dados e, posteriormente, das figuras de mérito mais comuns definidas para avaliação (Subseções 5.3.1 à 5.3.3).

Por fim, deve ser realizada uma comparação dos resultados do modelo otimizado obtido com estudos anteriormente publicados que utilizavam a mesma ferramenta de Aprendizado de Máquina visando determinar as diferenças de abordagem metodológica, objetivos e aplicação, bem como avaliar a complexidade e acurácia, concluindo sobre as vantagens e aplicabilidade do método no monitoramento do Fator de Pico Nuclear em reatores compactos (Subseções 5.3.4 e 5.3.5).

3 REVISÃO BIBLIOGRÁFICA

Com o aumento da capacidade computacional e o desenvolvimento tecnológico, a aplicação de técnicas de Inteligência Artificial (AI) em vários campos da indústria e pesquisa vem se tornando crescente nas últimas décadas.

Mesmo que a área nuclear historicamente apresente uma certa resistência quanto à utilização de tecnologias inovadoras, os requisitos de segurança, a necessidade de redução de rejeitos e de maior eficiência de reatores avançados têm tornado inevitável a aplicação de novas metodologias e componentes. Essa resistência deu-se, basicamente, pelas incertezas quanto ao uso dessas tecnologias em sistemas reais de operação de plantas nucleares, porém nas últimas décadas, a Agência Internacional de Energia Atômica (IAEA) tem ressaltado a importância dessa renovação da área nuclear [24].

Com o surgimento do Aprendizado de Máquina dentro do escopo da AI, capaz de abordar problemas complexos e incertezas associadas, criou-se o campo de pesquisa com aplicações na área de engenharia utilizando a técnica tanto como meio rápido de otimização como de estimativa.

Há cinco algoritmos populares de Aprendizado de Máquina clássico que podem ser encontrados em aplicações nas áreas nuclear e radiológica: Árvores de Decisão (DT – *Decision Trees*), Redes Neurais Artificiais (ANNs), Vizinho Próximo (NN – *Nearest Neighbor*), Máquina de Vetores de Suporte (SVM), e Nãive Bayes (NB). Outros dois algoritmos também aparecem na literatura, sejam sozinhos ou associados às ANNs: Algoritmo Evolucionário (EA – *Evolutionary Algorithm*) e Lógica Difusa (FL – *Fuzzy Logic*) [24].

Em plantas nucleares, métodos baseados em Aprendizado de Máquina têm sido estudados na predição de parâmetros de diagnóstico, monitoramento, controle, planejamento e outras tarefas que podem se beneficiar do reconhecimento

de padrões. O objetivo principal da utilização desses métodos é fornecer aos operadores dados acurados suficientes e de maneira rápida para que haja uma intervenção ótima em condições de degradação, envelhecimento e transientes, tornando a planta e seus componentes mais seguros.

O Aprendizado de Máquina pode ser utilizado, por exemplo, no monitoramento da calibração de instrumentos, no monitoramento de equipamentos, do núcleo do reator e de partes soltas, na identificação de transientes, no controle do reator, entre outros. Nesse caso, o método possui a funcionalidade de detectar a mudança de uma condição normal para novos estados que podem ser caracterizados ao longo do tempo.

São muitas as aplicações de técnicas de *AI* que podem ser encontradas na literatura da área nuclear, algumas delas são: predição do comportamento de sistemas [25], estimativa de parâmetros de segurança [20, 26], acidentes severos [21, 22], falhas funcionais [27], blindagem [18, 19], combustível queimado [23], controle de oscilação de xenônio [28], entre outras.

Pouca literatura é encontrada sobre o assunto específico da predição do Fator de Pico Nuclear utilizando técnicas de *AI*, provavelmente devido ao fato de as tecnologias atualmente disponíveis aplicadas no monitoramento do fluxo neutrônico terem se mostrado bem-sucedidas nos reatores nucleares até então construídos que, em sua maioria, são *PWRs* grandes (comerciais, para geração de energia elétrica), com controle de reatividade por boro solúvel e, portanto, sem a necessidade de inserção acentuada de barras de controle no núcleo do reator durante a operação, além de possuírem menores exigências quanto a transientes rápidos de potência.

Esse assunto vem se tornando de maior relevância nos últimos anos, acompanhando as novas técnicas computacionais e o desenvolvimento de reatores compactos e modulares de maior potência, seja para uso comercial na geração de energia elétrica (embarcada ou não) ou ainda, para propulsão de navios e

submarinos. Nesses casos, o Fator de Pico Nuclear torna-se um importante limitante de segurança dos projetos.

A literatura revisada sobre a estimativa do Fator de Pico Nuclear aborda principalmente o uso de *ANNs* [6, 29-33], *Fuzzy ANNs* [34, 35] e *SVMs* [10, 11, 35].

Dos trabalhos publicados que abordam o uso de *SVM*, as primeiras contribuições, em 2008 e 2009, foram o desenvolvimento da metodologia e sua aplicação pioneira na predição do Fator de Pico Nuclear para uso em sistemas de monitoramento e proteção a partir de simulações do *PWR* comercial YGN-3 (atualmente chamado de Hanbit-3) [10, 11]. As simulações foram realizadas no código de análise de reatores *MASTER (Multipurpose Analyzer for Static and Transient Effects of Reactor)* – desenvolvido pelo *KAERI (Korea Atomic Energy Research Institute)* – para a obtenção da base de dados utilizada na criação dos modelos.

Esses trabalhos obtiveram Erros Absolutos Médios (*RMSE – Root Mean Squared Error*) da ordem de 0,1 a 0,2% e Erro Relativo Máximo (*MRE – Maximum Relative Error*) da ordem de 0,7 a 1,8%, concluindo que o método possui acurácia suficiente para a aplicação. Em [10], os resultados mostraram acurácia superior à obtida em trabalho anterior dos autores com *Fuzzy ANNs* [34] e em [11], algumas predições dos modelos *SVM* foram comparadas aos cálculos realizados pelo sistema de monitoramento *COLSS (Core Operation Limit Supervisory System)* do reator, apresentando resultados de predição menos conservadores que os do sistema.

Mais recentemente, em 2017, os autores em [35] compararam as *Cascaded Fuzzy ANNs* com novos modelos *SVMs* criados com a mesma base de dados utilizada em [10, 11]. Foram apresentados erros ainda menores que os obtidos anteriormente para as *SVMs*, com *RMSE* da ordem de 0,05 a 0,07% e *MRE* da ordem de 0,4 a 1,9%, comparáveis ao *RMSE* da ordem de 0,03 a 0,05% e *MRE* da ordem de 0,1 a 0,3% obtidos com as *Cascaded Fuzzy ANNs*. Os autores destacaram o maior tempo computacional no treinamento das *SVMs* com relação as *Cascaded*

Fuzzy ANNs e utilizaram menos dados no treinamento dos modelos *SVMs*, concluindo pela superioridade das *Cascaded Fuzzy ANNs* sobre as *SVMs* porém, a complexidade dos modelos não foi abordada no trabalho.

Alguns pontos positivos da aplicação da *SVM* que podem ser citados são a sensibilidade a dados de entrada que não contém informação relevante, sensibilidade a transformações monotônicas, robustez quanto a valores não-usuais ou inconsistentes e maior clareza no entendimento da lógica que define o algoritmo. Como pontos negativos estão a dificuldade de lidar com diferentes tipos de dados (discretos, contínuos, etc.), a falta de sensibilidade a dados não registrados e a não-habilidade de lidar com o aumento da dimensionalidade do conjunto de dados [24].

Nesse contexto, as *SVMs* não necessitam de análise prévia de correlação entre os parâmetros de entrada e o parâmetro a ser estimado devido à própria formulação da teoria que considera os vetores de peso e o conceito de margem ou de região insensível, no entanto, não eximindo o analista da seleção dos atributos relevantes para a redução do tempo de treinamento do modelo. Assim, a ferramenta também é capaz de capturar relações de crescimento implícitas entre esses dados quando o espaço amostral de entrada é representativo e o modelo não é prejudicado por *outliers*, além de não se apresentar como uma “caixa preta” de difícil entendimento dada a interpretabilidade da teoria de mapeamento em um espaço de dimensões maiores para a linearização e solução do problema. Quanto aos pontos negativos, na maioria das abordagens não se apresenta como limitante devido à utilização, em geral, de apenas um tipo de variável (discreta ou contínua) e de a base de dados ser representativa dos estados possíveis – seja pela quantidade de dados ser limitada ou pelo fato de os dados relevantes terem sido previamente selecionados – não afetando também a dimensionalidade. [24]

Para a predição do Fator de Pico Nuclear, os modelos apresentados na literatura revisada demonstram serem suficientes poucos parâmetros de entrada como posição de barras de controle e sinais de alguns sensores para que a acurácia

obtida seja satisfatória. Assim, a dimensionalidade dos dados geralmente não se apresenta como um fator limitante à aplicação do método.

A partir dessa revisão bibliográfica, observa-se a possibilidade de maior exploração da aplicação de *SVMs* entre os métodos de *AI* com as vantagens descritas quando trata-se da estimativa do Fator de Pico Nuclear como parâmetro relevante relacionado à segurança em reatores compactos isentos de boro e controlados apenas pela movimentação de barras de controle.

Cabe destacar, que o uso do Aprendizado Profundo (*Deep Learning*) não foi considerado nesse trabalho por se tratar de uma ferramenta adotada em problemas mais complexos – sendo muitas vezes considerada até mesmo uma evolução do Aprendizado de Máquina – utilizada nos casos em que há uma extensa base de dados de treinamento disponível ou no caso em que muitas variáveis de estado correlacionadas são necessárias para a criação do modelo de predição, exigindo, ainda, maior poder computacional para sua execução. Assim, quando a quantidade de dados é limitada e as variáveis são passíveis de serem manejadas, como no caso abordado, os métodos clássicos de Aprendizado de Máquina fornecem uma solução mais simples com performances tão boas, ou até mesmo melhores, que aquelas encontradas com a aplicação do Aprendizado Profundo. [36]

4 METODOLOGIA

4.1 Máquina de Vetores de Suporte (SVM)

O sonho de que máquinas um dia seriam capazes de aprender é talvez tão antigo quanto os próprios computadores. Durante muito tempo, no entanto, permaneceu assim: apenas um sonho.

O entendimento inicial predominante na área de Inteligência Artificial reiterava que o “conhecimento” dos sistemas deveria assumir a forma de regras *if-then* reunidas pelo esforço conjunto de engenheiros e especialistas de campo e capazes de interpretar as informações fornecidas. Apesar de algumas histórias de sucesso terem sido amplamente divulgadas, a maioria das tentativas de criar uma base de conhecimento da ordem de dezenas de milhares de regras mostrou-se frustrante devido às dificuldades práticas. Até que um grupo de visionários fez uma proposta simples e audaciosa: se for tão difícil dizer a uma máquina exatamente como resolver um determinado problema, por que não fornecer a instrução indiretamente, transmitindo as habilidades necessárias por meio de exemplos através dos quais o computador possa aprender? Assim nasceu o Aprendizado de Máquina. [36]

A Máquina de Vetores de Suporte (SVM – *Support Vector Machine*) é uma ferramenta estatística baseada no Aprendizado de Máquina cujas bases iniciais foram apresentadas por Vapnik e Chervonenkis nos anos 60 [37]. O método é comumente utilizado em problemas de classificação e reconhecimento de padrões mas também é possível resolver problemas de regressão através da introdução de uma função de perda alternativa conhecida como função ε -insensível.

A ideia principal da Regressão de Vetores de Suporte (SVR – *Support Vector Regression*) é mapear um problema não-linear em um espaço de

características dimensionais maiores onde o problema torna-se linear e de mais fácil solução. Assim, dado um conjunto N de dados de treino $\{(\mathbf{x}_i, y_i)\}_{i=1}^N \in \mathfrak{R}^n \times \mathfrak{R}$, com $\mathbf{x}_i$ sendo o vetor de entrada e y_i o valor desejado a ser estimado pelo modelo SVR, pode-se considerar a seguinte função de regressão

$$y = f(\mathbf{x}_i, \mathbf{w}) = \sum_{j=1}^n \omega_j \theta_j(\mathbf{x}_i) + b = \langle \mathbf{w}, \boldsymbol{\Theta}(\mathbf{x}_i) \rangle + b$$

com

$$\mathbf{w} = [\omega_1 \omega_2 \dots \omega_n],$$

$$\boldsymbol{\Theta}(\mathbf{x}_i) = [\theta_1 \theta_2 \dots \theta_n],$$

onde $\boldsymbol{\Theta}$ é a função que mapeia os vetores $\mathbf{x}_i$ no espaço n -dimensional, $\mathbf{w}$ são os vetores de peso e b , o enviesamento.

O problema de otimização consiste em minimizar a função de risco regularizada

$$R(\mathbf{w}) = \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^N |y_i - f(\mathbf{x}_i, \mathbf{w})|_{\varepsilon}, \quad (1)$$

onde

$$|y_i - f(\mathbf{x}_i, \mathbf{w})|_{\varepsilon} = \begin{cases} 0 & , \text{ se } |y_i - f(\mathbf{x}_i, \mathbf{w})| \leq \varepsilon \\ |y_i - f(\mathbf{x}_i, \mathbf{w})| - \varepsilon & , \text{ de outra forma.} \end{cases} \quad (2)$$

O termo $|y_i - f(\mathbf{x}_i, \mathbf{w})|_{\varepsilon}$ na Eq. 2 é conhecido como a função de perda ε -insensível de Vapnik, que define um tubo ao redor de $f(\mathbf{x}_i, \mathbf{w})$. Se y_i jaz dentro

do tubo, então a função de perda ε -insensível é nula, caso localize-se fora do tubo, então a função possui o valor da distância entre y_i e a superfície do tubo.

O parâmetro C na Eq. 1 é a constante de regularização que determina o compromisso entre a suavidade de $\|\mathbf{w}\|$ e o quanto desvios maiores que ε são tolerados na função de regressão $f(\mathbf{x}_i, \mathbf{w})$. O aumento de ε implica na redução do número de vetores de suporte e do termo de enviesamento, no entanto pode reduzir a acurácia do modelo criando problemas de *overfitting*.

Observando-se a Eq. 1, é possível perceber que erros maiores podem ser penalizados aumentando-se tanto C como $\|\mathbf{w}\|$, no entanto, como o aumento do módulo do vetor peso tornaria o modelo mais complexo, o curso mais geral de ação é minimizar a função de risco através da variação da constante de regularização e do limite de desvio da função de perda que são os parâmetros livres que fornecerão o equilíbrio entre a complexidade e a tolerância a erros no problema de otimização.

