# ANÁLISE DE SOLUÇÕES NUMÉRICAS PARA AS EQUAÇÕES DE BATEMAN

Guilherme G. Loch<sup>1</sup>, Goro Hiromoto<sup>2</sup>, Orlando Rodrigues Jr<sup>2</sup> e Joyce S. Bevilacqua<sup>1</sup>

<sup>1</sup> Instituto de Matemática e Estatística da Universidade de São Paulo (IME-USP)

Departamento de Matemática Aplicada

Rua do Matão, nº 1010 - Butantã

05508-090 São Paulo, SP

guiloch@ime.usp.br

joyce@ime.usp.br

<sup>2</sup> Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN-CNEN/SP) Av. Professor Lineu Prestes, n° 2242 - Butantã 05508-000 São Paulo, SP rodrijr@ipen.br hiromoto@ipen.br

#### **ABSTRACT**

The implementation of stable and efficient numerical methods for solving problems involving nuclear transmutation and radioactive decay chains is the main scope of this work. The physical processes associated with irradiations of samples in particle accelerators, or the burning spent nuclear fuel in reactors, or simply the natural decay chains, can be represented by a set of first order ordinary differential equations with constant coefficients, for instance, the decay radioactive constants of each nuclide in the chain. Bateman proposed an analytical solution for a particular case of a linear chain with *n* nuclides decaying in series and with different decay constants. For more complex and realistic applications, the construction of analytical solutions is not viable and the introduction of numerical techniques is imperative. However, depending on the magnitudes of the decay radioactive constants, the matrix of coefficients could be almost singular, generating unstable and non-convergent numerical solutions. In this work, different numerical strategies for solving systems of differential equations were implemented, the Runge-Kutta 4-4, Adams Predictor-Corretor (PC2) and the Rosenbrock algorithm, this last one more specific for stiff equations. Consistency, convergence and stability of the numerical solutions are studied and the performance of the methods is analyzed for the case of the natural decay chain of Uranium-235 comparing numerical with analytical solutions.

# 1. INTRODUÇÃO

Os processos físicos envolvendo a transmutação de radionuclídeos durante a irradiação de amostras em aceleradores de partículas, na queima de elementos combustíveis em reatores nucleares, ou nas séries de decaimento natural, podem ser representados por modelos matemáticos que descrevem a cadeia de decaimentos radioativos e transformações nucleares. Mesmo considerando que para algumas cadeias, como por exemplo, as lineares, é possível determinar a solução analítica, soluções numéricas possibilitam, com maior facilidade, adaptações em ajustes de dados ou modelagem. O desafio é fornecer resultados numéricos para esse tipo de problema que é, em geral, quase singular.

Portanto, este trabalho tem como escopo a implementação e a avaliação de métodos numéricos para a solução dessa classe de problemas, envolvendo o decaimento e a transmutação nuclear. Os testes serão executados utilizando precisão pré-fixada e

considerando uma parte da série de decaimento natural do Urânio-235, composta pelos sete primeiros elementos da série, conforme apresentado na Fig. 1.

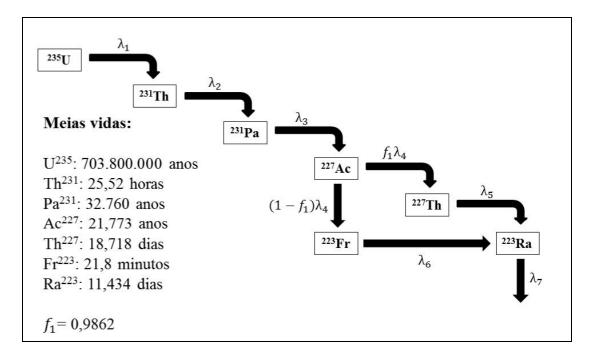


Figura 1. Série de Decaimento Natural do Urânio-235 [1].

O trabalho apresenta, na seção 2, a modelagem matemática, a solução analítica e os métodos numéricos implementados. Na seção 3, são exibidos os resultados das soluções numéricas e a comparação com a solução analítica, permitindo assim a avaliação do erro absoluto das soluções aproximadas. Na seção 4, conclusão e trabalhos futuros.

