

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

O Problema do k -Autovalor em Estudos de Criticalidade

por

Jayme Andrade Neto

Trabalho submetido como requisito parcial
para a obtenção do grau de
Doutor em Matemática Aplicada

Profa. Dra. Liliane Basso Barichello
Orientadora

Porto Alegre, dezembro de 2018.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Andrade Neto, Jayme

O Problema do k -Autovalor em Estudos de Criticalidade / Jayme Andrade Neto.—Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2018.

71 p.: il.

Tese (Doutorado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2018.

Orientadora: Basso Barichello, Liliane

Tese: Matemática Aplicada,
Doutorado, Tese, Mestrado, Dissertação

O Problema do k-Autovalor em Estudos de Criticalidade

por

Jayme Andrade Neto

Trabalho submetido ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática e Estatística da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para a obtenção do grau de

Doutor em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Teoria de Transporte de Partículas

Orientadora: Profa. Dra. Liliane Basso Barichello

Banca examinadora:

Prof. Dr. Fernando Carvalho da Silva
COPPE-UFRJ

Prof. Dr. João Francisco Prolo Filho
IMEF-FURG

Prof. Dr. Rudnei Dias da Cunha
IME-UFRGS

Tese defendida e aprovada em
dezembro de 2018.

Prof. Dr. Carlos Hoppen
Coordenador

AGRADECIMENTO

Agradeço a Deus por iluminar o meu caminho.

Agradeço a minha mãe, Maria Elizete, por todo o amor, carinho, dedicação e paciência em todos os momentos da minha vida.

A minha esposa Natália por me acompanhar em toda essa jornada com muito amor, carinho e compreensão.

A minha orientadora, Dra Liliane Basso Barichello pela orientação, dedicação e conhecimento compartilhado.

Aos colegas de doutorado pela convivência e companheirismo.

A CAPES pelo apoio financeiro.

E a todos que direta ou indiretamente contribuíram para a conclusão deste trabalho.

Sumário

| | |
|--|------|
| LISTA DE FIGURAS | viii |
| LISTA DE TABELAS | ix |
| LISTA DE SIGLAS E SÍMBOLOS | xi |
| RESUMO | xiv |
| ABSTRACT | xv |
| | |
| 1 INTRODUÇÃO | 1 |
| | |
| 2 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA DO K-AUTOVALOR | 6 |
| 2.1 O modelo de multigrupo de energia | 8 |
| 2.2 O método de ordenadas discretas | 11 |
| 2.3 O problema do k-autovalor | 13 |
| | |
| 3 CÁLCULO DO K-AUTOVALOR VIA DETERMINANTE | 16 |
| 3.1 Solução ADO para o problema do k-autovalor | 17 |
| 3.2 Desenvolvimento da solução em função dos autovalores ADO | 21 |
| 3.3 Equação característica | 27 |
| | |
| 4 RESULTADOS NUMÉRICOS PARA A ABORDAGEM 1 | 31 |
| 4.1 PROBLEMA 1: Placa plana homogênea - 2 grupos de energia | 32 |
| 4.2 PROBLEMA 2: Placa plana heterogênea - 2 grupos de energia | 35 |
| 4.3 PROBLEMA 3: Placa plana heterogênea - 10 grupos de energia | 37 |
| | |
| 5 K-AUTOVALOR VIA ESQUEMA ITERATIVO | 42 |
| 5.1 Processo iterativo para o cálculo de k | 42 |
| 5.2 Determinação de k via solução ADO | 44 |

| | | |
|-------------------|--|-----------|
| 6 | RESULTADOS NUMÉRICOS PARA A ABORDAGEM 2 | 47 |
| 6.1 | PROBLEMA 4: Placa plana homogênea | 47 |
| 6.2 | PROBLEMA 5: Placa heterogênea com duas regiões | 49 |
| 6.3 | PROBLEMA 6: Placa heterogênea com três regiões | 50 |
| 7 | CONCLUSÕES E CONSIDERAÇÕES FINAIS | 54 |
| | REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS | 56 |
| APÊNDICE A | TABELAS DOS PROBLEMAS 4 A 6 | 67 |
| APÊNDICE B | COMPARAÇÃO ENTRE OS MÉTODOS DA SECANTE E DA BISSECÇÃO | 69 |
| APÊNDICE C | RESULTADOS DOS PROBLEMAS 4 A 6 SEGUNDO A ABORDAGEM 1 | 71 |