A Eq. 1 pode ser reescrita como função das condições de contorno superior (ξ^*) e inferior (ξ) das saídas do sistema

$$R(\mathbf{w}, \xi, \xi^*) = \frac{1}{2} \|\mathbf{w}\|^2 + C \sum_{i=1}^N (\xi_i + \xi_i^*), \quad (3)$$

onde

$$\xi = [\xi_1 \xi_2 \dots \xi_N],$$

$$\xi^* = [\xi_1^* \xi_2^* \dots \xi_N^*],$$

com as seguintes condições de contorno

$$\begin{cases} y_i - \langle \mathbf{w}, \boldsymbol{\Theta}(\mathbf{x}_i) \rangle - b \leq \varepsilon + \xi_i \\ \langle \mathbf{w}, \boldsymbol{\Theta}(\mathbf{x}_i) \rangle + b - y_i \leq \varepsilon + \xi_i^* \\ \xi_i, \xi_i^* \geq 0. \end{cases} \quad \text{para } i = 1, 2, 3, \dots, N. \quad (4)$$

Então, a Lagrangiana composta pelas Eqs. 3 e 4 fornece a função de regressão

$$y = f(\mathbf{x}_k) = \sum_{i=1}^N (\alpha_i - \alpha_i^*) K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_k) + b, \quad (5)$$

onde $K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_k) = \langle \boldsymbol{\Theta}(\mathbf{x}_i), \boldsymbol{\Theta}(\mathbf{x}_k) \rangle$ é a função de núcleo. Se y_i jaz fora do tubo gerado por ε então, um dos coeficientes de Lagrange α_i ou α_i^* é não-nulo e a observação correspondente, $\mathbf{x}_i$, é chamada de vetor de suporte.

Assim, da Eq. 5, qualquer valor de y a ser previsto pode ser obtido de suas observações associadas $\mathbf{x}_k$ apenas como função dos vetores de suporte $\mathbf{x}_i$.

A Figura 4.1 mostra um esquema para melhor visualização de uma SVR não-linear utilizando a função de perda ε -insensível de Vapnik, incluindo suas condições de contorno.

Neste trabalho foi utilizada como função de núcleo a Função Radial de Base (*RBF – Radial Basis Function*) ou núcleo Gaussiano que mapeia os dados reais dentro do espaço característico no qual um modelo linear pode ser construído e facilmente resolvido. Portanto, essa é uma escolha do hiperplano no qual os dados serão mapeados durante o treinamento. Assim, a *RBF* é dada por

$$K(\mathbf{x}_i, \mathbf{x}_k) = e^{-\gamma \|\mathbf{x}_i - \mathbf{x}_k\|^2}, \quad (6)$$

onde γ fornece a largura da gaussiana, ou seja, da região de decisão no hiperplano de mapeamento.

Por se tratar de uma função de núcleo mais complexa onde os vetores de suporte são distribuídos de forma gaussiana, a *RBF* é a função mais utilizada na prática devido à sua alta capacidade de gerar regressões não-paramétricas, ou seja, onde não se conhece previamente o comportamento de y_i com x_i [38].

Figura 4.1 – SVR não-linear utilizando a função de perda ε -insensível de Vapnik.

As linhas inclinadas no gráfico superior buscam representar o tubo definido por ε , de forma a fornecer a posição dos pontos com relação a ele (interna, externa ou na superfície).

Fonte: adaptado de [39].

4.1.1 Considerações sobre a aplicação da SVM

A *SVM* é uma ferramenta muito sensível à escolha apropriada dos parâmetros do modelo [40]. Portanto, com o objetivo de aplicar o método demonstrado, é recomendado o uso de uma busca em grade sobre todos os parâmetros disponíveis para alcançar melhores resultados.

Algoritmos genéticos e outras ferramentas também podem ser implementados na busca dos melhores valores para os parâmetros do modelo, no entanto, essas ferramentas são muito custosas computacionalmente e para pequenos grupos de dados, na maioria das vezes, apresentam resultados muito similares quando comparados com métodos simples como a busca em grade, por exemplo [40-42].

A busca em grade pode ser empregada simplesmente através da seleção de um conjunto finito de valores razoáveis para cada hiperparâmetro, treinando o modelo com suas combinações, avaliando sua performance de forma mais avançada estatisticamente através da validação cruzada em k subgrupos (*k-fold-cross-validation*) e fixando os valores dos parâmetros que alcançarem a pontuação mais alta no processo de validação.

O princípio desse tipo de validação consiste na reamostragem aleatória dos dados de treino a partir da divisão em k subgrupos de tamanhos iguais (ou quase iguais), então a validação é realizada em k experimentos. Em cada um deles, um dos k subgrupos é removido para ser utilizado apenas para validação, garantindo que, em cada experimento, um conjunto de validação diferente seja utilizado. O treinamento do modelo é então executado com a união dos restantes $k-1$ subgrupos.

Este método de validação por reamostragem oferece uma troca entre o enviesamento do modelo e a variância: quanto menor o valor de k , maior é o enviesamento na estimativa do erro e menor é a variância. Por outro lado, quando o valor de k é igual ao número de dados no conjunto de treino, o erro de predição possui então, um enviesamento muito pequeno mas há a possibilidade de alta variância.

A tensão entre a complexidade e a performance do modelo é expressa na noção estatística do equilíbrio enviesamento-variância mostrada para um conjunto de dados genérico na Figura 4.2. A complexidade do modelo é definida dependendo do método empregado na criação do modelo e não foi especificada em [43] por

tratar-se de uma análise conceitual de qualquer modelo de predição, sem se ater ao método utilizado.

Enquanto que o enviesamento é advindo de suposições incorretas de construção dentro do modelo – como por exemplo, a interpolação de uma função como linear em vez de uma curva de mais alta ordem – a variância indica a sensibilidade com relação às flutuações de ruídos no conjunto de dados.

Com o aumento da complexidade do modelo, há maior uso dos dados de treino possibilitando a adaptação a estruturas subjacentes mais complexas, assim há um decréscimo no enviesamento e um aumento na variância. Os modelos de alta complexidade performam bem nos dados de treino mas de maneira insuficiente nos dados de teste (*overfitting*). Por outro lado, a redução da complexidade do modelo torna-o menos capaz de representar com fidelidade a variabilidade dos dados possuindo menor sensibilidade às suas flutuações causando um aumento do enviesamento e um decréscimo da variância. Os modelos de baixa complexidade performam mal tanto nos dados de treino como de teste (*underfitting*). Portanto, há um modelo de complexidade intermediária capaz de fornecer o mínimo erro esperado nos dados de teste.

Ainda, na Figura 4.2 pode-se verificar que os erros de predição nos dados de treino decrescem consistentemente a zero com o aumento da complexidade do modelo mostrando que esse erro não representa uma boa estimativa do erro nos dados de teste.

A abordagem adotada nesse trabalho para criar o modelo de SVM foi uma busca em grade utilizando expoentes de 2 para C e γ com uma validação cruzada por reamostragem de 10 subgrupos no conjunto de dados de treino. Essa técnica de validação é a mais recomendada para equilibrar a relação entre o enviesamento e a variância [44]. Subsequentemente, os intervalos de C e γ foram reduzidos ao redor do melhor resultado encontrado na busca anterior de forma a refiná-los. Então, após alcançar os melhores valores para esses dois hiperparâmetros e

mantendo-os fixos, um procedimento similar foi executado para o parâmetro ε da função de perda obtendo-se, finalmente, o modelo otimizado que também foi avaliado no contexto do conjunto de dados de teste de forma a garantir sua performance.

Figura 4.2 – Comportamento do erro de predição para 100 conjuntos de dados genéricos de treino de tamanho 50 cada com o aumento da complexidade do modelo.

Dados de treino (azul claro) e teste (vermelho claro). As linhas sólidas mostram o valor esperado do erro para cada um dos conjuntos.

Fonte: adaptado de [43].

4.2 Solução da equação de transporte de nêutrons e suas aproximações

O comportamento de um reator nuclear é governado pela distribuição em espaço, energia e tempo dos nêutrons que compõem o sistema e, um dos principais objetivos da teoria de reatores, é prever essa distribuição. Em princípio, isso pode ser realizado resolvendo a equação de transporte de nêutrons também conhecida

como equação de Boltzmann [45], deduzida como a Eq. 7, a partir dos nêutrons contidos em um elemento de volume no sistema de coordenadas da Figura 4.3.

Figura 4.3 – Elemento de volume dV e elemento direcional $d\Omega$ referente ao ângulo sólido Ω .

Fonte: adaptado de [45].

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \Phi(\mathbf{r}, \Omega, E, t)}{\partial t} + \Omega \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r}, \Omega, E, t) + \sigma(\mathbf{r}, E) \Phi(\mathbf{r}, \Omega, E, t) = q(\mathbf{r}, \Omega, E, t), \quad (7)$$

com

$$q(\mathbf{r}, \Omega, E, t) = \int d\Omega' \int dE' \sigma(\mathbf{r}, E') f(\mathbf{r}, \Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E) \Phi(\mathbf{r}, \Omega', E', t) + Q(\mathbf{r}, \Omega, E, t),$$

definido como o termo de fonte.

Sendo v a velocidade dos nêutrons com energia E descritos como uma partícula pontual que se desloca na direção Ω a partir da posição $\vec{r}$ no instante t ,

Φ o fluxo angular de nêutrons, σ a seção de choque macroscópica total para todas as interações, f uma função de transferência e Q uma fonte externa de nêutrons. Ainda, os termos expressos com apóstrofo (') são referentes aos nêutrons com outras características de direção e energia que passam a ter as mesmas características dos nêutrons definidos sem apóstrofo devido às reações de interação.

Assim, inserindo-se as seções de choque apropriadas e considerando o arranjo geométrico dos materiais do reator, a Eq. 7 pode ser resolvida através de métodos numéricos.

Porém, quando do desenvolvimento dos projetos dos primeiros reatores, a capacidade computacional ainda era muito limitada e devido à complexidade da disposição dos materiais nos reatores, muito tempo seria demandado para a obtenção das soluções dessa equação. Com o objetivo de tornar o problema mais simples foram desenvolvidas várias aproximações à equação de transporte, algumas advindas da subdivisão de grupos de energia e outras do truncamento de séries das soluções analíticas culminando na equação de difusão de nêutrons multigrupo.

Uma das aproximações, conhecida como aproximação P_N , consiste na expansão da distribuição angular do fluxo de nêutrons (dependência com Ω), da seção de choque macroscópica e da fonte externa em um conjunto completo de funções ortogonais conhecidas como harmônicos esféricos, mais especificamente em Polinômios de Legendre. A equação é então manipulada utilizando-se das propriedades de ortogonalidade dessas funções e as expansões são truncadas após $N+1$ termos. A dependência espacial do fluxo angular pode ser obtida numericamente impondo-se ao problema uma malha espacial discreta e avaliando o fluxo em pontos espaciais discretos e não como uma função contínua da posição.

A equação de transporte com aproximação P_N também pode ser integrada em grupos de energia discretos onde o intervalo de energia dos nêutrons de interesse é dividido em um número finito de intervalos aproximadamente constantes, de forma que, a variação das seções de choque de importância sejam razoavelmente

pequenas dentro de cada grupo. Essa aproximação é conhecida como multigrupo dando origem a um conjunto de equações acopladas cuja estratégia usualmente adotada é a solução da equação para o grupo de maior energia e subsequentemente para os de menor energia.

Quando as equações da aproximação P_N são truncadas no segundo termo (desconsiderando-se as anisotropias) e, a distribuição angular do fluxo de nêutrons é adequadamente representada pelos dois primeiros polinômios de Legendre, tem-se a aproximação P_1 . Se uma forma da aproximação P_1 na qual a contribuição do espalhamento anisotrópico para a transferência de energia é aproximada (e não desconsiderada) dá-se origem à teoria de difusão multigrupo.

Em outra classe de métodos multigrupo, conhecida como ordenadas discretas ou métodos discretos S_N (ou simplesmente S_N), a equação de transporte de nêutrons é solucionada em um conjunto discreto de direções. Assim, integrais angulares são aproximadas por somas sobre direções discretas e derivadas angulares por diferenças.

As equações multigrupo P_N e S_N são equações diferenciais que são convertidas em um sistema de equações algébricas para que sejam resolvidas computacionalmente através da introdução de uma malha espacial discreta e aproximando as derivadas por diferenças.

Quando a geometria do sistema é mais complicada, as equações gerais multigrupo não podem ser utilizadas diretamente. Nesse caso, o procedimento usual é primeiro realizar um cálculo na célula heterogênea, isto é, na unidade fundamental que se repete no arranjo do reator, sendo que esses resultados são utilizados para homogeneizar a célula de tal forma que forneça o mesmo balanço de nêutrons que o sistema heterogêneo para uso no cálculo total do transporte de nêutrons e economia por um método multigrupo (P_1 ou outro).

Para o cálculo celular, a equação de transporte de nêutrons na aproximação P_N ou S_N pode ser utilizada com as condições de contorno apropriadas.

Alternativamente, devido ao tamanho reduzido da maioria das células quando comparadas ao livre caminho médio do nêutron, em conjunto com a alta absorção na célula, probabilidades de colisão também são frequentemente utilizadas.

A maioria das geometrias podem ser resolvidas com precisão com os métodos P_N e S_N , porém, em alguns casos a malha espacial e angular podem não ser finas o suficiente para fornecer uma descrição adequada da geometria. Assim, para sistemas 2-D ou 3-D mais complexos, outros tratamentos devem ser aplicados. O método variacional fornece uma maneira de abordar o problema no qual é realizada uma tentativa de sintetizar um fluxo bidimensional, por exemplo, como o produto de dois fluxos unidimensionais.

Com o aumento da capacidade computacional nos dias atuais e em casos especiais como de geometrias muito complexas onde outros métodos apresentam dificuldades no cálculo celular, o Método de Monte Carlo pode ser empregado. Esse método se caracteriza-se por um procedimento numérico baseado em teoria estatística (ou probabilidade) e sua aplicação no cálculo de transporte de nêutrons emerge do fato de que as seções de choque macroscópicas podem ser interpretadas como a probabilidade de interação por unidade de distância percorrida pelo nêutron. Então, um conjunto de histórias de nêutrons é gerada seguindo os nêutrons individuais através de colisões sucessivas. As localizações das colisões e os resultados dessas colisões (como direção e energia dos nêutrons emergentes) são determinadas por um intervalo de possibilidades a partir de conjuntos de números aleatórios.