# 2. MODELAGEM MATEMÁTICA E MÉTODOS NUMÉRICOS

A modelagem matemática do problema do decaimento radioativo é dada pelas equações de Bateman, um sistema de Equações Diferenciais Ordinárias (EDO's) de primeira ordem com coeficientes constantes, que representam as constantes de decaimento radioativo de cada nuclídeo presente na cadeia [2]. As constantes de decaimento  $\lambda_i$ , i=1,...,7, são calculadas em função das meias vidas  $(T_{1/2})$  apresentadas na Fig. 1 da seguinte forma:

$$\lambda_i = \ln(2) / T_{1/2}^i \tag{1}$$

Considerando a grande variação das meias vidas dos elementos envolvidos nessa cadeia, que variam de 21,8 minutos até 703.800.000 anos, definiu-se o dia como unidade padrão.

O sistema de equações diferenciais de primeira ordem é:

$$\mathbf{X'}(\mathbf{t}) = A \cdot \mathbf{X}(\mathbf{t}) \qquad , \tag{2}$$

onde as componentes do vetor  $\mathbf{X}(\mathbf{t})$  representam os radionuclídeos e a matriz A é dada por:

$$A = \begin{bmatrix} -\lambda_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ \lambda_1 & -\lambda_2 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \lambda_2 & -\lambda_3 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \lambda_3 & -\lambda_4 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & f_1 \lambda_4 & -\lambda_5 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & (1-f_1)\lambda_4 & 0 & -\lambda_6 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \lambda_5 & \lambda_6 & -\lambda_7 \end{bmatrix}$$

$$(3)$$

A Tabela 1 identifica cada radionuclídeo e mostra os valores correspondentes às constantes de decaimento.

Tabela 1. Constantes de Decaimento do Problema Proposto [1]

Elemento	Variável $x_i$	Constante de Decaimento $\lambda_i$ (dia <sup>-1</sup> )		
<sup>235</sup> U	$x_1$	0,00000000000270		
<sup>231</sup> Th	$x_2$	0,65186255225073		
<sup>231</sup> Pa	$x_3$	0,00000005796805		
<sup>227</sup> Ac	$x_4$	0,00008721964687		
<sup>227</sup> Th	$x_5$	0,03703104928731		
<sup>223</sup> Fr	$x_6$	45,78586880762941		
<sup>223</sup> Ra	$x_7$	0,06062158304705		

A solução analítica e as aproximações numéricas foram construídas considerando que no instante inicial existe somente uma unidade de <sup>235</sup>U e que o inventário dos demais elementos da série é nulo.

#### 2.1. Solução Analítica

Bateman propôs uma solução analítica para o caso de um sistema linear, no qual cada elemento da série decai para outro único elemento [3]. Para cadeias onde existe a probabilidade de decaimentos múltiplos ainda é possível utilizar a solução de Bateman

realizando o desdobramento e acompanhando cada decaimento. Desta forma, dividiu-se a série do Urânio-235 em duas cadeias lineares, uma contendo o  $^{227}$ Th e outra contendo o  $^{223}$ Fr, para obter-se a solução analítica da série completa. Considerando uma cadeia linear com n elementos  $x_1(t)$ ,  $x_2(t)$ , ...,  $x_n(t)$ , cujas constantes de decaimento são, respectivamente,  $\lambda_1$ ,  $\lambda_2$ , ...,  $\lambda_n$ , e assumindo-se que no instante inicial t=0 existe apenas uma quantidade  $x_1(0)=x_1^0$  do primeiro elemento, a solução proposta por Bateman é da forma:

$$x_1(t) = x_1^0 e^{-\lambda_1 t} (4.1)$$

$$x_{2}(t) = x_{1}^{0} \lambda_{1} \left[ \frac{e^{-\lambda_{1}t}}{(\lambda_{2} - \lambda_{1})} + \frac{e^{-\lambda_{2}t}}{(\lambda_{1} - \lambda_{2})} \right]$$

$$(4.1)$$

$$x_{n}(t) = x_{1}^{0} \prod_{k=1}^{n-1} \lambda_{k} \sum_{j=1}^{n} \left( \frac{e^{-\lambda_{j}t}}{\prod_{p=1, p \neq j}^{n} (\lambda_{p} - \lambda_{j})} \right)$$
(4.3)