Lista de Figuras

| | | |
|------------|--|----|
| Figura 2.1 | Representação do esquema de multigrupos de energia. | 9 |
| Figura 2.2 | Geometria de uma célula plana com R regiões | 15 |
| Figura 4.1 | Representação geométrica do PROBLEMA 2 com placa de controle | 35 |
| Figura 4.2 | Representação geométrica do PROBLEMA 2 sem placa de controle | 35 |
| Figura 4.3 | Representação geométrica do PROBLEMA 3 | 38 |
| Figura 6.1 | Representação geométrica do PROBLEMA 6 | 51 |

Lista de Tabelas

| | | |
|-------------|--|----|
| Tabela 4.1 | Parâmetros para o PROBLEMA 1 | 32 |
| Tabela 4.2 | Resultados para o PROBLEMA 1: ADO_N e LTS_{2N} | 34 |
| Tabela 4.3 | Resultados para o PROBLEMA 1: ADO_N e $TWODANT_{2N}$ | 34 |
| Tabela 4.4 | Parâmetros para o PROBLEMA 2 | 36 |
| Tabela 4.5 | Resultados para o PROBLEMA 2 com placa de controle: ADO_N e P_{2N-1} | 36 |
| Tabela 4.6 | Resultados para o PROBLEMA 2 sem placa de controle: ADO_N e P_{2N-1} | 37 |
| Tabela 4.7 | Dados de seção de choque total e espectro de fissão do PROBLEMA 3 | 39 |
| Tabela 4.8 | Dados de seção de choque de espalhamento $\sigma_{s,gg'}^r$ em $r = 1$ para o PROBLEMA 3 | 39 |
| Tabela 4.9 | Dados de seção de choque de espalhamento $\sigma_{s,ij}^r$ em $r = 2$ para o PROBLEMA 3 | 40 |
| Tabela 4.10 | Resultados para o PROBLEMA 3, para ordem $N < 20$ | 40 |
| Tabela 4.11 | Resultados para o PROBLEMA 3, para ordem $N \geq 20$ | 41 |
| Tabela 6.1 | Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 4: CASO 1 | 48 |
| Tabela 6.2 | Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 4: CASO 2 | 48 |
| Tabela 6.3 | Parâmetros para o PROBLEMA 5 | 49 |
| Tabela 6.4 | Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 5: CASO 1 | 50 |
| Tabela 6.5 | Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 5: CASO 2 | 50 |
| Tabela 6.6 | Parâmetros para o PROBLEMA 6 | 51 |
| Tabela 6.7 | Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 6: CASO 1 | 51 |
| Tabela 6.8 | Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 6: CASO 2 | 52 |
| Tabela 6.9 | Variação do fluxo escalar para os problemas 4, 5 e 6 | 52 |

| | | |
|-------------|---|----|
| Tabela 6.10 | Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 4 com espessura igual a 1 cm: CASO 1 | 52 |
| Tabela 6.11 | Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 4 com espessura igual a 1 cm: CASO 2 | 53 |
| Tabela A.1 | Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 4: CASO 1, $N \leq 256$. . | 67 |
| Tabela A.2 | Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 4: CASO 2, $N \leq 256$. . | 67 |
| Tabela A.3 | Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 5: CASO 1, $N \leq 256$. . | 68 |
| Tabela A.4 | Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 5: CASO 2, $N \leq 256$. . | 68 |
| Tabela A.5 | Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 6: CASO 1, $N \leq 256$. . | 68 |
| Tabela A.6 | Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 6: CASO 2, $N \leq 256$. . | 68 |
| Tabela B.1 | Secante x Bissecção para o PROBLEMA 2 com placa de controle | 69 |
| Tabela B.2 | Secante x Bissecção para o PROBLEMA 2 sem placa de controle | 69 |
| Tabela C.1 | Valores para k_{eff} para o PROBLEMA 4 segundo a abordagem 1 | 71 |
| Tabela C.2 | Valores para k_{eff} para o PROBLEMA 5 segundo a abordagem 1 | 71 |
| Tabela C.3 | Valores para k_{eff} para o PROBLEMA 6 segundo a abordagem 1 | 72 |

LISTA DE SIGLAS E SÍMBOLOS

Lista de Siglas

| | |
|-------|--|
| ADO | Analytical Discrete Ordinates Method - Método Analítico em Ordenadas Discretas |
| BE | Boltzmann Equation - Equação de Boltzmann |
| TE | Transport Equation - Equação de Transporte |