Após a revisão dos métodos e aproximações disponíveis para a solução da equação de transporte, optou-se nesse trabalho pela utilização do cálculo de difusão para a obtenção da base de dados do modelo SVM. A escolha foi baseada nas premissas de possibilidade de aplicação ao tipo de reator estudado e na obtenção de uma ampla quantidade de dados para variados estados do reator, com o menor tempo de execução, e de acordo com a capacidade computacional disponível.

4.3 Aproximação de difusão em multigrupos de energia

De forma a aprofundar o entendimento do processo, a partir da equação de transporte de nêutrons, pode se obter a aproximação de difusão em multigrupos de energia. Então, tomando a Eq. 7 independente do tempo, o primeiro termo se anula e obtém-se

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) + \sigma(\mathbf{r}, E) \Phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) = \\ = \int d\boldsymbol{\Omega}' \int dE' \sigma(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) \Phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E') + Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E). \end{aligned} \quad (8)$$

Considerando como uma aproximação razoável supor que o espalhamento depende apenas do ângulo entre a direção do nêutron incidente, $\boldsymbol{\Omega}'$, e do nêutron espalhado, $\boldsymbol{\Omega}$, pode se definir

$$\sigma(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\Omega}', E' \rightarrow E) \equiv \sigma(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}),$$

onde σ sugere, mas não é limitado a, seção de choque macroscópica de espalhamento. Portanto, a Eq. 8 fica

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) + \sigma(\mathbf{r}, E) \Phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) = \\ = \int d\boldsymbol{\Omega}' \int dE' \sigma(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\Omega}', E' \rightarrow E) \Phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E') + Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E). \end{aligned} \quad (9)$$

Então, σ pode ser expandido em polinômios de Legendre, $P_l(\mu_0)$ – também conhecidos como harmônicos esféricos – considerando a separabilidade entre a parte radial e angular da seção de choque macroscópica. Assim, definindo $\boldsymbol{\Omega} \cdot \boldsymbol{\Omega}' = \mu_0$ conforme Figura 4.4, obtém-se

$$\sigma(\mathbf{r}, \mu_0, E' \rightarrow E) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_l(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) P_l(\mu_0). \quad (10)$$

Figura 4.4 – Direções de movimento do nêutron antes e após o espalhamento.

Fonte: extraído de [45].

De acordo com o teorema da adição dos polinômios de Legendre, se dois vetores cujas coordenadas angulares são (μ, φ) e (μ', φ') , respectivamente, então para o ângulo entre esses vetores, ϱ , tem-se

$$P_l(\mu_0) = P_l(\mu)P_l(\mu') + 2 \sum_{m=1}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\mu)P_l^m(\mu') \cos[m(\varphi - \varphi')], \quad (11)$$

onde $\mu_0 = \mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{\Omega}' = \cos \varrho$, $\mu = \cos \vartheta$, $\mu' = \cos \vartheta'$ são as direções dos cossenos e, φ e φ' são os ângulos azimutais especificando as direções $\mathbf{\Omega}$ e $\mathbf{\Omega}'$, respectivamente. Os $P_l^m(\mu)$ e $P_l^m(\mu')$ são os polinômios associados de Legendre e, portanto, formam uma família ortogonal.

Assim, inserindo as expressões 10 e 11 na Eq. 9 obtém-se

$$\begin{aligned} \mathbf{\Omega} \cdot \nabla \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) + \sigma(\mathbf{r}, E) \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) = \\ = \int d\mathbf{\Omega}' \int dE' \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_l(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \{ P_l(\mu) P_l(\mu') + \\ + 2 \sum_{m=1}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\mu) P_l^m(\mu') \cos[m(\varphi - \varphi')] \} \Phi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', E') + Q(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E). \end{aligned} \quad (12)$$

Tanto para geometrias planas como esféricas, o fluxo angular em uma dimensão na aproximação P_N é definido como

$$\Phi(x, \mu, E) = \sum_{m=0}^{\infty} \frac{2m+1}{4\pi} \phi_m(x, E) P_m(\mu), \quad (13)$$

$$\text{com } \phi_m(x, E) = 2\pi \int_{-1}^1 \Phi(x, \mu, E) P_m(\mu) d\mu.$$

Assim, aplicando a aproximação P_1 na Eq. 13 sabendo que $P_0(\mu) = 1$, $P_1(\mu) = \mu$ e que da definição de $\phi_m(x, E)$, $\phi_0(x, E) = 2\pi \int_{-1}^1 \Phi(x, \mu, E) d\mu = \phi(x, E)$ e $\phi_1(x, E) = 2\pi \int_{-1}^1 \Phi(x, \mu, E) \mu d\mu = J(x, E)$ segue que

$$\Phi(x, \mu, E) = \frac{1}{4\pi} [\phi(x, E) + 3\mu J(x, E)].$$

Então, generalizando a expressão de coordenada unidimensional para tridimensional, tem-se

$$\Phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) = \frac{1}{4\pi} [\phi(\mathbf{r}, E) + 3\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E)]. \quad (14)$$

Em seguida, inserindo a Eq. 14 da aproximação P_1 na Eq. 12 obtém-se

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \left\{ \frac{1}{4\pi} [\phi(\mathbf{r}, E) + 3\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E)] \right\} + \sigma(\mathbf{r}) \left\{ \frac{1}{4\pi} [\phi(\mathbf{r}, E) + 3\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E)] \right\} = \\
= \int d\boldsymbol{\Omega}' \int dE' \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_l(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \times \{ P_l(\mu) P_l(\mu') + \\
+ 2 \sum_{m=1}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\mu) P_l^m(\mu') \cos[m(\varphi - \varphi')] \} \times \left\{ \frac{1}{4\pi} [\phi(\mathbf{r}, E') + 3\boldsymbol{\Omega}' \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E')] \right\} + \\
+ Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E).
\end{aligned}$$

Como $d\boldsymbol{\Omega}' = d\mu' d\varphi'$, então $\int_0^{2\pi} d\varphi' \cos[m(\varphi - \varphi')] = 0$, fazendo com que

o segundo termo à direita da igualdade se anule, restando

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \left\{ \frac{1}{4\pi} [\phi(\mathbf{r}, E) + 3\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E)] \right\} + \sigma(\mathbf{r}, E) \left\{ \frac{1}{4\pi} [\phi(\mathbf{r}, E) + 3\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E)] \right\} = \\
= \int d\boldsymbol{\Omega}' \int dE' \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_l(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \times P_l(\mu) P_l(\mu') \times \left\{ \frac{1}{4\pi} [\phi(\mathbf{r}, E') + 3\boldsymbol{\Omega}' \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E')] \right\} + \\
+ Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E).
\end{aligned}$$

Manipulando o lado direito da igualdade fica

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \left\{ \frac{1}{4\pi} [\phi(\mathbf{r}, E) + 3\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E)] \right\} + \sigma(\mathbf{r}) \left\{ \frac{1}{4\pi} [\phi(\mathbf{r}, E) + 3\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E)] \right\} = \\
= \int dE' \int d\mu' d\varphi' \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_l(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \times P_l(\mu) P_l(\mu') \frac{1}{4\pi} \phi(\mathbf{r}, E') + \\
+ \int dE' \int d\boldsymbol{\Omega}' \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_l(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \times P_l(\mu) P_l(\mu') \frac{3}{4\pi} \boldsymbol{\Omega}' \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E') + Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E).
\end{aligned}$$

Então, truncando os somatórios apenas para $l=0$ e $l=1$ na aproximação P_1 segue que

$$\begin{aligned}
\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \left\{ \frac{1}{4\pi} [\phi(\mathbf{r}, E) + 3\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E)] \right\} + \sigma(\mathbf{r}, E) \left\{ \frac{1}{4\pi} [\phi(\mathbf{r}, E) + 3\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E)] \right\} = \\
= \frac{1}{4\pi} \int dE' \sigma_0(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \phi(\mathbf{r}, E') + \frac{3}{4\pi} \int dE' \sigma_1(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E') + Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E).
\end{aligned}$$

Se ambos os lados da igualdade forem multiplicados por 4π chega-se ao seguinte

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla [\phi(\mathbf{r}, E) + 3\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E)] + \sigma(\mathbf{r}, E) [\phi(\mathbf{r}, E) + 3\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E)] = \\ = \int dE' \sigma_0(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \phi(\mathbf{r}, E') + 3 \int dE' \sigma_1(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E') + \\ + 4\pi Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E). \end{aligned} \quad (15)$$

Então, integrando a Eq. 15 sobre $\boldsymbol{\Omega}$ para utilizar as identidades $\int d\boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{\Omega} = 0$ e $\int d\boldsymbol{\Omega} (\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{A})(\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{B}) = \frac{4\pi}{3} \mathbf{A} \cdot \mathbf{B}$, obtém-se o desenvolvimento

$$\begin{aligned} \int d\boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}) + 3 \int d\boldsymbol{\Omega} \nabla [\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r})] + \int d\boldsymbol{\Omega} \sigma_0(\mathbf{r}) \phi(\mathbf{r}) + 3 \sigma_1(\mathbf{r}) \int d\boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) = \\ = 4\pi \int d\boldsymbol{\Omega} Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \int d\boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, E) + 3 \int d\boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla [\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E)] + \sigma(\mathbf{r}, E) [\int d\boldsymbol{\Omega} \phi(\mathbf{r}, E) + \\ + 3 \int d\boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E)] = \int d\boldsymbol{\Omega} \int dE' \sigma_0(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \phi(\mathbf{r}, E') + \\ + 3 \int dE' \sigma_1(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \int d\boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E') + 4\pi \int d\boldsymbol{\Omega} Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} 3 \left[\frac{4\pi}{3} \nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E) \right] + 4\pi \sigma(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E) = \\ = 4\pi \int dE' \sigma_0(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \phi(\mathbf{r}, E') + 4\pi Q_0(\mathbf{r}, E) \end{aligned}$$

$$\nabla \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E) + \sigma(\mathbf{r}, E) \phi(\mathbf{r}, E) = \int dE' \sigma_0(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \phi(\mathbf{r}, E') + Q_0(\mathbf{r}, E), \quad (16)$$

onde $Q_0(\mathbf{r}, E) = \int d\boldsymbol{\Omega} Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E)$.

Ainda, multiplicando a Eq. 15 por $\boldsymbol{\Omega}$, integrando sobre $\boldsymbol{\Omega}$ de forma a aplicar as identidades $\int d\boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{\Omega} = 0$ e $\int d\boldsymbol{\Omega} \boldsymbol{\Omega} (\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{A}) = \frac{4\pi}{3} \mathbf{A}$, pode-se também desenvolver como

$$\begin{aligned} \int d\Omega \Omega [\Omega \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, E)] + 3 \int d\Omega \Omega \Omega \cdot \nabla [\Omega \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E)] + \sigma(\mathbf{r}, E) \int d\Omega \Omega \phi(\mathbf{r}, E) + \\ + 3 \sigma(\mathbf{r}, E) \int d\Omega \Omega [\Omega \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E)] = \int d\Omega \Omega \int dE' \sigma_0(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \phi(\mathbf{r}, E') + \\ + 3 \int dE' \sigma_1(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \int d\Omega \Omega [\Omega \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}, E')] + 4\pi \int d\Omega \Omega Q(\mathbf{r}, \Omega, E) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \frac{4\pi}{3} \nabla \phi(\mathbf{r}, E) + 3 \left[\frac{4\pi}{3} \sigma(\mathbf{r}, E) \mathbf{J}(\mathbf{r}, E) \right] = \\ = 3 \int dE' \sigma_1(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \left[\frac{4\pi}{3} \mathbf{J}(\mathbf{r}, E') \right] + 4\pi \mathbf{Q}_1(\mathbf{r}, E) \end{aligned}$$

$$\nabla \phi(\mathbf{r}, E) + 3 \sigma(\mathbf{r}, E) \mathbf{J}(\mathbf{r}, E) = 3 \int dE' \sigma_1(\mathbf{r}, E' \rightarrow E) \mathbf{J}(\mathbf{r}, E') + 3 \mathbf{Q}_1(\mathbf{r}, E), \quad (17)$$

sendo $\mathbf{Q}_1(\mathbf{r}, E) = \int d\Omega \Omega Q(\mathbf{r}, \Omega, E)$.