Para cadeias mais complexas, uma solução analítica do sistema de equações diferencias torna-se inviável e a utilização de métodos numéricos é necessária. No entanto, quando os elementos da matriz A possuem ordens de grandeza muito diferentes, a matriz é quase singular e instabilidades nas soluções numéricas são geradas. Este é o caso do Urânio-235, para o qual o valor do determinante de A é  $-9,140\times10^{-25}$ . Dessa forma, é necessária a implementação de métodos numéricos estáveis e eficientes, desenvolvidos para a resolução de sistemas rígidos.

#### 2.2. Solução Numérica

A diferença discrepante existente com relação às meias vidas dos diferentes elementos da cadeia radioativa torna-se uma dificuldade inerente à busca de uma solução numérica. No caso do problema proposto, enquanto a constante de decaimento do  $^{235}$ U é da ordem de  $10^{-12}$ , a do  $^{223}$ Fr é da ordem de  $10^{1}$ . Essa grande diferença entre as ordens de grandeza se traduz em uma matriz dos coeficientes A quase singular.

Um problema é considerado rígido quando sua solução exata tem a forma  $e^{-ct}$ , onde c é uma constante positiva grande, como é o caso do problema proposto [4]. A resolução numérica de sistemas rígidos impõe dificuldades aos algoritmos dos métodos explícitos, pois para manter a estabilidade do método são necessários passos de integração muito pequenos e, consequentemente, simulações muito lentas. Isso ocorre mesmo para métodos explícitos que possuem alta ordem de convergência e estabilidade, como o método de Runge-Kutta 4-4, e métodos do tipo preditor-corretor, como o método Preditor-Corretor de Adams (PC2), o que pode comprometer a eficácia do método. Uma maneira de contornar as dificuldades encontradas é a implementação de métodos implícitos, como os métodos de Rosenbrock [5,6].

O método de Runge-Kutta 4-4 é um método explícito de passo único, obtido pelo truncamento da série de Taylor na quarta ordem [4], sendo escrito conforme a Eq. (5).

$$\begin{cases} x_0 = x(t_0) \\ x_{i+1} = x_i + \frac{h}{6} [k_1 + 2k_2 + 2k_3 + k_4] \end{cases}$$
(5)

onde:

$$k_1 = f(t_i, x_i) (5.1)$$

$$k_2 = f\left(t_i + \frac{h}{2}, x_i + \frac{h}{2}k_1\right)$$
 (5.2)

$$k_3 = f\left(t_i + \frac{h}{2}, x_i + \frac{h}{2}k_2\right)$$
 (5.3)

$$k_4 = f(t_i + h, x_i + hk_3) (5.4)$$

O método Preditor-Corretor de Adams (PC2) foi escolhido por utilizar um método explícito multipasso de Adams-Bashforth de quarta ordem como preditor e um método implícito multipasso de Adams-Moulton de quarta ordem como corretor [4], os quais são descritos pela Eq. (6) e pela Eq. (7), respectivamente.

$$\begin{cases}
x_0 = x(t_0) \\
x_{i+1} = x_i + \frac{1}{24} h \left[ 55 f(t_i, x_i) - 59 f(t_{i-1}, x_{i-1}) + 37 f(t_{i-2}, x_{i-2}) - 9 f(t_{i-3}, x_{i-3}) \right],
\end{cases} (6)$$

com  $x_1$ ,  $x_2$  e  $x_3$  determinados anteriormente por meio de outro método.

$$\begin{cases}
x_0 = x(t_0) \\
x_{i+1} = x_i + \frac{1}{24} h \left[ 9f(t_{i+1}, x_{i+1}) + 19f(t_i, x_i) - 5f(t_{i-1}, x_{i-1}) - f(t_{i-2}, x_{i-2}) \right]
\end{cases} , (7)$$

com  $x_1$  e  $x_2$  determinados anteriormente por meio de outro método.