Lista de Símbolos

| | |
|--|---|
| v | velocidade do nêutron (cm/s) |
| k | fator de multiplicação de nêutrons |
| $A_{r,j}, B_{r,j}$ | coeficientes da solução homogênea na região r |
| E | energia (eV) |
| N | ordem da quadratura |
| $\mathbf{A}_r, \mathbf{B}_r$ | matrizes do problema de autovalores |
| $\mathbf{M}, \mathbf{W}, \mathbf{D}_r$ | matrizes auxiliares do problema de autovalores |
| $\mathbf{U}_r, \mathbf{R}_r, \mathbf{S}_r, \mathbf{V}_r$ | matrizes auxiliares |
| \mathbf{I}_{NG} | matriz identidade de ordem NG |
| \mathbf{E}, \mathbf{F} | matrizes das condições de contorno e continuidade |
| Ω | direção do movimento das partículas |
| Φ_r^\pm | autofunções do problema do k -autovalor na região r |

| | |
|------------------------------|---|
| $\Psi(\mathbf{r}, \Omega)$ | fluxo angular (n/cm^2s) |
| $\Psi_g(\mathbf{r}, \Omega)$ | fluxo angular no grupo g (n/cm^2s) |
| Ψ_r^+, Ψ_r^- | solução do problema do k-autovalor |
| θ | ângulo polar |
| $\chi(E)$ | espectro de fissão |
| χ_g | espectro de fissão no grupo g |
| λ_r | autovalores ADO da região r |
| ξ_r | constantes de separação ADO na região r |
| ν | número médio de nêutrons emitidos por fissão |
| τ | variável óptica |
| Q | fonte externa |
| \mathbf{r} | vetor posição espacial (cm) |
| z | posição espacial unidimensional (cm) |
| σ_t | seção de choque total (cm^{-1}) |
| $\sigma_{t,g}$ | seção de choque total no grupo g (cm^{-1}) |
| σ_s | seção de choque de espalhamento (cm^{-1}) |
| $\sigma_{s,gg'}$ | seção de choque de transferência do grupo g' para o grupo g (cm^{-1}) |
| σ_f | seção de choque de fissão (cm^{-1}) |
| $\sigma_{f,g}$ | seção de choque de fissão no grupo g (cm^{-1}) |
| ω_j | pesos da quadratura |

RESUMO

Neste trabalho o problema do cálculo do chamado fator de multiplicação em problemas de criticalidade de um reator nuclear, autovalor dominante k , em meio unidimensional é tratado a partir de uma abordagem analítica. O método Analítico em Ordenadas Discretas, ADO, é aplicado através de duas metodologias distintas para a determinação do parâmetro k . Na primeira, a equação de transporte é resolvida incluindo o termo de fissão, em placa homogênea ou heterogênea, o que implica no aparecimento de constantes de separação complexas na região em que ocorre a fissão. Juntamente com condições de continuidade entre meios e condições de contorno, que podem ser do tipo vácuo ou reflexiva, a equação resultante para a determinação do parâmetro k é solucionada através do método iterativo da secante. Na segunda abordagem, a parcela correspondente a fissão na equação de transporte é considerada como um termo de fonte. A partir de estimativas iniciais para k e para essa fonte, um esquema similar ao Método da Potência é usado para se obter o valor do parâmetro k .

Os resultados numéricos com a primeira abordagem são comparáveis aos resultados existentes na literatura, sendo obtidos com excelente precisão. Em geral, a partir de ordens de quadratura inferiores às disponíveis na literatura.

As simulações com a segunda abordagem, apesar de evitarem soluções com parâmetros complexos, não obtiveram resultados com a mesma precisão da abordagem anterior.

Palavras-chave: Problema do k -autovalor, Método ADO.

ABSTRACT

In this work the problem of calculating the so called multiplication factor in criticality problems of a nuclear reactor, dominant eigenvalue k , in one-dimensional slab is treated from an analytical approach. The Analytical Discrete Ordinates method, ADO, is applied through two different methodologies for the determination of the parameter k . Firstly, the transport equation is solved including the fission term, in homogeneous or heterogeneous slab. In such case there are complex separation constants in the region where fission occurs. In addition to boundary condition, continuity conditions on interface of regions are considered to write the resulting equation for determination of the parameter k that is solved by secant method, which is an iterative procedure. In the second approach, the fission term in the transport equation is considered as a source term. From initial estimates for k and for this source, a scheme similar to the Power Method is used to obtain the value of k .

The numerical results with the first approach are comparable to the results in the literature and are obtained with excellent accuracy. In general, from lower orders of quadrature than those available in the literature.

Simulations with the second approach, despite avoiding solutions with complex parameters, did not obtain results with the same precision than previous approach.