As Eqs. 16 e 17 representam a aproximação P₁ da equação de transporte de nêutrons dependente em energia para uma geometria geral. Integrando essas equações em um grupo de energia $E_g \leq E_{g-1}$ chega-se a

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_g(\mathbf{r}) + \sigma_{0,g}(\mathbf{r}) \phi_g(\mathbf{r}) = \sum_{g'=g-1}^G \sigma_{0,g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) \phi_{g'}(\mathbf{r}) + Q_{0,g}(\mathbf{r}), \quad (18)$$

$$\nabla \phi_g(\mathbf{r}) + 3 \sigma_{1,g}(\mathbf{r}) \mathbf{J}_g(\mathbf{r}) = 3 \sum_{g'=g-1}^G \sigma_{1,g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) \mathbf{J}_{g'}(\mathbf{r}) + 3 \mathbf{Q}_{1,g}(\mathbf{r}), \quad (19)$$

onde $g = 1, 2, \dots, G$ e com as seguintes definições

$$\phi_g(\mathbf{r}) \equiv \int_g dE \phi(\mathbf{r}, E) = \int_g dE \int d\Omega \Phi(\mathbf{r}, \Omega, E),$$

$$\mathbf{J}_g(\mathbf{r}) \equiv \int_g dE \mathbf{J}(\mathbf{r}, E) = \int_g dE \int d\Omega \Omega \Phi(\mathbf{r}, \Omega, E),$$

$$Q_{0,g}(\mathbf{r}) \equiv \int_g dE Q_0(\mathbf{r}, E) = \int_g dE \int d\Omega Q(\mathbf{r}, \Omega, E),$$

$$\begin{aligned}
Q_{1,g}(\mathbf{r}) &\equiv \int_g dE Q_1(\mathbf{r}, E) = \int_g dE \int d\Omega \Omega Q(\mathbf{r}, \Omega, E), \\
\sigma_{0,g}(\mathbf{r}) &\equiv \frac{\int_g dE \phi(\mathbf{r}, E) \sigma_0(\mathbf{r}, E)}{\phi_g(\mathbf{r})}, \\
\sigma_{1,g}(\mathbf{r}) &\equiv \frac{\int_g dE J(\mathbf{r}, E) \sigma_0(\mathbf{r}, E)}{J_g(\mathbf{r})}, \\
\sigma_{0,g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) &\equiv \frac{\int_g dE dE' \phi(\mathbf{r}, E') \int \sigma_0(\mathbf{r}, E' \rightarrow E)}{\phi_g(\mathbf{r})} e \\
\sigma_{1,g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) &\equiv \frac{\int_g dE dE' J(\mathbf{r}, E') \int \sigma_1(\mathbf{r}, E' \rightarrow E)}{J_g(\mathbf{r})}.
\end{aligned}$$

Se uma forma dependente da energia para a Lei de Fick for postulada para uma geometria qualquer, tem-se

$$J(\mathbf{r}, E) = -D(\mathbf{r}, E) \nabla \phi(\mathbf{r}, E).$$

Então, a corrente do grupo pode ser expressa integrando sobre o grupo g e chegando a

$$J_g(\mathbf{r}) = -D_g(\mathbf{r}) \nabla \phi_g(\mathbf{r}), \quad (20)$$

com o coeficiente de difusão de grupo D_g é definido por

$$D_g(\mathbf{r}) = \frac{\int_g D(\mathbf{r}, E) \nabla \phi(\mathbf{r}, E) dE}{\nabla \phi_g(\mathbf{r})}.$$

Com essa definição, a equação de difusão multigrupo é finalmente obtida inserindo a Eq. 20 na Eq. 18

$$-D_g(\mathbf{r})\nabla^2\phi_g(\mathbf{r}) + \sigma_{0,g}(\mathbf{r})\phi_g(\mathbf{r}) = \sum_{g'=g-1}^G \sigma_{0,g'-g}(\mathbf{r})\phi_{g'}(\mathbf{r}) + Q_{0,g}(\mathbf{r}). \quad (21)$$

4.3.1 Criticalidade e espectro de fissão

O conceito principal que envolve a geração de uma reação em cadeia consiste em utilizar os nêutrons gerados a partir de uma reação de fissão para induzir outras reações desse tipo. No entanto, se deseja-se manter uma reação em cadeia estável ou estacionária, isto é, aquela que não cresce ou decai com o tempo, as condições do reator devem ser tais que um nêutron resultante de cada reação de fissão induza apenas um outro evento de fissão. Os nêutrons de fissão restantes devem ser absorvidos em reações de captura radioativa nos materiais contidos no núcleo do reator ou escapar do sistema.

Considerando um dado nêutron “nascido” de um evento de fissão, usualmente esse nêutron será espalhado dentro do reator até sua eventual “morte” em uma reação de absorção ou pela fuga do reator. Esses nêutrons nascem com uma determinada distribuição característica de energia denominada espectro de fissão e tendem a perder energia devido ao espalhamento. Durante esse processo, certa quantidade desses nêutrons será absorvida por núcleos físeis ou fissionáveis e induzirá mais fissões, levando ao nascimento de novos nêutrons, ou seja, a uma nova geração de nêutrons de fissão. Supondo que, de alguma maneira, fosse possível medir o número de nêutrons dessas duas gerações sucessivas, então, o fator efetivo de multiplicação de nêutrons, k_{eff} , pode ser definido como a razão entre o número de nêutrons que induziu fissões de uma geração e o número de nêutrons da geração anterior que também induziu fissões.

Assim, se esse o número de nêutrons dessas duas gerações consecutivas for igual, então $k_{eff} = 1$ e a reação em cadeia será independente do tempo. Nesse caso, é dito que o reator está em estado de criticalidade ou crítico.

A consideração de criticalidade é geralmente referida como um problema de autovalor devido ao fato de que tais problemas estão focados na determinação do k_{eff} , na equação independente do tempo, e de outros autovalores de interesse.

Se nêutrons de fissão são emitidos isotropicamente no sistema de coordenadas do laboratório, então o espectro de energia desses nêutrons pode ser descrito como parte do termo $\sigma_{0,g' \rightarrow g}(\mathbf{r})$. Em particular, é possível escrever

$$\sigma_{0,g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) = \sigma_{s0,g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) + \nu \sigma_{f,g' \rightarrow g}(\mathbf{r}),$$

onde ν é o número médio de nêutrons emitidos por fissão para um determinado nuclídeo e $\nu \sigma_{f,g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) \phi_g$ é a razão na qual nêutrons de fissão aparecem no grupo g como resultado de fissões causadas por nêutrons do grupo g' . A seção de choque $\sigma_{0,g' \rightarrow g}(\mathbf{r})$ contabiliza todas as transferências do grupo g' para o grupo g , o subscrito s sugere espalhamento, mas inclui também as contribuições das reações nucleares $(n, 2n)$.

Assim, considerando um espectro de emissão de nêutrons no grupo g , χ_g , as Eqs. 18 e 19 da aproximação multigrupo P_1 ficam

$$\nabla \cdot \mathbf{J}_g(\mathbf{r}) + \sigma_{0,g}(\mathbf{r}) \phi_g(\mathbf{r}) = \sum_{g'=g-1}^G \sigma_{s0,g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) \phi_{g'}(\mathbf{r}) + \sum_{g'=g-1}^G \frac{\chi_g \nu \sigma_{f,g' \rightarrow g}(\mathbf{r})}{k_{eff}} \phi_{g'}(\mathbf{r}), \quad (22)$$

$$\nabla \phi_g(\mathbf{r}) + 3 \sigma_{1,g}(\mathbf{r}) \mathbf{J}_g(\mathbf{r}) = 3 \sum_{g'=g-1}^G \sigma_{s0,g' \rightarrow g}(\mathbf{r}) \mathbf{J}_{g'}(\mathbf{r}) + \sum_{g'=g-1}^G \frac{\chi_g \nu \sigma_{f,g' \rightarrow g}(\mathbf{r})}{k_{eff}} \mathbf{J}_{g'}(\mathbf{r}). \quad (23)$$

As equações acima diferem das Eqs. 18 e 19 com respeito aos termos de fonte externa que foram zerados e também no termo dos nêutrons de fissão que foram separados dos demais. Adicionalmente, o espectro de fissão e o fator efetivo de multiplicação de nêutrons foram introduzidos para que a criticalidade exata seja alcançada.

Para a teoria de difusão em multigrupos de energia, a expressão para o autovalor k_{eff} correspondendo à Eq. 21 fica

$$-D_g(\mathbf{r})\nabla^2\phi_g(\mathbf{r}) + \sigma_{0,g}(\mathbf{r})\phi_g(\mathbf{r}) = \sum_{g'=g-1}^G \sigma_{s0,g'\rightarrow g}(\mathbf{r})\phi_{g'}(\mathbf{r}) + \sum_{g'=g-1}^G \frac{\chi_g \nu \sigma_{f,g'\rightarrow g}(\mathbf{r})}{k_{eff}} \phi_{g'}(\mathbf{r}). \quad (24)$$

Assim, foram obtidas as equações que serão resolvidas pelo código de difusão utilizado na simulação do reator.

4.4 Descrição do modelo de reator

O reator compacto simulado para aquisição da base de dados utilizada na criação do modelo SVM foi modelado no código 3-D multigrupos de energia CITATION [46] desenvolvido pelo *Oak Ridge National Laboratory (ORNL)* para resolver problemas através da representação em diferenças finitas da teoria de difusão de nêutrons como uma simplificação da equação de transporte de nêutrons – conforme explanado nas Seções 4.2 e 4.3. Esse método é utilizado na resolução numérica de equações diferenciais e se baseia na aproximação das derivadas das equações como diferenças finitas.

O reator foi idealizado a partir de um típico *PWR* ocidental padrão com temperatura média do moderador de 275°C, pressão do circuito primário de 135 bar-abs, ciclo do combustível único, varetas combustíveis compostas por pastilhas uniformes de UO_2 de baixo enriquecimento (menor que 5% em ^{235}U), com

revestimento em Zircaloy e montadas em um arranjo quadrado de 17x17 possuindo 28 tubos-guia para a inserção de varetas de controle e segurança além de um tubo de instrumentação central em cada elemento combustível, totalizando assim, 21 elementos combustíveis em seu núcleo. Ainda, foram inseridas no elemento combustível central, 20 varetas de veneno queimável no lugar das varetas combustíveis visando especificamente o achatamento no perfil de distribuição de potência no centro do reator no início de vida do combustível nuclear que tende a se tornar ainda mais pronunciado devido ao tamanho reduzido do reator. A altura ativa considerada foi de aproximadamente um metro.

Na Figura 4.5 é mostrado o desenho esquemático transversal do elemento combustível central. A única diferença desse elemento combustível com relação aos outros reside na substituição das varetas de veneno queimável indicadas na figura por varetas combustíveis, conforme abordado anteriormente.

As principais diferenças entre o reator idealizado e um *PWR* ocidental padrão são a altura ativa e a ausência de ácido bórico no refrigerante para o controle de reatividade. Nos reatores *PWR* padrão para produção de energia, a altura ativa é da ordem de três metros e a inserção dos bancos de controle no núcleo do reator é menor, dada uma determinada concentração constante de boro como elemento absorvedor de nêutrons presente no refrigerante e dependente da queima do combustível nuclear, além da reduzida movimentação dos bancos devido à menor necessidade de alterações no nível de potência durante a operação.

Inicialmente, a configuração do núcleo do reator com bancos de controle e segurança e sem qualquer uso de boro diluído no moderador foi focada em cobrir com margem de desligamento suficiente as condições a frio e de barra presa, considerando o excesso de reatividade existente no núcleo. Foram considerados no modelo três bancos de controle (C1, C2 e C3) uniformemente distribuídos no núcleo do reator de forma a garantir uma distribuição de potência mais balanceada durante o ciclo, além de dois bancos de segurança (S1 e S2) localizados na periferia do reator e que encontram-se totalmente retirados do núcleo durante sua operação.

Figura 4.5 – Configuração esquemática transversal do elemento combustível central.

Fonte: autora da dissertação.

Na Figura 4.6 é mostrado um esquema da configuração transversal do núcleo do reator com a indicação das barras que compõem os bancos de controle e segurança, *baffle* e barril.

Na modelagem geométrica transversal do núcleo, foi considerada a malha pino-a-pino na região do combustível (com a menor malha sendo equivalente ao tamanho do *pitch*), e que a depender da distribuição no núcleo representam as

regiões da vareta combustível, da vareta de veneno queimável, da vareta de controle ou segurança, do tubo-guia, do tubo de instrumentação, além do *baffle*, refletor lateral e barril.

Além disso, na modelagem geométrica axial foram considerados os planos que incluem as regiões da vareta combustível, de veneno queimável e também das varetas de controle ou segurança – tanto na região da altura ativa do núcleo como nas regiões do refletor superior –, o refletor superior e o refletor inferior.

As seções de choque das regiões homogeneizadas e colapsadas em energia para o cálculo de difusão foram geradas previamente através de cálculo celular no programa HAMMER-TECHNION [47] desenvolvido em uma parceria entre o *Brookhaven National Laboratory* e o *Savannah River Laboratory*. Esse código resolve a equação de transporte de nêutrons para uma célula unitária em geometria unidimensional utilizando uma biblioteca de seções de choque multigrupo com 30 grupos na faixa de energia térmica e 54 grupos nas faixas de energia epitérmica e rápida.

Finalmente, as simulações foram realizadas em quatro grupos de energia, com o banco C3 totalmente inserido, bancos S1 e S2 totalmente retirados, enquanto os bancos C1 e C2 podiam variar de retirados – posicionados aproximadamente 2 cm dentro do núcleo – a totalmente inseridos – posicionados aproximadamente 95 cm dentro do núcleo – e cobrindo tanto quanto possível as várias situações operacionais durante a queima do combustível. Esses são cenários representativos já que as mudanças que ocorrem ao longo do ciclo de vida do combustível são relacionadas principalmente à introdução de produtos de fissão absorvedores de nêutrons que acarretariam apenas na operação do reator com os bancos de controle mais retirados do núcleo.

Figura 4.6 – Configuração esquemática transversal do núcleo do reator com barras de controle e segurança, *baffle* e barril.

Elemento combustível com veneno queimável

Baffle

Barril

C1, C2 e C3: bancos de controle

S1 e S2: bancos de segurança

4.5 Fator de Pico Nuclear (PF)

Visando a segurança do núcleo de um reator, deve-se garantir que nenhuma limitação térmica seja excedida, de forma a manter a integridade do combustível nuclear. Primeiramente, assegurando que a temperatura da linha central do combustível não exceda o ponto de fusão da pastilha. Essa limitação geralmente é expressa através da restrição à densidade linear de potência que também assegura, do ponto de vista do desempenho do combustível, que a dilatação térmica da pastilha não provoque interação mecânica entre a pastilha e o revestimento. Ainda, outra limitação surge da exigência de que o fluxo de calor na superfície do revestimento combustível sempre permaneça abaixo do limite da partida de ebulição nucleada (*DNB – Departure from Nucleate Boiling*) dado que, nessa situação, há uma mudança do mecanismo de transferência de calor culminando no aumento abrupto da temperatura na superfície do revestimento.

Assim, de forma a atender a esses requisitos, devem ser considerados nos cálculos de projeto do reator, fatores que influenciam na distribuição de potência como a queima não-uniforme do combustível, o acúmulo de produtos de fissão, a inserção dos bancos de controle no núcleo do reator e as variações na densidade do moderador durante a vida do combustível. A partir disso, torna-se suficiente garantir que a vareta combustível mais quente do núcleo permaneça dentro das condições estabelecidas. Associada a essa vareta mais quente tem-se o que é conhecido como Fator de Pico Nuclear e para o qual são efetivamente estabelecidos valores limites durante a operação para assegurar as condições térmicas exigidas para o combustível.

O Fator de Pico Nuclear (PF), também é chamado de Fator de Canal Quente de Fluxo de Calor, sendo definido como a máxima Densidade Linear de Potência (LPD) dividida pela densidade linear média de potência no núcleo do reator. Esse é um dos fatores utilizados para caracterizar a distribuição de potência.

A *LPD* é definida a partir da distribuição da potência ao longo do comprimento axial da vareta combustível. Sendo a potência gerada decorrente da energia liberada nas reações de fissão nuclear e distribuída por uma variedade de produtos de fissão caracterizados por diferentes escalas de tempo de emissão.