Neste caso, foi utilizado o método explícito de passo único Runge-Kutta 4-4 para o cálculo das aproximações iniciais.

Conhecidos na literatura como métodos de Runge-Kutta linearmente implícitos, os métodos de Rosenbrock surgiram como uma alternativa para resolver equações implícitas, que geralmente eram resolvidas por processos iterativos. Estes métodos são baseados na linearização de métodos de Runge-Kutta implícitos, substituindo a resolução de sistemas não lineares pela resolução de uma sequência de sistemas lineares. Os métodos de Rosenbrock são recomendados para equações rígidas [6].

Conforme Hairer e Wanner [6], um método Rosenbrock de s-estágios é definido pela Eq. (8).

$$\begin{cases} x_0 = x(t_0) \\ x_{n+1} = x_n + \sum_{i=1}^{s} b_i k_i \end{cases}$$
(8)

onde:

$$k_{i} = hf\left(t_{n} + \alpha_{i}h, x_{n} + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij}k_{j}\right) + \gamma_{i}h^{2}\frac{\partial f}{\partial t}\left(t_{n}, x_{n}\right) + hJ\sum_{j=1}^{i} \gamma_{ij}k_{j}$$

$$(8.1)$$

$$\alpha_i = \sum_{i=1}^{i-1} \alpha_{ij} \tag{8.2}$$

$$\gamma_i = \sum_{j=1}^i \gamma_{ij} \tag{8.3}$$

com  $J = f'(x_n)$  a matriz Jacobiana, sendo s e os coeficientes  $\alpha_{ij}$ ,  $\gamma_{ij}$ ,  $b_i$  determinados de forma a obter-se a ordem desejada de consistência e estabilidade para os sistemas rígidos.

Através de uma mudança de variáveis, os gastos computacionais dos métodos de Rosenbrock são reduzidos e sua implementação é facilitada. O método de Rosenbrock de terceira ordem e 4-estágios, que foi implementado para este trabalho, é descrito pela Eq. (9).

$$\begin{cases} x_0 = x(t_0) \\ x_{n+1} = x_n + 2u_1 + u_3 + u_4 \end{cases}$$
(9)

onde  $u_1$ ,  $u_2$ ,  $u_3$  e  $u_4$  são soluções dos seguintes sistemas lineares:

$$\left(\frac{2}{h}I - J\right)u_1 = f(t_n, x_n) \tag{9.1}$$

$$\left(\frac{2}{h}I - J\right)u_2 = f\left(t_n, x_n\right) + \frac{4}{h}u_1 \qquad , \tag{9.2}$$

$$\left(\frac{2}{h}I - J\right)u_3 = f\left(t_n, x_n + 2u_1\right) + \frac{1}{h}u_1 - \frac{1}{h}u_2 \qquad , \tag{9.3}$$

$$\left(\frac{2}{h}I - J\right)u_4 = f\left(t_n, x_n + 2u_1 + u_3\right) + \frac{1}{h}u_1 - \frac{1}{h}u_2 - \frac{8}{3h}u_3 \tag{9.4}$$

Usualmente, o método de Rosenbrock é implementado com passo de integração adaptativo. Entretanto, nesta implementação foi utilizado passo fixo para permitir a comparação entre os métodos.

### 2.3. Estimativa do Passo de Integração

Uma particularidade deste problema é que a solução analítica é conhecida e, portanto, é possível calcular o erro absoluto de cada solução aproximada, a cada passo de integração. Entretanto, como o conhecimento da solução exata não é o mais usual, o passo de integração inicial será determinado por um processo que independe da solução exata.

O passo de integração *h* foi estimado através da delimitação do erro de discretização global do método de Euler para resolução numérica de EDO's.

A simplicidade algébrica do método de Euler, que é descrito pela Eq. (10), permite facilmente encontrar uma estimativa para o passo de integração que garante que a solução aproximada esteja dentro de um limite de erro pré-fixado.

$$\begin{cases} x_0 = x(t_0) \\ x_{n+1} = x_n + hf(t_n, x_n) \end{cases}$$
(10)

Por ser o Euler um método explícito de primeira ordem, o passo de integração h que garante a estabilidade e a convergência da solução para este método garante também para métodos de ordens superiores.