Keywords: k -eigenvalue problem, ADO Method.

1 INTRODUÇÃO

A importância da Equação de Boltzmann (BE), ou de sua versão linear, também chamada de *equação de transporte* (TE), se deve as suas inúmeras aplicações, tais como, o estudo da fissão nuclear e cálculo de fluxos de nêutrons em reatores nucleares [48, 51, 71, 92], o cálculo da distribuição das doses de radiação em tratamentos de radioterapia [59, 63, 76, 91], transferência radiativa [73, 75], estudos aerodinâmicos [38], entre outros. Neste trabalho trata-se da modelagem de transporte de nêutrons.

A BE foi introduzida no final do século XIX em estudos relacionados a teoria cinética dos gases [20]. A BE é uma equação íntegro-diferencial usada para descrever a distribuição espacial, direcional, energética e temporal de partículas em meios materiais [42]. Um maior detalhamento sobre a derivação e propriedades da BE, assim como tópicos relacionados a existência e estrutura da solução geral da equação, pode ser encontrada em [28, 29, 30].

Um trabalho fundamental na teoria de transporte foi apresentado por K. M. Case em 1960 [26], o qual apresenta uma solução analítica para a equação de transporte baseada em uma expansão em autofunções singulares. Desenvolvimentos adicionais podem ser vistos em Case e Zweifel [27] e McCormick [69]. Atualmente conhecido como método de Case, apesar do rigoroso desenvolvimento matemático, este método só pode ser utilizado em casos idealizados (uma dimensão espacial, meio homogêneo, monoenergético, espalhamento isotrópico e independente do tempo).

Em geral os métodos de solução para a equação de transporte seguem dois tratamentos distintos: probabilístico ou determinístico. Os métodos probabilísticos, como o método Monte Carlo, propõem resolver de forma aproximada o problema exato. Diversas técnicas relacionadas ao método Monte Carlo foram desenvolvidas durante e após a Segunda Guerra Mundial por Metropolis e Ulam

[72] e suas aplicações em transporte de nêutrons podem ser encontradas nos livros [53, 55, 87]. Em [72] Ulam e Metropolis propõem uma simulação computacional que considera a possibilidade de usar o método Monte Carlo em problemas relacionados ao coeficiente de difusão do nêutron em certos materiais.

De outra forma, os métodos determinísticos buscam uma solução exata para o problema aproximado e consideram discretizações das variáveis que constituem o espaço de fase. Destacam-se os métodos de diferenças finitas [50, 67], volumes finitos [60], elementos finitos [62, 68] e métodos nodais [4, 6, 14] para discretização da variável espacial. O método multigrupo para discretização da variável energética [37, 61] e, para a variável angular, os métodos tradicionais são o dos harmônicos esféricos [40, 41, 52] e de ordenadas discretas [5, 7, 14, 46, 70].

O método dos harmônicos esféricos baseia-se na aproximação da dependência angular do fluxo de nêutrons por uma expansão em harmônicos esféricos [33, 45], ou por uma expansão em polinômios de Legendre, no caso de geometria plana com simetria azimutal, em que apenas uma variável é suficiente para descrever a dependência angular. Neste último caso, o método é chamado de Método P_N . Amplamente pesquisado e desenvolvido por Mark [65, 66], o Método P_N tem sido usado na resolução de diversos problemas [39, 54, 56, 58, 64, 78, 79, 83].

Por sua vez, o método de ordenadas discretas, originalmente desenvolvido por Wick [93] e Chandrasekhar [31], propõe uma aproximação para o termo integral da equação de transporte por meio de uma fórmula de quadratura, de modo que a equação íntegro-diferencial passa a ser escrita como um sistema de equações diferenciais. Também conhecido como S_N , este método tem sido utilizado para resolver problemas de transporte unidimensionais e multidimensionais [1, 34, 36, 47, 74].

Para problemas em ordenadas discretas unidimensionais, uma solução analítica em termos da variável espacial foi proposta por Chandrasekhar. O tratamento analítico das equações em ordenadas discretas trazem certas dificuldades,

como por exemplo, o cálculo de constantes de separação a partir das raízes de polinômios característicos e, também, pela utilização, em geral, de um único tipo de quadratura. Como alternativa, o método Analítico em Ordenadas Discretas (ADO), proposto por Barichello e Siewert em 1999 [7], possibilita o uso de esquemas de quadratura arbitrários do tipo *half-range* [8] para o tratamento de problemas unidimensionais. Como consequência disso, a abordagem ADO permite o cálculo das constantes de separação através de um problema de autovalores de ordem reduzida se comparado a outras abordagens tradicionais.