Os valores limites de *PF* são maiores com o decréscimo da potência térmica: como a densidade linear média de potência é proporcional à potência, em níveis de potência mais baixos, a razão entre seu valor máximo e médio pode ser maior enquanto que a máxima densidade linear de potência local se mantém em um valor que não viola os limites de projeto do núcleo. Assim, o menor valor limite de *PF* e portanto, o mais restritivo que deve servir de referência, é aquele determinado para a potência máxima do reator. Um reator *PWR* típico possui um *PF* da ordem de 2,6 [48].

Por se tratar de um parâmetro de grande importância para a segurança – principalmente em reatores que operam com bancos de controle muito inseridos no núcleo – nesse valor limite de referência, também deve ser levado em consideração fatores de incerteza associados ao cálculo de *PF*, aos erros nas técnicas de medição e, até mesmo, às variações nas características físicas das pastilhas combustíveis decorrentes do processo de fabricação. Essas premissas costumam acarretar em um valor limite de *PF* ainda mais restritivo.

Na metodologia *SVM* abordada, os fatores de incerteza associados ao cálculo de *PF* a partir da distribuição de potência durante a operação e às técnicas de medição empregadas poderiam ser eliminados pois o *PF* seria estimado a partir da posição dos bancos de controle.

Nesse trabalho, o Fator de Pico Nuclear (*PF*) foi calculado a partir das simulações de difusão como

$$PF = \frac{\max\{LPD\}}{P_t / (M \cdot l)}$$

com

$$LPD = \kappa \cdot A_t \cdot \sum_{g=1}^4 \sigma_{f,g} \cdot \phi_g ,$$

onde P_t é a potência térmica total do reator, M é o número total de varetas combustíveis no núcleo, l é o comprimento ativo de uma vareta combustível, κ é a energia média liberada por fissão e dependente do nuclídeo do combustível, $\sigma_{f,g}$ é a seção de choque macroscópica de fissão do nuclídeo para o grupo de energia g , A_t é a área transversal da região da malha utilizada na modelagem para cálculo de difusão por diferenças finitas e ϕ_g é o fluxo de nêutrons atravessando essa mesma região.

A potência térmica gerada no reator considerado nas simulações foi de aproximadamente 50 MWt e a energia média liberada na fissão do ^{235}U que compõe o combustível nuclear, nesse caso, é em torno de 210 MeV.

5 RESULTADOS E DISCUSSÃO

5.1 Obtenção e análise da base de dados

Inicialmente, com o intuito de tornar o processo de simulação das variadas posições dos bancos de controle do reator mais rápido e eficiente para a aquisição da base de dados, esse procedimento foi automatizado. Além disso, devido à grande quantidade de simulações que deveriam ser realizadas, o processo manual seria completamente inviável. Essa tarefa foi efetuada através da criação de uma rotina em código C++ que modificava as variáveis de posicionamento dos bancos de controle, escrevendo o arquivo de entrada equivalente e executando o programa de difusão CITATION. Em seguida, o código executava o programa de cálculo do Fator de Pico Nuclear (PF), coletando seu valor do arquivo de saída e registrando-o em um arquivo de texto junto às posições correspondentes dos bancos de controle. Essas atividades correspondem às cinco primeiras etapas ilustradas na Figura 5.1.

A base de dados foi adquirida a partir de simulações no CITATION de 2.117 possíveis configurações dos bancos de controle C1 e C2. As Figuras 5.2 e 5.3 mostram o comportamento do PF com a inserção desses bancos de controle no núcleo do reator.

O intervalo observado para o Fator de Pico Nuclear variou de aproximadamente 2 a 3,2 sendo que, os menores valores de PF se apresentam nas periferias das Figuras 5.2 e 5.3, ou seja, nas situações em que:

- I. Ambos os bancos (C1 e C2) estão pouco inseridos no núcleo – menos de 30 cm;
- II. Apenas um dos bancos está pouco inserido – menos de 20 cm – e o outro muito inserido no núcleo – mais de 70 cm; ou

III. Ambos os bancos (C1 ou C2) estão muito inseridos no núcleo – mais de 80 cm.

Porém, no caso II, os valores de PF são maiores quando C1 está pouco inserido e C2 muito inserido, quando comparados à situação inversa, o que demonstra maior capacidade de C1 em causar assimetrias no fluxo de nêutrons devido à sua localização radial mais próxima do centro do núcleo do reator.

Figura 5.1 – Fluxograma do processo de modelagem SVM.

Fonte: autora da dissertação.

O maior potencial de C1 de gerar assimetrias no fluxo de nêutrons também pode ser constatado na Figura 5.2 pelo fato de os maiores valores de PF serem observados em uma faixa mais ampla (entre 15 e 70 cm) de inserção de C1 e com C2 totalmente inserido, do que quando comparado a uma faixa mais estreita (entre 40 e 70 cm) de inserção de C2 e com C1 totalmente inserido.

Figura 5.2 – Comportamento 3D e 2D do Fator de Pico Nuclear (PF) de acordo com a inserção dos bancos C1 e C2 no núcleo do reator.

Fonte: autora da dissertação.

Na Figura 5.3, observa-se que o maior valor para o Fator de Pico Nuclear é encontrado quando C1 e C2 estão posicionados aproximadamente 66 centímetros dentro do núcleo (ao redor de dois terços do comprimento ativo). O comportamento apresentado pode ser facilmente explicado desde que em um reator térmico fracamente acoplado neutronicamente – no qual a relação entre o tamanho do núcleo e o comprimento de migração de nêutrons rápidos é maior, sendo necessárias muitas gerações de nêutrons para propagar distúrbios locais – o efeito líquido gerado pela inserção dos bancos de controle resulta em um fluxo axial de nêutrons

cuja forma originalmente meio-cossenoidal é achatada em direção à parte inferior do reator.

Figura 5.3 – Detalhe 2D e curvas de nível do comportamento do Fator de Pico Nuclear (PF) de acordo com a inserção dos bancos C1 e C2 no núcleo do reator.

Fonte: autora da dissertação.

Como pode ser visto nas Figuras 5.2 e 5.3, o comportamento do Fator de Pico Nuclear é representado por uma superfície suave e, considerando como valor de referência limite para o reator simulado $PF=3$ de forma a garantir a integridade física da vareta combustível, a região que apresenta valores superiores ao PF de referência pode ser observada quando ambos os bancos, C1 e C2, estão inseridos no núcleo entre 50 e 70 centímetros (mais da metade do núcleo ativo). A aproximação dessa região seria, portanto, de maior importância no monitoramento em tempo real do PF .

Cabe destacar, que as Figuras 5.2 e 5.3 fornecem todas as correlações entre as posições possíveis dos bancos C1 e C2 e os valores de PF e, portanto, o método *SVM* para a predição parece irrelevante nesse caso. No entanto, esse

trabalho busca demonstrar a aplicabilidade do método no monitoramento de PF com a acurácia requerida utilizando a base de dados mais representativa possível de se obter através das simulações. Assim, sua aplicação na predição de PF pode ser demonstrada e sua performance estimada para posterior emprego em reatores compactos nos quais não são previamente conhecidos os valores de PF para todas as posições dos bancos de controle, ou seja, sem a necessidade de realizar as simulações de todos os estados do reator para obtenção desse parâmetro.

5.2 Criação e otimização do modelo SVM

Após a obtenção da base de dados do Fator de Pico Nuclear (PF) como função da posição dos bancos C1 e C2 para o reator simulado, iniciou-se à fase de criação do modelo SVM que consistia na separação dos dados de treino/validação e teste, na otimização do modelo utilizando os dados de treino a partir dos parâmetros disponíveis da regressão, culminando na criação do modelo de melhor performance e na análise estatística apropriada observando os resultados de interesse nos conjuntos de dados de treino/validação e teste, separadamente. Essa fase corresponde às últimas seis etapas ilustradas na Figura 5.1.

As posições dos bancos C1 e C2 foram utilizadas como valores de entrada e o Fator de Pico Nuclear como saída (ou objetivo) do modelo SVM obtido através do código R. O código R é uma linguagem e ambiente disponibilizado como software livre para computação estatística similar ao código S desenvolvido no *Bell Laboratories* (antiga *AT&T*, atual *Lucent Technologies*) por John Chambers e sua equipe [49]. No APÊNDICE A são apresentados os comandos utilizados no código R para a separação dos conjuntos de dados, otimização e criação do modelo SVM e sua análise estatística.

Inicialmente, os dados do arquivo de texto foram importados em três colunas (C1, C2 e PF) e divididos em dois conjuntos: um para treino/validação $\{(x_i^{C1}, x_i^{C2}, y_i^{PF})\}_{i=1}^{1589}$ (75%) e outro para teste $\{(x_i^{C1}, x_i^{C2}, y_i^{PF})\}_{i=1}^{528}$ (25%). O

procedimento utilizado para esta divisão foi a criação de uma coluna de *flag* – “1” para dados que seriam utilizados para treino/validação e “0” para os dados de teste) atribuídos através de uma semente aleatória. Então, os dados foram filtrados a partir da coluna de *flag* para os respectivos conjuntos, sendo excluída na sequência.

Em seguida, foram efetuadas as buscas em grade sobre os parâmetros para o conjunto de dados de treino/validação utilizando a função de refinamento (*tune*) como auxiliar da função da máquina de vetores de suporte (*svm*) visando a criação do modelo mais adequado. Essas funções são disponibilizadas através do pacote *e1071* (*Misc Functions of the Department of Statistics, Probability Theory Group*) [50].

A função *svm* possui os modos de classificação ou regressão disponíveis, sendo estes automaticamente escolhidos de acordo com as características do parâmetro *y* de entrada da função. Se a entrada em *y* for um fator, o modo de classificação é escolhido, senão o modo de regressão é acionado. No problema abordado, a entrada em *y* é representada pela coluna de y_i^{PF} que seria estimado por regressão a partir das outras duas colunas x_i^{C1} e x_i^{C2} (generalizadas como as colunas restantes do conjunto de dados a partir do indicativo de código $\sim$). Outras entradas foram definidas como: o tipo da função de núcleo (*kernel*) como radial de base – além desta, a *SVM* disponibiliza as opções linear, polinomial e sigmoidal – e também, sobre quais parâmetros e intervalos a função *tune* atuaria na otimização do modelo.

A função *tune* avalia a performance dos modelos de regressão através do cálculo do Erro Quadrático Médio (*MSE* – *Mean Squared Error*), dado pela Eq. 25, e utiliza como procedimento padrão, durante o treinamento, a validação cruzada em 10 subgrupos sobre esse conjunto de dados, como recomendado para balancear o enviesamento e a variância no modelo. A construção dos subgrupos é realizada através da escolha aleatória dos dados e os subgrupos, uma vez criados, permanecem constantes durante o processo de treino. Assim, esse conjunto de dados

é considerado o conjunto de treino/validação não sendo necessária a criação prévia de um conjunto separado para validação.

$$MSE = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N (\hat{y} - y_i)^2. \quad (25)$$

Em um primeiro momento, foi realizada uma larga busca em grade sobre o conjunto de dados de treino utilizando expoentes de 2 para a constante de regularização, C – definida na Eq. 3 – e para a constante da função radial de base, γ – definida na Eq. 6 – de forma a operar uma ampla varredura nos possíveis valores e combinações desses dois parâmetros da SVM. Em seguida, foram efetuadas subseqüentes buscas nestes mesmos parâmetros, reduzindo o intervalo dos expoentes e o tamanho da grade de busca ao redor dos melhores valores encontrados no resultado anterior. Um total de quatro buscas desse tipo foram executadas com as características mostradas na Tabela 5.1.

Na quarta busca, em um intervalo menor e uma grade mais refinada ao redor dos valores da busca anterior, foi constatado que os melhores valores para os hiperparâmetros C e γ foram encontrados na terceira busca e esses foram mantidos como valores finais.

Tabela 5.1 – Buscas em grade realizadas nas constantes de regularização e da função radial de base sobre o conjunto de dados de treino para otimização do modelo SVM.

# Busca	Constante de Regularização (C)		Constante da Função Radial de Base (γ)	
	Intervalo do Expoente	Passo da Grade	Intervalo do Expoente	Passo da Grade
1	2 a 9	1	-1 a 9	1
2	7 a 9	0,5	1 a 3	0,5
3	7 a 8	0,2	0,5 a 1	0,1
4	7,7 a 7,9	0,01	0,85 a 0,95	0,01

Fonte: autora da dissertação.

Como padrão, se não definido explicitamente, a função *svm* possui o parâmetro da função de perda ε -insensível de Vapnik dada pela Eq. 2 configurado como 0,1. No entanto, após alcançar os melhores valores para os hiperparâmetros C e γ e mantendo-os fixos, foram executadas duas buscas em grade para o parâmetro ε em valores menores com o objetivo de melhorar a acurácia do modelo, de acordo com as propriedades da função de perda. As características das buscas executadas sobre esse parâmetro são expostas na Tabela 5.2.

Na segunda busca, em um intervalo menor e uma grade mais refinada ao redor dos valores da busca anterior, foi constatado que o melhor valor para o hiperparâmetro ε foi encontrado na primeira busca e esse foi mantido como valor final.

Tabela 5.2 – Buscas em grade realizadas na constante da função de perda e sobre o conjunto de dados de treino para otimização do modelo SVM.

# Busca	Constante da Função de Perda (ε)	
	Intervalo	Passo da Grade
1	0 a 0,1	0,01
2	0,005 a 0,02	0,005

Fonte: autora da dissertação.

Finalmente, após o estabelecimento dos valores finais de todos os hiperparâmetros, o modelo SVM que apresentou melhor performance após o processo de otimização foi armazenado e suas características são mostradas na Tabela 5.3. Nessa tabela verifica-se que de um universo de 1.589 vetores de entrada contidos no conjunto de dados de treino, 482 desses foram definidos como vetores de suporte, x_i , representando aproximadamente 30,3%. Sendo a complexidade do modelo determinada pela quantidade de vetores de suporte, pode-se considerar que o modelo otimizado possui complexidade mediana.

Tabela 5.3 – Características do modelo SVM final otimizado sobre o conjunto de dados de treino.

Constante de Regularização (C)	Constante da Função Radial de Base (γ)	Constante da Função de Perda (ε)	# Vetores de Suporte (x_i)
256	2	0,01	482

Fonte: autora da dissertação.