Considerando um problema do tipo  $x'(t) = \lambda x(t)$ ,  $x(t_0) = x_0$ , onde  $\lambda$  é suficientemente grande em módulo e negativo, sabe-se que a solução exata é da forma  $x(t) = x_0 e^{(t-t_0)\lambda}$  e que ela decai para zero com o passar do tempo. Porém, a solução numérica calculada por meio do método de Euler pode ser reescrita de acordo com a Eq. (11), donde se conclui que a solução numérica também decai para zero conforme as aproximações sucessivas somente se a Eq. (12) for satisfeita.

$$x_{n+1} = x_n + hf(t_n, x_n) = x_n + h\lambda x_n = (1 + h\lambda)x_n \Longrightarrow x_n = (1 + h\lambda)^n x_0$$
(11)

$$\left|1 + h\lambda\right| < 1 \tag{12}$$

Segundo Stoer e Bulirsh [7], tal comportamento se estende para sistemas lineares de EDO's, nos quais os autovalores da matriz dos coeficientes A assumem valores suficientemente grandes em módulo e negativos, como é o caso do problema proposto como exemplo neste trabalho. Desta forma, realizando as adaptações necessárias e considerando que o autovalor  $-\lambda_6$  é o que assume o maior valor em módulo dentre todos, segue que o valor do passo de integração h > 0 para que o método de Euler seja estável deve satisfazer a Eq. (13).

$$|1 - \lambda_6 h| < 1 \Rightarrow h < \frac{2}{45,78587} \approx 0,04368$$
 (13)

Para garantir a convergência do método de Euler dentro de uma precisão inicial  $\varepsilon > 0$  desejada é utilizado o erro absoluto  $e_{n+1}$  cometido pelo próprio método no tempo final  $t_{n+1}$ , conforme a Eq. (14).

$$||e_{n+1}|| = ||x(t_{n+1}) - x_{n+1}|| \le ||I + hA|| \cdot ||e_n|| + L$$
 , (14)

onde  $e_0 = 0$ ,  $x(t_{n+1})$  é a solução exata do problema,  $x_{n+1}$  é a solução aproximada calculada por meio do método de Euler, I é a matriz identidade de ordem 7, A é a matriz dos coeficientes do problema e L é uma cota superior para o erro de truncamento do método de Euler, satisfazendo a Eq. (15).

$$L = \frac{h^2}{2} \cdot \max \left\{ |x''(\xi)| : \xi \in [0, t_{n+1}] \right\}$$
 (15)

Valendo-se de algumas propriedades particulares do problema proposto, realizando algumas maximizações e substituições adequadas e considerando que o passo de integração h satisfaz a Eq. (13), conclui-se que o valor do passo de integração para o qual o erro absoluto cometido pelo método de Euler no tempo final  $t_{n+1}$  é inferior a uma precisão  $\varepsilon > 0$  dada, deve satisfazer a Eq. (16).

$$h \le \frac{2\varepsilon}{t_{n+1} \left\| A^2 \right\|_{\infty}} \tag{16}$$

sendo  $||A^2||_{\infty} \approx 2,0991 \times 10^3$ .

Dessa forma, considerando a precisão  $\varepsilon=10^{-4}$  e o tempo final  $t_{n+1}=1$  dia, o passo de integração h que garante a convergência do método de Euler deve ser da ordem de  $10^{-7}$ , enquanto que para  $t_{n+1}=10^6$  dias, a ordem do passo de integração é de  $10^{-13}$ .

A delimitação do passo de integração sintetizada na Eq. (16) pode ser generalizada para qualquer problema de decaimento no qual a quantidade inicial dos elementos da cadeia é conhecida e a matriz dos coeficientes A é constante, ou seja, quando não existe entrada adicional no inventário dos elementos durante o processo de decaimento.

#### 3. RESULTADOS

Os métodos numéricos anteriormente descritos foram implementados em Fortran 90 e os algoritmos foram executados em uma máquina com processador Intel® Core<sup>TM</sup> i5 e Windows® 7 64-bit.