O método ADO vem sendo amplamente utilizado na resolução de diversos problemas, como por exemplo na dinâmica de gases rarefeitos [9, 10, 11, 44, 84, 85], transferência radiativa [32, 81] e em problemas tanto unidimensionais como bidimensionais [12, 13, 22, 77, 80, 90].

Em virtude da eficiência apresentada pelo método ADO na solução dos diversos problemas citados acima, onde foram alcançadas soluções precisas e analíticas na variável espacial e de fácil implementação computacional, pretende-se com este trabalho ampliar a classe de problemas resolvidos pelo método ADO, abordando-se problemas relacionados ao cálculo do fator de multiplicação, k , em reatores nucleares (também chamado de fator de multiplicação efetivo). Aqui indicado por problema do k -autovalor (*k-eigenvalue problem*).

Um reator nuclear deve ser planejado de modo que seja possível manter uma reação de fissão em cadeia sustentável, ou seja, as taxas de perdas de nêutrons por absorção ou escape devem se equilibrar com a taxa de produção de nêutrons de fissão. Segundo Duderstadt [37], para manter uma reação de fissão em cadeia sustentável em um reator, deve-se ter um arranjo em que exatamente um nêutron gerado por um evento de fissão induza uma nova reação de fissão.

Um nêutron gerado em uma reação de fissão nuclear será espalhado no reator até ser absorvido ou escapar sem sofrer iterações. Alguns nêutrons serão

absorvidos por material físsil e induzirão novos eventos de fissão que resultarão no aparecimento de uma nova geração de nêutrons de fissão. Desse modo, em Duderstadt [37], define-se o *fator de multiplicação* k como a razão entre a taxa de produção de nêutrons no reator pela taxa de perda de nêutrons no reator

$$k \equiv \frac{\text{taxa de produção de nêutrons no reator}}{\text{taxa de perda de nêutrons no reator}}. \quad (1.1)$$

Quando essas duas taxas são iguais, $k = 1$, dizemos que o reator está em estado crítico, ou seja, a população de nêutrons mantém-se estável.

O problema do k -autovalor é um problema muito relevante na área nuclear. Por isso, extensa e continuada pesquisa neste tópico é realizada ao longo dos anos tanto para casos unidimensionais [2, 19, 24, 25, 49, 57, 82, 89] quanto bidimensionais [15, 35, 86, 88].

Sendo assim, o objetivo deste trabalho é propor alternativas para a estimativa do k_{eff} utilizando o método ADO. Para isso, no capítulo 2 apresenta-se o problema de interesse, juntamente com o modelo de multigrupo de energia para discretização da variável energética e o modelo de ordenadas discretas para discretização da variável angular.

No capítulo 3, desenvolve-se a solução ADO fundamental para o tratamento do problema do k -autovalor. Também é apresentado o desenvolvimento da solução em termos de constantes de separação complexas e, a partir de condições de contorno e continuidade, introduz-se o sistema cuja equação característica deve gerar a condição para obtenção do valor de k .

No capítulo 4 apresentam-se alguns aspectos relativos a implementação computacional da solução, bem como os resultados numéricos para três problemas teste.

No capítulo 5 desenvolve-se a abordagem ADO via um esquema iterativo para obtenção do fator de multiplicação. Essa abordagem tem o objetivo de

obter uma estimativa para o problema do k -autovalor sem a necessidade de se trabalhar com constantes de separação complexas. Os resultados numéricos para essa metodologia são apresentados no capítulo 6 para três problemas teste. Por fim, no capítulo 7 são feitas as conclusões e considerações finais.

No apêndice A deste trabalho são apresentadas tabelas com os resultados dos problemas 4 a 6 para ordens de quadratura superiores. E no apêndice B são apresentadas tabelas comparando resultados do PROBLEMA 2, para o parâmetro k e o número de iterações, com os métodos da secante e da bissecção.

2 FORMULAÇÃO DO PROBLEMA DO K-AUTOVALOR

Para a abordagem do problema de criticalidade, objeto de estudo deste trabalho, faz-se necessária a introdução de um modelo matemático básico em transporte de partículas. Neste caso, a equação linear de Boltzmann, a qual é obtida através de um balanço de partículas no espaço de fase analisado, ou seja, em função da posição no espaço, da energia, da direção do movimento e do tempo, conforme [61]. Para o caso de partículas neutras em um dado volume elementar dV , a variação do fluxo de nêutrons com o tempo é determinada pela diferença entre a quantidade de nêutrons ganhos e nêutrons perdidos.