Cabe destacar, que o modelo otimizado obtido com a estratégia adotada para busca em grade – de acordo com o entendimento dos conceitos de cada hiperparâmetro e buscando a redução do tempo e poder computacional necessários no treinamento – apresenta-se, inicialmente, com características e performance adequadas para a aplicação requerida (Seção 5.3) e também similares aos trabalhos anteriormente publicados (Subseção 5.3.4). No entanto, outros modelos de performances similares, ou até mesmo ligeiramente melhores, podem ser obtidos adotando-se uma estratégia distinta, como por exemplo, a varredura dos três hiperparâmetros concomitantemente.

5.3 Análise do modelo SVM otimizado

5.3.1 Análise preliminar

Um passo importante na avaliação da qualidade do modelo é a visualização dos resultados. Assim, para realizar uma primeira análise com relação à capacidade de predição dos dados de treino e teste, foram criadas as Figuras 5.4 e 5.5. Nessas figuras são mostrados os valores efetivamente calculados de *PF* pela simulação de difusão no CITATION e aqueles obtidos através da predição do modelo SVM a partir da posição dos bancos de controle C1 e C2 para os dados de treino e teste, respectivamente.

Com base nessa análise inicial é possível abordar os conceitos de robustez e generalização. A robustez de um modelo estatístico está relacionada à sua

capacidade de predição dos dados considerando as premissas estabelecidas na sua criação. Modelos robustos possuem como atributo a apresentação de predições corretas mesmo que as premissas não sejam completamente atendidas, ou seja, mesmo que haja flutuações ou *outliers* nos dados utilizados no treinamento. Ainda, a generalização pode ser entendida como a habilidade desse mesmo modelo em manter sua capacidade de predição embora sejam empregados dados distintos e que não foram incluídos no processo de treinamento/validação.

As Figuras 5.4 e 5.5 demonstram alta concordância entre os valores simulados e os obtidos através da predição (acurácia) para a grande maioria dos casos tanto para o conjunto de dados de treino como para o conjunto de teste, o que pode ser observado pelos pontos de dados estarem majoritariamente contidos dentro dos círculos correspondentes, com pequenos desvios em alguns casos. Assim, essas figuras apresentam um forte indicativo da robustez do modelo dada a sua alta capacidade de predição das variadas condições do reator fornecidas nos dados de treino e também de generalização, apresentando bom desempenho de predição também no conjunto de dados de teste.

Para complementar a análise visual da qualidade do modelo SVM, também são mostrados na Figura 5.6 os resíduos ponderados de *PF*. Esses resíduos são obtidos a partir da diferença entre o valor da predição do modelo e o valor da simulação do CITATION dividido pelo desvio padrão entre esses valores. Essa análise auxilia na revelação de qualquer padrão sistemático ou tendência não constatada na predição realizada pelo modelo.

Na Figura 5.6, observa-se que a distribuição dos pontos apresenta a característica gaussiana esperada para um modelo de regressão confiável: os valores são simetricamente distribuídos ao redor do zero com aproximadamente 65% deles entre ± 1 , 95% entre ± 2 e 99% entre ± 3 .

Figura 5.4 – Fator de Pico Nuclear (PF) obtido a partir da simulação do CITATION e previsto pelo modelo SVR para o conjunto de dados de treino.

Fonte: autora da dissertação.

Figura 5.5 – Fator de Pico Nuclear (PF) obtido a partir da simulação do CITATION e previsto pelo modelo SVR para o conjunto de dados de teste.

Fonte: autora da dissertação.

Figura 5.6 – Distribuição do resíduo ponderado do Fator de Pico Nuclear (PF) nos conjuntos de dados de treino e teste.

Fonte: autora da dissertação.

5.3.2 Figuras de mérito

As figuras de mérito são quantidades utilizadas para qualificar a performance de um método com relação às suas alternativas e são largamente empregados na comparação e caracterização de métodos analíticos em termos de sua capacidade de predição.

De forma a realizar uma análise mais aprofundada da performance do modelo otimizado, tanto para os dados de treino como para os dados de teste, foram utilizadas algumas figuras de mérito como a Raiz do Erro Quadrático Médio ($RMSE$ – *Root Mean Squared Error*), o Erro Absoluto Médio (MAE – *Mean Absolute Error*), o Erro Relativo Máximo (MRE – *Maximum Relative Error*), e o Índice de Concordância de Willmot (WIA – *Willmot's Index of Agreement*).

5.3.2.1 Raiz do Erro Quadrático Médio (*RMSE*) e Erro Absoluto Médio (*MAE*)

O *RMSE* e o *MAE* são, provavelmente, as métricas mais utilizadas para avaliar a acurácia de modelos preditivos que possuem como função objetivo a predição de variáveis contínuas como é o caso de *PF*. Ambas as medidas expressam o erro médio entre a predição do modelo, $\hat{y}$, e os dados originais, y_i . Essas quantidades podem ser definidas como

$$RMSE[\%] = \sqrt{\frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left(\frac{\hat{y} - y_i}{y_i} \right)^2} \cdot 100, \quad (26)$$

$$MAE[\%] = \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N \left| \frac{\hat{y} - y_i}{y_i} \right| \cdot 100. \quad (27)$$

Nas Eqs. 26 e 27 verifica-se que como no *RMSE* as diferenças são elevadas ao quadrado antes de efetuar a média, desvios maiores possuem maior peso no cálculo fazendo com que seu valor seja mais elevado, ou seja, a presença de predições muito ruins terá maior peso no *RMSE* do que no *MAE*. Assim, uma diferença elevada entre essas métricas auxilia no diagnóstico da performance do modelo.

5.3.2.2 Erro Relativo Máximo (*MRE*)

O *MRE* pode ser definido como

$$MRE[\%] = \max \left\{ \left| \left(\frac{\hat{y} - y_i}{y_i} \right) \right| \right\} \cdot 100. \quad (28)$$

Assim, pode ser observado na Eq. 28, o *MRE* possui uma interpretação mais simples e fornecerá a informação do maior erro encontrado na predição em relação aos dados originais.

5.3.2.3 Índice de Concordância de Willmot (WIA)

O WIA é uma medida padronizada do grau de erro de predição do modelo e pode ser definido como

$$WIA = 1 - \frac{\sum_{i=1}^N (y_i - \hat{y})^2}{\sum_{i=1}^N (|y_i - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i| + |\hat{y} - \frac{1}{N} \sum_{i=1}^N y_i|)^2} \quad (29)$$

A partir da Eq. 29 verifica-se que o WIA pode variar de zero a um. Quando esse índice é igual a um, é uma indicação de que há concordância perfeita entre os valores previstos pelo modelo e os dados originais, enquanto que o índice zero, indica absolutamente nenhuma concordância [51].

5.3.3 Análise das figuras de mérito

De acordo com as definições da Subseção 5.3.2 foram calculadas as figuras de mérito para o modelo SVM criado e os dados são expostos na Tabela 5.4.

Tabela 5.4 – Análise das figuras de mérito do modelo SVM nos conjuntos de dados de treino e teste.

Conjunto de Dados	Raiz do Erro Quadrático Médio (RMSE) [%]	Erro Absoluto Médio (MAE) [%]	Erro Relativo Máximo (MRE) [%]	Índice de Concordância de Willmott (WIA)
Treino	0,16	0,10	1,45	0,999943
Teste	0,17	0,11	1,05	0,999929

Fonte: autora da dissertação.

Para o conjunto de dados de treino observa-se um RMSE de 0,16% e MAE de 0,10% enquanto que o conjunto de teste apresentou um RMSE de 0,17% e

MAE de 0,11%. Em ambos os conjuntos, o *RMSE* e *MAE* possuem valores muito próximos entre si demonstrando a baixa presença de estimativas ruins de *PF* tanto nos dados de treino como de teste. Além disso, os erros apresentados da ordem de 0,1% são muito baixos, demonstrando a alta acurácia de predição prevista na análise preliminar do modelo.

O *MRE* de 1,45% para os dados de treino e 1,05% para os dados de teste podem ser considerados razoavelmente altos. Portanto, com o objetivo de analisar os erros relativos mais elevados foi estudada a distribuição em frequência da Figura 5.7. Nessa figura verifica-se que os erros relativos, para ambos os conjuntos de dados, estão majoritariamente concentrados no intervalo de $\pm 0,1\%$, quase a sua totalidade no intervalo de $\pm 0,2\%$ e, sendo muito baixa a frequência de erros maiores que $\pm 0,5\%$. Assim, o *MRE* não representa um indicador problemático para o modelo.

Na Tabela 5.4 pode ainda ser observado que para o modelo final construído, o conjunto de dados de teste apresentou performance muito similar àquela obtida para o conjunto de dados de treino, confirmando seu poder de generalização na estimativa do Fator de Pico Nuclear para uma variedade de condições do reator, conforme previsto na análise preliminar.

Os valores do *WIA* muito próximos a um, apresentados em ambos os conjuntos de dados, corroboram com o alto grau de acurácia de predição visto nas Figuras 5.4 e 5.5 e demonstram a robustez do modelo *SVM* na predição de *PF* nas mais variadas situações.

Figura 5.7 – Distribuição do erro relativo de estimativa do modelo SVM para o Fator de Pico Nuclear (PF) nos conjuntos de dados de treino e teste.

Fonte: autora da dissertação.

5.3.4 Comparação com estudos anteriores de SVM para predição do Fator de Pico Nuclear (PF)

Conforme abordado no Capítulo 3, poucos artigos foram publicados versando sobre a predição de PF através de SVM, sendo que os dois principais apresentam algumas diferenças metodológicas e de aplicação substanciais quando comparados ao trabalho apresentado nessa dissertação e que merecem destaque, conforme mostrado na Tabela 5.5.

Pode-se citar que o objetivo dos estudos anteriores difere primariamente desse trabalho pois buscavam o aumento da margem operacional em reatores comerciais para geração de energia, reduzindo o conservantismo com relação aos sistemas de monitoramento utilizados atualmente. Embora esse possa ser um ponto válido na utilização da metodologia de predição através da SVR em um SMR isento de boro devido à sua alta acurácia, o foco desse trabalho jaz na manutenção da segurança durante a operação normal, de forma a apresentar uma possível solução para os desafios atuais de aplicação dos métodos disponíveis na indústria no monitoramento de PF nesse tipo de reator.

Tabela 5.5 – Comparação entre os estudos já realizados de monitoramento do Fator de Pico Nuclear (PF) e o estudo presente.

	[10]	[11]	Estudo presente
Tipo de reator	PWR padrão comercial	PWR padrão comercial	SMR livre de boro
Objetivo de aplicação do método	Aumento da margem operacional	Aumento da margem operacional	Solução para monitorar em tempo real, sem os desafios das técnicas atuais
Variáveis de entrada do modelo	23/11	16/11	2
Quantidade de modelos para predição	2 Dependente do sinal do Índice Axial de Forma ASI (-/+)	2 Dependente do sinal do Índice Axial de Forma ASI (-/+)	1
Quantidade de dados de treino	(ASI -) 1.665/2.119 (ASI +) 1.686/2.127	(ASI -) 1.000/1.000 (ASI +) 1.000/1.000	1.589
Quantidade de dados de verificação	-	(ASI -) 12.520/12.520 (ASI +) 12.509/12.509	-
Método de verificação/validação	-	<i>Two-pairs bootstrap</i>	10 subgrupos
Quantidade de dados de teste	(ASI -) 11.100/10.646 (ASI +) 11.090/10.649	(ASI -) 256/256 (ASI +) 256/256	528
Vetores de suporte	Não informado	(ASI -) 350/349 (ASI +) 316/346	482
Vetores de suporte com relação à quantidade de dados de treino [%]	Não informado	(ASI -) 35,0/34,9 (ASI +) 31,6/34,6	30,3

Fonte: autora da dissertação.

Tratando inicialmente do tipo de reator ao qual a SVM foi aplicada, os dois estudos publicados utilizaram dados do mesmo PWR comercial de modelo OPR-1000 (o sul-coreano YGN-3, atualmente chamado de Hanbit-3). Esse projeto de reator difere significativamente em características e condições de operação de um SMR isento de boro influenciando o comportamento de *PF*, principalmente quando considera-se que como a altura ativa de um SMR é muito menor, esse não é afetado pela distribuição e oscilação do produto de fissão xenônio e também, devido à ausência de boro no moderador para controle de reatividade e potência há uma demanda maior de inserção dos bancos de controle no núcleo em relação ao seu tamanho reduzido.

Assim, *PF* nesses dois tipos de reatores apresenta comportamentos distintos o que pode ser constatado até mesmo no fato de que nos estudos anteriores abordados ter sido mandatória a criação de dois modelos distintos de predição a depender do Índice de Forma Axial (*ASI – Axial Shape Index*) para obtenção de maior acurácia, enquanto que no presente trabalho apenas um modelo de predição foi suficiente para descrever as mais variadas condições de distorção do fluxo de nêutrons no SMR devido à inserção dos bancos de controle no núcleo com acurácia muito similar.

Um ponto notável nos estudos anteriores é o uso da base de dados disponível. Grande parte da base de dados foi aplicada para teste sem verificação em [10] e para verificação em [11], com poucos dados para teste do modelo. Essa não é uma prática comum, já que é recomendado que em torno de 75% da base seja utilizada no treinamento/validação e 25% para teste – caso não haja verificação – ou em torno de 60% para treinamento, 15% para verificação e 25% para teste. Os autores não mencionam nenhum tipo de dificuldade relativa à dimensionalidade da base de dados que pode ser inerente ao SVM, no entanto, adotaram a seleção prévia de uma quantidade pequena de dados para treinamento do modelo através da metodologia de clusterização subtrativa que facilita a identificação de dados com características similares.

Conforme mencionado, o presente trabalho não utilizou nenhuma metodologia prévia avançada de seleção dos dados de treino. Como a base de dados representativa disponível era menor, foi adotada apenas a seleção aleatória de um conjunto de 75% dos dados para o treinamento com validação cruzada em 10 subgrupos e os restantes 25% para o conjunto de teste. Assim, a quantidade de dados para treino é equivalente àquela dos estudos anteriores mencionados, no entanto, a quantidade de dados para teste é comparativamente maior que a adotada em [11].

Em [10] não foi adotado nenhum método de verificação/validação sendo a grande maioria dos dados utilizados no processo de teste. Por outro lado em [11], foi adotado o método *2-pairs bootstrap* de verificação com a maioria da base de dados. No presente trabalho, como a base de dados era reduzida, não foi adotada a separação de dados para verificação, apenas a validação cruzada em 10 subgrupos durante o treinamento para a otimização do modelo de predição.