A ordem de convergência dos métodos implementados é superior à ordem de convergência do método de Euler, já que os métodos de Runge-Kutta 4-4 e Preditor-Corretor de Adams são de quarta ordem, o método de Rosenbrock é de terceira ordem e o método de Euler é de primeira ordem. As maximizações no cálculo do passo de integração que garante a

estabilidade e a convergência do método de Euler permitem escolher o passo de integração maior do que o estimado na seção 2, de modo que a estabilidade e a convergência ainda sejam garantidas para os demais métodos deste trabalho.

O valor utilizado para o passo de integração foi h=0,005 dia, que satisfaz a condição de estabilidade imposta pela Eq. (13) e corresponde a 7,2 minutos, sendo inferior à meia vida do  $^{223}$ Fr, elemento da série que decai mais rapidamente em função de apresentar a menor das meias vidas, 21,8 minutos. Os métodos foram avaliados para um tempo final de  $10^6$  dias, considerando como condição inicial o vetor (1, 0, 0, 0, 0, 0, 0).

Conforme o esperado em função da ordem de convergência dos algoritmos, as aproximações da solução por eles realizadas convergiram para a solução exata e, consequentemente, ficaram muito próximas umas das outras. Assim, os erros cometidos são da mesma ordem de grandeza em cada uma das variáveis do problema.

A Tabela 2 apresenta a solução analítica e a solução aproximada para o problema proposto, calculada por meio do método de Rosenbrock, após terem sido percorridos 10<sup>6</sup> dias a partir do instante inicial. O erro absoluto cometido em cada variável pelo método de Rosenbrock, no final dos 10<sup>6</sup> dias, também é apresentado na Tabela 2.

Tabela 2. Resultados para  $10^6$  dias com o método de Rosenbrock e h=0,005 dia

Elemento	Solução Analítica	Rosenbrock	Erro Absoluto
<sup>235</sup> U	9,99997301746505E-01	9,99997291055819E-01	1,1E-08
<sup>231</sup> Th	4,13929262358489E-12	4,14196624202371E-12	2,7E-15
<sup>231</sup> Pa	2,62153281154388E-06	2,62322610683649E-06	1,7E-09
<sup>227</sup> Ac	1,72291122089985E-09	1,72402403201198E-09	1,1E-12
<sup>227</sup> Th	4,05724412541411E-12	4,00447043925758E-12	5,3E-14
<sup>223</sup> Fr	1,40000253534036E-15	4,53216025662830E-17	1,4E-15
<sup>223</sup> Ra	3,53570705044241E-12	2,48034422015230E-12	1,1E-12

O gráfico da solução aproximada obtida pelo método de Rosenbrock com passo de integração h=0,005 dia é apresentado na Fig. 2.

A Tabela 3 mostra os erros absolutos cometidos pelo método de Rosenbrock em função da solução analítica para diferentes intervalos de tempo. O erro absoluto representa a avaliação do erro global da solução aproximada e, como esperado, aumenta com o decorrer do tempo. O maior erro cometido para este problema é da ordem de  $10^{-8}$ , referente ao inventário de  $^{235}$ U. Porém, este erro ainda satisfaz a precisão  $\epsilon$ = $10^{-4}$  desejada, mesmo com o valor do passo de integração superior ao estimado.

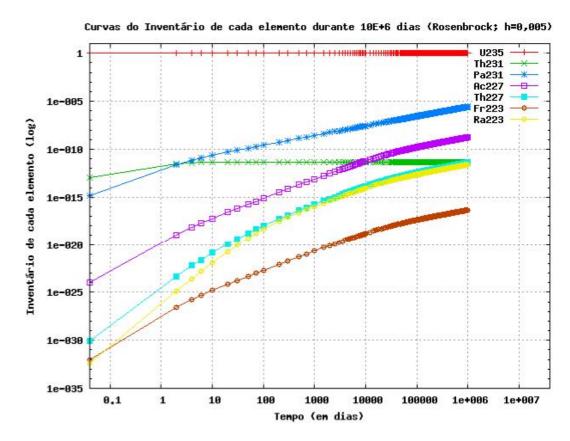


Figura 2. Curvas do inventário de cada elemento da série de decaimento natural do Urânio-235 durante  $10^6$  dias, calculadas pelo método de Rosenbrock com h=0,005 dia.