Segundo Lewis e Miller [61] a equação de transporte de nêutrons dependente do tempo, em meio multiplicativo sem considerar os nêutrons atrasados pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
 \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) &= -\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) - \sigma_t(\mathbf{r}, E) \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) \\
 &+ \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^+} \int_{\mathbb{S}^2} \sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E' \rightarrow E) \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E', t) d\boldsymbol{\Omega}' dE' \\
 &+ \frac{\chi(E)}{4\pi} \int_{\mathbb{R}^+} \nu(\mathbf{r}, E') \sigma_f(\mathbf{r}, E') \int_{\mathbb{S}^2} \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E', t) d\boldsymbol{\Omega}' dE' \\
 &+ Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t), \tag{2.1}
 \end{aligned}$$

onde

\mathbb{R}^+ : são os números reais não negativos,

$\mathbf{r} = (x, y, z) \in V \subset \mathbb{R}^3$: é o vetor posição espacial no volume V ,

$\boldsymbol{\Omega} \in \mathbb{S}^2 = \{\boldsymbol{\Omega} \in \mathbb{R}^3 : \|\boldsymbol{\Omega}\|_2 = 1\}$: representa a direção do movimento das partículas,

$E \in \mathbb{R}^+$: representa a variável energia,

$t \in \mathbb{R}^+$: é o tempo,

$\Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t)$: é o fluxo angular de nêutrons na posição \mathbf{r} , direção $\boldsymbol{\Omega}$, energia E no tempo t ,

$\sigma_t(\mathbf{r}, E)$: é a seção de choque macroscópica total na posição \mathbf{r} e energia E ,
 $\sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E' \rightarrow E)$: é a seção de choque diferencial de espalhamento na posição \mathbf{r} , da direção $\boldsymbol{\Omega}'$ para $\boldsymbol{\Omega}$ e da energia E' para E ,
 $\sigma_f(\mathbf{r}, E')$: é a seção de choque de fissão na posição \mathbf{r} e energia E' ,
 $\nu(\mathbf{r}, E')$: é o número médio de nêutrons produzidos por evento de fissão na posição \mathbf{r} com energia E' ,
 $\chi(E)$ espectro de fissão: $\chi(E)dE$ definido por Duderstadt [37] como uma distribuição de nêutrons de fissão emitidos com energia E em E a $E + dE$ por nêutron de fissão e
 $Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t)$: são outras fontes de nêutrons na posição \mathbf{r} , direção $\boldsymbol{\Omega}$, energia E e tempo t .

A equação (2.1) considera a variação do fluxo de nêutrons com dependência temporal. As duas parcelas com sinal negativo no lado direito de (2.1) representam a perda de nêutrons, sendo a primeira referente a fuga líquida de nêutrons no elemento de volume dV e a segunda referente a perda de nêutrons em consequência de interações em dV . Em caso de colisões, pode ocorrer a absorção, o espalhamento ou a fissão do nêutron. Em quaisquer dessas hipóteses o nêutron colidido poderá não ter mais a mesma direção nem a mesma energia, conforme [42]. Por sua vez, as três parcelas positivas no lado direito de (2.1) descrevem o ganho de nêutrons. O terceiro termo do lado direito descreve o aumento no fluxo Ψ relativo aos nêutrons que colidem em dV e passam a ter a direção e a energia nos intervalos considerados em dV . O parâmetro que corresponde a probabilidade disto ocorrer é a *seção de choque diferencial de espalhamento*, $\sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E' \rightarrow E)$. Em caso de espalhamento *isotrópico*, a seção de choque de espalhamento é independente da direção e, portanto, terá a forma $\sigma_s(\mathbf{r}, E' \rightarrow E)$. O quarto termo diz respeito aos nêutrons produzidos por fissão. A *seção de choque de fissão*, σ_f , não depende da direção, porém, a energia do nêutron interfere na probabilidade de ocorrer a fissão e, também, no número médio de nêutrons produzidos na fissão, $\nu(\mathbf{r}, E')$. O último

termo do lado direito da equação (2.1) representa o ganho de nêutrons decorrente de uma fonte externa.