Outro ponto a ser destacado é a obtenção de acurácia similar aquela dos outros modelos apresentados, porém, com a utilização de apenas duas variáveis de entrada no presente estudo em comparação as 11, 16 ou 23 das referências citadas. A SVM possui a capacidade de ignorar dados irrelevantes na construção do modelo não havendo necessidade de estudo das correlações entre as variáveis de entrada e *PF*. Assim como os próprios autores demonstram nas referências, a adição dos dados relativos aos sinais dos sensores *SPND* não mostrou melhora na acurácia do modelo. No caso do reator estudado, a acurácia da mesma ordem de grandeza desses estudos (*RMSE* de aproximadamente 0,1%) certifica que a posição dos bancos de controle C1 e C2 foi suficiente para criar um modelo de representação adequado dos estados do reator para a predição de *PF*.

O modelo criado nesse estudo também possui complexidade mediana e similar à de um dos trabalhos apresentados anteriormente. Através da Tabela 5.5 é possível avaliar a complexidade como a relação entre a quantidade de vetores de suporte e a quantidade de dados utilizados no treinamento do modelo. Assim, o

modelo criado apresenta complexidade da ordem de 30,3% enquanto que em [11] varia de 31,6% a 35%. A quantidade de vetores de suporte do modelo criado não foi fornecida em [10], assim, não é possível avaliar a complexidade do modelo criado nessa referência.

5.3.5 Aplicabilidade do método

No caso do reator simulado, conforme destacado anteriormente, a limitação no valor de PF com o propósito de prevenir danos ao núcleo e garantir a segurança implicariam em restrições de algumas combinações de posições dos bancos de controle durante a operação normal. A fim de atender a esse requisito, a potência máxima de operação do reator ou a complexidade dos sistemas de automação poderiam ser afetados dependendo da incerteza associada à técnica de monitoramento empregada na estimativa de PF . No entanto, como a abordagem de predição do parâmetro através SVR apresentou alto nível de acurácia em um modelo de média complexidade, isso demonstra sua possível aplicabilidade no monitoramento do Fator de Pico Nuclear em reatores compactos modulares livres de boro com todas as vantagens já mencionadas.

Assim, não haveria necessidade de imposição de nenhuma restrição adicional ao funcionamento do reator em questão que seria decorrente do uso de tecnologias de monitoramento disponíveis na indústria, dado que a aplicação do método demonstrado nesse trabalho poderia estimar em tempo real, com alto nível de acurácia, o valor de PF de acordo com o posicionamento configurado dos bancos de controle C1 e C2 no reator compacto estudado.

6 CONCLUSÃO

De acordo com os objetivos determinados, foi desenvolvida e aplicada a metodologia de monitoramento do Fator de Pico Nuclear (*PF*) em reatores compactos utilizando uma abordagem baseada em Aprendizado de Máquina como uma forma alternativa de superar os desafios relacionados às técnicas atuais de monitoramento disponíveis na indústria nuclear quando aplicadas a esse tipo de reator. Esses desafios incluem a precisão e tempo de resposta dos detetores *in-core* e seus sistemas auxiliares, bem como a dificuldade de distinção do fluxo neutrônico das partes superior e inferior do núcleo ativo pelos detetores *ex-core* e, portanto, da correta definição da distribuição de potência, devido às proporções comparáveis desses detetores com as dimensões do núcleo de um reator compacto.

A partir da revisão bibliográfica, foi definido que a técnica de Aprendizado de Máquina utilizada seria a *SVM* devido aos seus atributos e alto desempenho demonstrados em aplicações recentes na área nuclear, e mais notadamente na predição de *PF*. Portanto, foram desenvolvidos o embasamento teórico que abrange a aplicação dessa ferramenta e a discussão dos conceitos relevantes associados que devem ser observados na criação de um modelo de predição.

O reator compacto selecionado para estudo por apresentar características e requisitos peculiares de monitoramento de *PF* foi um reator livre de boro no moderador e controlado apenas por bancos de controle. Após aprofundada a temática de métodos de solução da equação de transporte de nêutrons e suas aproximações – mais precisamente sobre a teoria de difusão multigrupos – esse reator foi simulado no código de difusão *CITATION* escolhido devido à sua rapidez de execução dos cálculos, necessária à obtenção de uma ampla base de dados

representativa dos estados do reator. Para o código CITATION também foi avaliada a metodologia de cálculo envolvida na obtenção de *PF*.

Então, a base de dados obtida foi analisada visualmente verificando-se o comportamento de *PF* com a posição dos bancos de controle e suas explicações associadas ao comportamento do fluxo neutrônico e da distribuição de potência em um reator compacto isento de boro.

Com a percepção da composição da base, os conjuntos de dados de treino e teste foram separados aleatoriamente de acordo com as melhores práticas e o modelo foi otimizado no código R utilizando os dados de treino. Nesse contexto, foram observadas a metodologia e recomendações associadas ao estabelecimento dos parâmetros da regressão *SVM*.

Após análise gráfica e das figuras de mérito selecionadas para avaliação dos dados de treino e teste, o modelo de média complexidade – com 482 vetores de suporte – demonstrou grande robustez com desempenho muito similar em ambos os conjuntos de dados. Como resultados de acurácia a serem destacados estão o *RMSE* inferior a 0,2%, o *MAE* da ordem de 0,1% e o *MRE* menor que 1,5%, com alta concordância entre os valores da predição e os dados originais de *PF* corroborada pelos *WIA* que se aproximaram da unidade.

Resguardada as diferenças de aplicação e metodológicas de estudos anteriores, o modelo de predição de *PF* apresentado nesse trabalho mostrou alta acurácia e média complexidade comparáveis aos trabalhos já publicados, com a possibilidade de predição através de apenas um modelo para todos os estados estudados do reator.

Portanto, foi demonstrada a possível aplicabilidade da técnica no monitoramento em tempo real de *PF* em reatores compactos com requisitos de maior movimentação e inserção de bancos de controle no núcleo, como é o caso de reatores isentos de boro. Os resultados desse trabalho foram anteriormente publicados em [52].

Como possíveis trabalhos futuros a serem desenvolvidos estão: a avaliação da técnica de monitoramento *SVM* com dados obtidos a partir de um reator compacto em operação; a criação de novos modelos *SVM* utilizando mais variáveis de entrada para observação de aumento da acurácia, como por exemplo, o fluxo neutrônico na posição dos detetores internos ao núcleo; a análise das limitações do método relacionadas a uma base de dados de maior dimensionalidade; o estudo do comportamento de modelos que contemplem uma base de dados com mais estados distintos do reator; o exame da generalização da técnica para reatores compactos com características distintas de projeto e operação, além da comparação das aplicações das *SVMs* com as *Cascaded Fuzzy ANNs* no monitoramento do Fator de Pico Nuclear.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] GOFUKU, AKIO. Integrated diagnostic technique for nuclear power plants. *Nuclear Engineering and Technology*, v. 46, n. 6, p. 725-736, 2014.
- [2] ZENG, YUYUN; LIU, JINGQUAN; SUN, KAICHAO; HU, LIN-WEN. Machine learning based system performance prediction model for reactor control. *Annals of Nuclear Energy*, v. 113, p. 270-278, 2018.
- [3] LIU, JIE; SERAOUI, REDOUANE; VITELLI, VALERIA; ZIO, ENRICO. Nuclear power plant components condition monitoring by probabilistic support vector machine. *Annals of Nuclear Energy*, v. 56, p. 23-33, 2013.
- [4] KIM, HYEONMIN; NA, MAN GYUN; HEO, GYUNYOUNG. Application of monitoring, diagnosis, and prognosis in thermal performance analysis for nuclear power plants. *Nuclear Engineering and Technology*, v. 46, n. 6, p. 737-752, 2014.
- [5] ELETROBRÁS TERMONUCLEAR SA. Final Safety Report Analysis-FSAR. Central Nuclear Almirante Álvaro Alberto-Unit 2. Rev. 13, 2013.
- [6] SOUZA, ROSE MARY GOMES DO PRADO. *Determinação do fator de pico de potência utilizando barras de controle, detectores ex-core e redes neurais*. 2005. 146 p. Tese (Doutorado em Tecnologia Nuclear) Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo.
- [7] INTERNATIONAL ATOMIC ENERGY AGENCY. *Innovative small and medium sized reactors: Design features, safety approaches and R&D trends*. Vienna: IAEA, 2005. (IAEA-TECDOC-1451).

- [8] ADVANCED REACTORS INFORMATION SYSTEM. ARIS. Disponível em: <<https://aris.iaea.org/sites/SMR.html>>. Acesso em: 7 jan. 2020.
- [9] TODT, WILLIAM H.. Characteristics of self-powered neutron detectors used in power reactors. Horseheads, New York: Imaging and Sensing Technology Corporation, 1996. Disponível em <<https://www.oecd-neo.org/science/rsd/ic96/4-2.pdf>>. Acesso em: 20 abr. 2020.
- [10] BAE, IN HO; NA, MAN GYUN; LEE, YOON JOON; PARK, GOON CHERL. Calculation of the power peaking factor in a nuclear reactor using support vector regression models. *Annals of Nuclear Energy*, v. 35, p. 2200-2205, 2008.
- [11] BAE, IN HO; NA, MAN GYUN; LEE, YOON JOON; PARK, GOON CHERL. Estimation of the Power Peaking Factor in a nuclear reactor using support vector machines and uncertainty analysis. *Nuclear Engineering and Technology*, 2009. Special Issue on the 7th International Topical Meeting on Nuclear Reactor Thermal Hydraulics, Operation, and Safety. p. 1181-1190.
- [12] WU, WEI; LI, AI-DI; HE, XIN-HU; MA, RAN; LIU, HONG-BIN; LV, JIA-KE. A comparison of support vector machines, artificial neural network and classification tree for identifying soil texture classes in southwest China. *Computers and Electronics in Agriculture*, v. 144, p. 86-93, 2018.
- [13] BHASKAR, NITIN AJI. Performance analysis of support vector machine and neural networks in detection of myocardial infarction. *Procedia Computer Science*, v. 46, p. 20-30, 2015.
- [14] ROMERO, ENRIQUE; TOPPO, DANIEL. Comparing support vector machines and feedforward neural networks with similar hidden-layer weights. *IEEE Transactions on Neural Networks*, v. 18, n. 3, p. 959-963, 2007.

- [15] LI, HAN; SUN, FENGZHU. Comparative studies of alignment, alignment-free and SVM based approaches for predicting the hosts of viruses based on viral sequences. *Scientific Reports (Nature)*, v. 8 (10032), p. 1-9, 2018.
- [16] GIZAW, SEYOUM MEGANA; GAN, THIAN YEW. Regional flood frequency analysis using support vector regression under historical and future climate. *Journal of Hydrology*, v. 538, p. 387-398, 2016.
- [17] CAI, JIEJIN. Applying support vector machine to predict the critical heat flux in concentric-tube open thermosiphon. *Annals of Nuclear Energy*, v. 43, p. 114-122, 2012.
- [18] TRONTL, KREŠIMIR; ŠMUC, TOMISLAV; PEVEC, DUBRAVKO. Support vector regression model for the estimation of γ -ray buildup factors for multi-layer shields. *Annals of Nuclear Energy*, v. 34, p. 939-952, 2007.
- [19] JUNCAI, XU; QUINGWEN, REN; ZHENZHONG, SHEN. Prediction of the strength of concrete radiation shielding based on LS-SVM. *Annals of Nuclear Energy*, v. 85, p. 296-300, 2015.
- [20] JIANG, BO TAO; REN, JIN SHEN; HU, PING; ZHAO, FU YU. Prediction of critical heat flux for water flow in vertical round tubes using support vector regression model. *Progress in Nuclear Energy*, v. 68, p. 210-222, 2013.
- [21] YOO, KWAE HWAN; BACK, JU HYUN; NA, MAN GYUN; KIM, JAE HWANJ; HUR, SEOP; KIM, CHANG HWOI. Prediction of golden time using SVR for recovering SIS under severe accidents. *Annals of Nuclear Energy*, v. 94, p. 102-108, 2016.
- [22] KIM, SEUNG GEUN; NO, YOUNG GYU; SEONG, POONG HYUN. Prediction of severe accident occurrence time using support vector machines. *Nuclear Engineering and Technology*, v. 47, p. 74-84, 2015.

- [23] WOO, SEUNG MIN; KIM, HYEONMIN; CHIRAYATH, SUNIL. Influence of the spatial Pu variation for evaluating the Pu content in spent nuclear fuel using support vector regression. *Annals of Nuclear Energy*, v. 135, p. 1-7, 2020.
- [24] GOMEZ-FERNANDEZ, MARIO; HIGLEY, KATHRYN; TOKUHIRO, AKIRA; WELTER, KENT; WONG, WENG-KEEN, WONG; YANG, HAORI. Status of research and development of learning-based approaches in nuclear science and engineering: a review. *Nuclear Engineering and Design*, v. 359 (110479), p. 1-13, 2020.
- [25] DE OLIVEIRA, MAURO VITOR; DE ALMEIDA, JOSÉ CARLOS SOARES. Application of artificial intelligence techniques in modeling and control of a nuclear power plant pressurizer system. *Progress in Nuclear Energy*, v. 63, p. 71-85, 2013.
- [26] AN, YE JI; YOO, KWAE HWAN; NA, MAN GYUN; KIM, YEON-SIK. Critical flow prediction using simplified cascade fuzzy neural networks. *Annals of Nuclear Energy*, v. 136 (107047), p. 1-11, 2020.
- [27] ZIO, ENRICO; APOSTOLAKIS, GEORGE E.; PEDRONI, NICOLA. Quantitative functional failure analysis of a thermal–hydraulic passive system by means of bootstrapped artificial neural networks. *Annals of Nuclear Energy*, v. 37, p. 639-649, 2010.
- [28] DOMINGOS, ROBERTO PINHEIRO; CALDAS, GUSTAVO HENRIQUE FLORES; ABREU, CLÁUDIO MÁRCIO DO NASCIMENTO; SCHIRRU, ROBERTO. PWR's xenon oscillation control through a fuzzy expert system automatically designed by means of genetic programming. *Applied Soft Computing*, v. 3 (4), p. 317-323, 2003.