Tabela 3. Erros absolutos cometidos pelo método de Rosenbrock com h=0,005 dia

Elemento	1 dia	10 dias	$10^2$ dias	$10^3$ dias	10 <sup>4</sup> dias	10 <sup>5</sup> dias	10 <sup>6</sup> dias
<sup>235</sup> U	1,0E-14	1,1E-13	1,1E-12	1,1E-11	1,1E-10	1,1E-09	1,1E-08
<sup>231</sup> Th	1,3E-15	2,7E-15	2,7E-15	2,7E-15	2,7E-15	2,7E-15	2,7E-15
<sup>231</sup> Pa	4,6E-16	1,5E-14	1,7E-13	1,7E-12	1,7E-11	1,7E-10	1,7E-09
<sup>227</sup> Ac	8,6E-24	3,7E-21	4,9E-19	4,9E-17	3,9E-15	1,0E-13	1,1E-12
<sup>227</sup> Th	2,2E-27	8,8E-25	6,4E-22	4,4E-20	3,9E-17	4,2E-15	5,3E-14
<sup>223</sup> Fr	7,2E-30	5,1E-29	4,3E-26	5,6E-23	4,8E-20	1,6E-17	1,4E-15
<sup>223</sup> Ra	6,0E-27	7,2E-26	2,5E-22	1,4E-20	6,0E-17	1,4E-14	1,1E-12

# 4. CONCLUSÕES

A série de decaimento natural do Urânio-235 pode ser modelada pelas equações de Bateman, que possuem, para este caso específico, solução analítica. Porém, em alguns casos não é trivial o cálculo da solução exata e faz-se necessário o uso de abordagens numéricas. Dessa forma, os métodos numéricos de Runge-Kutta 4-4, Preditor-Corretor de Adams (PC2) e de Rosenbrock foram avaliados. O passo de integração utilizado foi estimado em função do erro de discretização global do método de Euler, de modo que a estabilidade e a convergência fossem garantidas. Os erros absolutos foram da ordem de 10<sup>-8</sup>, ou menores, e as curvas do inventário de cada elemento da série foram consistentes com o decaimento natural do Urânio-235 no período analisado.

Os maiores erros das soluções numéricas residem, além da escolha do método numérico adequado, nos dados de entrada e na própria modelagem do problema. Erros nos dados de entrada se propagam de forma significativa em sistemas rígidos. A variação do passo de integração dos métodos numéricos é adequada para este tipo de problema em função da diferença da ordem de grandeza das meias vidas dos elementos. Uma das vantagens existentes no uso do passo adaptativo é a velocidade com a qual a solução aproximada é encontrada. Em trabalhos futuros esses aspectos serão abordados utilizando cadeias mais complexas, visando aplicações em problemas práticos na área de rejeitos radioativos e meio ambiente.

#### **AGRADECIMENTOS**

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo auxílio financeiro.

#### REFERÊNCIAS

- 1. G. F. Thomas, D. H. Barber, "Stiffness in radioactive decay chains," *Ann. Nucl. Energy*, **21** (5), pp.309–320 (1994).
- 2. J. Cetnar, "General solution of Bateman equations for nuclear transmutations," *Ann. Nucl. Energy*, **33**, pp.640-645 (2006).
- 3. H. Bateman, "The Solution of a system of differential equations occurring in the theory of radio-active transformations," *Proc. Cambridge Philos. Soc.*, **15**, pp.423–427 (1910).
- 4. R. L. Burden, J. D. Faires, *Numerical Analysis*, Thomson Brooks/Cole, Belmont & USA (2005).
- 5. J. D. Lambert, Numerical methods for ordinary differential systems: the initial value problem, John Wiley & Sons, New York & USA (1991).
- 6. E. Hairer, G. Wanner, Solving Ordinary Differential Equations II (Stiff and Differential-Algebraic Problems), Springer, Berlin & Germany (1996).
- 7. J. Stoer, R. Bulirsh, *Introduction to numerical analysis*, Springer-Verlag, New York & USA (1996).