Os problemas resolvidos neste trabalho apresentam-se em estado estacionário, em meios unidimensionais, com a presença de fissão e sem fontes externas. Com isso, reescreve-se a equação (2.1) como

$$\begin{aligned}
 [\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla + \sigma_t(z, E)] \Psi(z, \boldsymbol{\Omega}, E) = & \\
 & \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \int_{\mathbb{S}^2} \sigma_s(z, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E' \rightarrow E) \Psi(z, \boldsymbol{\Omega}', E) d\boldsymbol{\Omega}' dE' \\
 & + \frac{\chi(E)}{4\pi} \int_0^\infty \nu(z, E') \sigma_f(z, E') \int_{\mathbb{S}^2} \Psi(z, \boldsymbol{\Omega}', E') d\boldsymbol{\Omega}' dE'.
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

Tendo em vista a dificuldade de tratamento desta equação, algumas simplificações e aproximações são usualmente consideradas. Em particular, no que diz respeito ao tratamento das variáveis energia e angular, tais aproximações são introduzidas a seguir.

2.1 O modelo de multigrupo de energia

Segundo Duderstadt [37], os nêutrons em um reator nuclear têm um domínio de variação da energia que pode ser algo entre 0.01 eV até 10 MeV . Como as seções de choque dependem da energia do nêutron incidente, examina-se um tratamento que considere esta dependência, por exemplo, supondo uma discretização desta variável. Assim, apresenta-se neste trabalho o tratamento clássico da aproximação de multigrupos de energia, o qual consiste em subdividir o intervalo energético escolhido em G subintervalos, que serão os *grupos* de energia. De modo que, seguindo a notação padrão, G indica o grupo de menor energia e 1 o grupo com a maior energia. Os grupos são divididos conforme mostra a Figura 2.1.

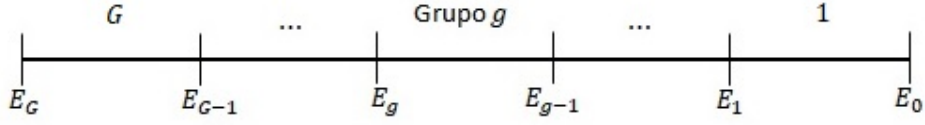


Figura 2.1: Representação do esquema de multigrupos de energia.

Portanto, para cada um dos G grupos tem-se um problema monoenergético, sendo o grupo g correspondente aos nêutrons cuja energia encontra-se no intervalo (E_g, E_{g-1}) . O próximo passo é integrar a equação de transporte em cada um dos subintervalos de energia considerados. Expressando a integral sobre E' como um somatório para todos os G grupos, obtém-se

$$\begin{aligned} & \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \int_{E_g}^{E_{g-1}} \Psi(z, \boldsymbol{\Omega}, E) dE + \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_t(z, E) \Psi(z, \boldsymbol{\Omega}, E) dE = \\ & \frac{1}{4\pi} \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sum_{g'=1}^G \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \int_{\mathbb{S}^2} \sigma_s(z, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E' \rightarrow E) \Psi(z, \boldsymbol{\Omega}', E') d\boldsymbol{\Omega}' dE' dE \\ & + \int_{E_g}^{E_{g-1}} \frac{\chi(E)}{4\pi} \sum_{g'=1}^G \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \int_{\mathbb{S}^2} \nu(z, E') \sigma_f(z, E') \Psi(z, \boldsymbol{\Omega}', E') d\boldsymbol{\Omega}' dE' dE, \end{aligned} \quad (2.3)$$

para $g \in \{1, \dots, G\}$.

Mas, por definição, tem-se que

$$\Psi_g(z, \boldsymbol{\Omega}) \equiv \int_{E_g}^{E_{g-1}} \Psi(z, \boldsymbol{\Omega}, E) dE, \quad (2.4)$$

$$\sigma_{t,g}(z) \Psi_g(z, \boldsymbol{\Omega}) \equiv \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_t(z, E) \Psi(z, \boldsymbol{\Omega}, E) dE, \quad (2.5)$$

$$\nu \sigma_{f,g} \Psi_g(z, \boldsymbol{\Omega}) \equiv \int_{E_g}^{E_{g-1}} \nu(z, E) \sigma_f(z, E) \Psi(z, \boldsymbol{\Omega}, E) dE, \quad (2.6)$$

$$\begin{aligned} & \sigma_{s,gg'}(z, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) \Psi_{g'}(z, \boldsymbol{\Omega}') \equiv \\ & \int_{E_g}^{E_{g-1}} \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \sigma_s(z, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E' \rightarrow E) \Psi(z, \boldsymbol{\Omega}', E') dE' dE \end{aligned} \quad (2.7)$$

e

$$\chi_g \equiv \int_{E_g}^{E_{g-1}} \chi(E) dE. \quad (2.8)$$

Substituindo as equações (2.4) a (2.8) na equação (2.3), obtém-se a equação de transporte na formulação de multigrupos de energia, qual seja,