- [29] SOUZA, ROSE MARY GOMES DO PRADO; MOREIRA, JOÃO MANOEL LOSADA. Power peak factor for protection systems – experimental data for developing a correlation. *Annals of Nuclear Energy*, v. 33, p. 609-621, 2006.
- [30] SOUZA, ROSE MARY GOMES DO PRADO; MOREIRA, JOÃO MANOEL LOSADA. Neural network correlation for power peak factor estimation. *Annals of Nuclear Energy*, v. 33, p. 594–608, 2006.
- [31] MONTES, JOSÉ LUIS; FRAÇOIS, JUAN LUIS; ORTIZ, JUAN JOSÉ; DEL CAMPO, CECILIA MARTÍN; PERUSQUÍA, RAÚL. Local power peaking factor estimation in nuclear fuel by artificial neural networks. *Annals of Nuclear Energy*, v. 36, p. 121-130, 2009.
- [32] PIROUZMAND, AHMAD; DEHDASHTI, MORTEZA KAZEM. Estimation of relative power distribution and power peaking factor in a VVER-1000 reactor core using artificial neural networks. *Progress in Nuclear Energy*, v. 85, p. 17-27, 2015.
- [33] PEREIRA FILHO, LEONIDAS; SOUTO, KELLING CABRAL; MACHADO, MARCELO DORNELLAS. Using neural networks for prediction of nuclear parameters. In: INTERNATIONAL NUCLEAR ATLANTIC CONFERENCE, 6th, November 24-29, 2013, Recife, PE, Brazil. *Proceedings of INAC 2013*. Rio de Janeiro, RJ: Associação Brasileira de Energia Nuclear, 2013. ISBN: 978-85-99141-05-2.
- [34] NA, MAN GYUN; JUNG, DONG WON; SHIN, SUN HO; LEE, KIBOG; LEE, YOON JOON. Estimation of the nuclear power peaking factor using in-core sensor signals. *Journal of the Korean Nuclear Society*, v. 36, p. 420-429, 2004.
- [35] BACK, JU HYUN; YOO, KWAE HWAN; CHOI, GEON PIL; NA, MAN GYUN; KIM, DONG YEONG. Prediction and uncertainty analysis of power

peaking factor by cascaded fuzzy neural networks. *Annals of Nuclear Energy*, v. 110, p. 989–994, 2017.

[36] KUBAT, MIROSLAV. *An introduction to machine learning*. Cham, Switzerland: Springer, 2017.

[37] VAPNIK, VLADIMIR NAUMOVICH. *Statistical learning theory*. New York, USA: John Wiley & Sons, 1998.

[38] VERT, JEAN-PHILIPPE; TSUDA, KOJI; SCHÖLKOPF, BERNHARD. A primer on kernel methods. USA: Max-Planck-Gesellschaft, 2004. Disponível em <http://is.tuebingen.mpg.de/fileadmin/user_upload/files/publications/pdf2549.pdf>. Acesso em: 21 abr. 2021.

[39] NAGANNA, SUJAY RAGHAVENDRA; DEKA, PARESH. Support vector machine applications in the field of hydrology: a review. *Applied Soft Computing*, v. 19, p. 372-386, 2014.

[40] MEYER, DAVID. Support Vector Machines, the interface to libsvm in package e1071. Austria: Technische Universität Wien, 2019. Disponível em <<https://cran.r-project.org/web/packages/e1071/vignettes/svmdoc.pdf>>. Acesso em: 6 out. 2020.

[41] YUANYUAN, SUN; YONGMING, WANG; LILI, GUO; ZHONGSONG, MA; SHAN, JIN. The comparison of optimizing SVM by GA and grid search. In: IEEE INTERNATIONAL CONFERENCE ON ELECTRONIC MEASUREMENT & INSTRUMENTS (ICEMI), 13th, October 20-22, 2017, Yangzhou, China. *Proceedings of 2017 13th IEEE International Conference on Electronic Measurement & Instruments (ICEMI)*. Institute of Electrical and Electronic Engineers-IEEE. ISBN: 978-1-5090-5035-2.

- [42] SYARIF, IWAN; PRUGEL-BENNETT, ADAM; WILLS, GARY. SVM parameter optimization using grid search and genetic algorithm to improve classification performance. *Telkomnika*, v. 14 (4), p. 1502-1509, 2016.
- [43] HASTIE, TREVOR; TIBSHIRANI, ROBERT; FRIEDMAN, JEROME. *The elements of statistical learning*. New York, USA: Springer Science+Business Media, 2017.
- [44] KUHN, MAX; JOHNSON, KJELL. *Applied predictive modelling*. New York, USA: Springer, 2018.
- [45] GEORGE IRVING, BELL; GLASSTONE, SAMUEL. *Nuclear reactor theory*. New York, USA: Van Nostrand Reinhold Company, 1970.
- [46] FOWLER, TOM BILL; VONDY, DAVID R.; CUNNINGHAM, G. W.. Nuclear reactor core analysis code CITATION, ORNL-TM-2496, Rev. 2, 1971.
- [47] SUICH, J. E.; HONECK, H. C.. The HAMMER system: heterogeneous analysis by multigroup methods of exponentials and reactors. Jackson, USA: Savannah River Laboratory, 1967. Disponível em <<https://doi.org/10.2172/4440604>>. Acesso em: 06 abr. 2021.
- [48] JOHNSON DUDERSTADT, JAMES; HAMILTON J., LOUIS. *Nuclear reactor analysis*. New Jersey, USA: John Wiley & Sons, 1976.
- [49] R CORE TEAM. R: a language and environment for statistical computing. Vienna, Austria: R Foundation for Statistical Computing, 2013. Disponível em <<http://www.R-project.org>>. Acesso em: 6 oct. 2020.
- [50] MEYER, DAVID; DIMITRIADOU, EVGENIA; HORNIK, KURT; WEINGESSEL, ANDREAS; LEISCH, FRIEDRICH; CHANG, CHIH-CHUNG; LI, CHIH-CHEN. Misc functions of the department of statistics, probability theory

group (formerly: E1071). Vienna, Austria: Technische Universität Wien, 2021. Disponível em <<https://cran.r-project.org/web/packages/e1071/e1071.pdf>>. Acesso em: 30 mar. 2021.

[51] PEREIRA, HELOISA RAMOS; MESCHIATTI, MONICA CRISTINA; PIRES, REGINA CÉLIA DE MATOS; BLAIN, GABRIEL CONSTANTINO. On the performance of three indices of agreement: an easy-to-use R-code for calculating the Willmott indices. *Bragantia*, v. 77 (2), p. 394-403, 2018.

[52] SANCHEZ, PRISCILA PALMA; DOS SANTOS, ADIMIR. Prediction of the power peaking factor in a boron-free small modular reactor based on a support vector regression model and control rod bank positions. *Nuclear Science and Engineering*, v. 195, p. 555-562, 2021.

APÊNDICE A – Comandos em R

```
#SVM library
```

```
library(e1071)
```

```
#Reading data file
```

```
Data = read.table("Data.txt")
```

```
#Naming and getting variables from columns
```

```
names(Data)=c("C1","C2","PF")
```

```
#Random seed
```

```
set.seed(42)
```

```
#Splitting into training and test sets
```

```
Data[, "train"] <- ifelse(runif(nrow(Data))<0.75,1,0)
```

```
#Separating training and testing sets
```

```
training <- Data[Data$train==1,]
```

```
testing <- Data[Data$train==0,]
```

```
#Getting column index of training flag
```

```
trainColNum <- grep("train",names(training))
```

```
#Removing training flag column from training and testing sets
```

```
training <- training[,-trainColNum] #ultima coluna
```

```
testing <- testing[,-trainColNum]
```

```
#Optimizing gamma and cost - 1st try
```

```
#svm_tune <- tune(svm, PF ~ ., data = training, kernel="radial", ranges =  
list(gamma = 2^((-1:9)), cost = 2^(2:9)))
```

```
#Optimizing gamma and cost - 2nd try
```

```
#svm_tune <- tune(svm, PF ~ ., data = training, kernel="radial", ranges =  
list(gamma = 2^(seq(1,3,0.5)), cost = 2^(seq(7,9,0.5))))
```

```
#Optimizing gamma and cost - 3rd try
```

```
#svm_tune <- tune(svm, PF ~ ., data = training, kernel="radial", ranges =  
list(gamma = 2^(seq(0.5,1,0.1)), cost = 2^(seq(7,8,0.2))))
```

```
#Optimizing gamma and cost - 4th try
```

```
#svm_tune <- tune(svm, PF ~ ., data = training, kernel="radial", ranges =  
list(gamma = 2^(seq(0.85,0.95,0.01)), cost = 2^(seq(7.7,7.9,0.01))))
```

```
#Best results: gama=2, cost=256
```

```
#Optimizing epsilon - 1st try
```

```
#svm_tune <- tune(svm, PF ~ ., data = training, kernel="radial", ranges =  
list(gamma = 2, epsilon = seq(0,0.1,0.01), cost = 256))
```

```
#Optimizing epsilon - 2st try

#svm_tune <- tune(svm, PF ~ ., data = training, kernel="radial", ranges =
list(gamma = 2, epsilon = seq(0.005,0.02,0.005), cost = 256))

#Best results: gama=2, cost=256, epsilon=0.01

#Optimizing epsilon - 1st try - the best
svm_tune <- tune(svm, PF ~ ., data = training, kernel="radial", ranges = list(gamma
= 2, epsilon = seq(0,0.1,0.01), cost = 256))

print(svm_tune)

#The best model
best_mod <- svm_tune$best.model

#The best model - testing data
best_mod_pred <- predict(best_mod, testing)

#The best model - training data
pred <- predict(best_mod, training)

#best_mod$coefs
#best_mod$rho
#best_mod$SV
```



```
#Plotting simulated and predicted - training
```

```
plot(pred, col = "darkolivegreen3", pch=1, ylab="Power Peaking Factor",  
xlab="Data Points", cex=1, lwd=1)
```

```
points(training$PF, col = "coral1", pch=16, ylab="Power Peaking Factor",  
xlab="Data Points", cex=0.6)
```

```
legend('topleft', legend=c("Simulated", "Predicted"), col=c("coral1",  
"darkolivegreen3"), pch=c(16,1), inset = c(0.02, 0.02))
```

```
#Plotting simulated and predicted - testing
```

```
plot(best_mod_pred, col = "darkolivegreen3", pch=1, ylab="Power Peaking  
Factor", xlab="Data Points", cex=1, lwd=1)
```

```
points(testing$PF, col = "cornflowerblue", pch=16, ylab="Power Peaking Factor",  
xlab="Data Points", cex=0.6)
```

```
legend('topleft', legend=c("Simulated", "Predicted"), col=c("cornflowerblue",  
"darkolivegreen3"), pch=c(16,1), inset = c(0.02, 0.02))
```

```
#RMSE percentage
```

```
rmse_pred_test <- sqrt(mean((best_mod_pred-testing$PF)^2))
```

```
rmse_pred_train <- sqrt(mean((best_mod$residuals)^2))
```

```
#RMSE percentage
```

```
sqrt(mean(((best_mod_pred-testing$PF)/testing$PF)^2))*100
```

```
sqrt(mean(((best_mod$residuals)/training$PF)^2))*100
```

```
#Mean Absolute Error
```

```
mean(abs((best_mod_pred-testing$PF)/testing$PF))*100
```

```
mean(abs((best_mod$residuals)/training$PF))*100
```

```
#Maximum Relative Error
```

```
max(abs((best_mod_pred-testing$PF)/testing$PF))*100
```

```
max(abs((best_mod$residuals)/training$PF))*100
```

```
#WIA
```

```
1-sum((best_mod_pred-testing$PF)^2)/sum((abs(best_mod_pred-mean(testing$PF))  
+abs(testing$PF-mean(testing$PF)))^2)
```

```
1-sum((best_mod$residuals)^2)/sum((abs(pred-mean(training$PF))  
+abs(training$PF-mean(training$PF)))^2)
```

```
#Residue
```

```
train_res = pred-training$PF
```

```
test_res = best_mod_pred-testing$PF
```

```
#Plotting Residue
```

```
plot(train_res, col = "coral1", pch=15, ylab="Peaking Factor Residue", xlab="Data  
Points")
```

```
points(test_res, col = "cornflowerblue", pch=15, ylab="Peaking Factor Residue",  
xlab="Data Points")
```

```
legend('topleft',legend=c("Training", "Testing"), col=c("coral1", "cornflowerblue"),  
pch=c(16,16), inset = c(0.02, 0.02), cex=1)
```

```
#Standard error
```

```
std_pred_test <- sqrt(mean((best_mod_pred-testing$PF)^2))
```

```
std_pred_train <-sqrt(mean((pred-training$PF)^2))
```

```
#Weighted Residue
```

```
train_res_pond = (pred-training$PF)/std_pred_train
```

```
test_res_pond = (best_mod_pred-testing$PF)/std_pred_test
```

```
#Plotting Weighted Residue
```

```
plot(train_res_pond, col = "coral1", pch=15, yaxt='n', ylab="Peaking Factor  
Weighted Residue", xlab="Data Points")
```

```
points(test_res_pond, col = "cornflowerblue", pch=15, yaxt='n', ylab="Peaking  
Factor Weighted Residue", xlab="Data Points")
```

```
axis(2,at=c(-3, -2, 0, 2, 3))
```

```
abline(h=c(-3,-2,0, 2, 3), col="black")
```

```
legend('topleft',legend=c("Training", "Testing"), col=c("coral1", "cornflowerblue"),  
pch=c(15,15), inset = c(0.02, 0.02), cex=1)
```

```
#Plotting Relative Error
```

```
hist((best_mod$residuals/training$PF)*100, main="", xlab="Relative Error [%]",  
col="coral1", xlim=c(-1,1), ylim=c(0,700), breaks=20)
```

```
hist(((best_mod_pred-testing$PF)/testing$PF)*100, main="", xlab="Relative Error  
[%]", col="cornflowerblue", xlim=c(-1,1), ylim=c(0,700), breaks=20, add=T)
```

```
legend('topleft',legend=c("Training", "Testing"), col=c("coral1", "cornflowerblue"),  
pch=c(15,15), inset = c(0.02, 0.02), cex=1)
```

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES
Diretoria de Pesquisa, Desenvolvimento e Ensino
Av. Prof. Lineu Prestes, 2242 – Cidade Universitária CEP: 05508-000
Fone/Fax(0XX11) 3133-8908
SÃO PAULO – São Paulo – Brasil
<http://www.ipen.br>

O IPEN é uma Autarquia vinculada à Secretaria de Desenvolvimento, associada à Universidade de São Paulo e gerida técnica e administrativamente pela Comissão Nacional de Energia Nuclear, órgão do Ministério da Ciência, Tecnologia, Inovações e Comunicações.