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \Psi_g(z, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma_{t,g}(z) \Psi_g(z, \boldsymbol{\Omega}) &= \sum_{g'=1}^G \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{S}^2} \sigma_{s,gg'}(z, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) \Psi_{g'}(z, \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' \\ &+ \frac{\chi_g}{4\pi} \sum_{g'=1}^G \int_{\mathbb{S}^2} \nu \sigma_{f,g}(z) \Psi_{g'}(z, \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}', \end{aligned} \quad (2.9)$$

para $g = 1, \dots, G$, e representa um sistema de G equações diferenciais.

Para a obtenção dos parâmetros de multigrupo $\sigma_{t,g}(z)$ e $\nu \sigma_{f,g}(z)$, as equações (2.5) e (2.6) são integradas em $\boldsymbol{\Omega}$, o que resulta em

$$\sigma_{t,g}(z) \int_{\mathbb{S}^2} \Psi_g(z, \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega} \equiv \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_t(z, E) \left(\int_{\mathbb{S}^2} \Psi(z, \boldsymbol{\Omega}, E) d\boldsymbol{\Omega} \right) dE \quad (2.10)$$

e

$$\nu \sigma_{f,g}(z) \int_{\mathbb{S}^2} \Psi_g(z, \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega} \equiv \int_{E_g}^{E_{g-1}} \nu(z, E) \sigma_f(z, E) \left(\int_{\mathbb{S}^2} \Psi(z, \boldsymbol{\Omega}, E) d\boldsymbol{\Omega} \right) dE. \quad (2.11)$$

Então, usando a equação (2.4) nas equações (2.10) e (2.11), segue que

$$\sigma_{t,g}(z) \equiv \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_t(z, E) \left(\int_{\mathbb{S}^2} \Psi(z, \boldsymbol{\Omega}, E) d\boldsymbol{\Omega} \right) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \int_{\mathbb{S}^2} \Psi(z, \boldsymbol{\Omega}, E) d\boldsymbol{\Omega} dE} \quad (2.12)$$

e

$$\nu \sigma_{f,g}(z) \equiv \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \nu(z, E) \sigma_f(z, E) \left(\int_{\mathbb{S}^2} \Psi(z, \boldsymbol{\Omega}, E) d\boldsymbol{\Omega} \right) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \int_{\mathbb{S}^2} \Psi(z, \boldsymbol{\Omega}, E) d\boldsymbol{\Omega} dE}. \quad (2.13)$$

Já para a obtenção do parâmetro $\sigma_{s,gg'}(z, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega})$, primeiro deve ser lembrado que a mudança na direção de movimento dos nêutrons, devido a colisão de espalhamento, é função apenas de $\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}$, ou seja,

$$\sigma_{s,gg'}(z, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) = \sigma_{s,gg'}(z, \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}), \quad (2.14)$$

enquanto que $\sigma_{s,gg'}(z, \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega})$ é dado por

$$\sigma_{s,gg'}(z, \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) = \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{4\pi} \sigma_{s,l}^{g' \rightarrow g}(z) P_l(\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}), \quad (2.15)$$

com $\sigma_{s,l}^{g' \rightarrow g}(z)$ assim definido:

$$\sigma_{s,l}^{g' \rightarrow g}(z) \equiv \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \sigma_{s,l}(z, E' \rightarrow E) \left(\int_{\mathbb{S}^2} \Psi(z, \mathbf{\Omega}, E') d\mathbf{\Omega} \right) dE' dE}{\int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \int_{\mathbb{S}^2} \Psi(z, \mathbf{\Omega}, E') d\mathbf{\Omega} dE'}. \quad (2.16)$$

Mas, para $E_g < E < E_{g-1}$, faz-se a seguinte aproximação:

$$\Psi(z, \mathbf{\Omega}, E) \approx f_g(E) \Psi(z, \mathbf{\Omega}), \quad (2.17)$$

onde $f_g(E)$, para $g = 1, \dots, G$, é tal que

$$\int_{E_g}^{E_{g-1}} f_g(E) dE = 1, \quad (2.18)$$

para atender à definição dada na equação (2.4).

Finalmente, usando as equações () e () nas equações (), () e (), segue que

$$\sigma_{t,g}(z) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_t(z, E) f_g(E) dE, \quad (2.19)$$

$$\nu \sigma_{f,g}(z) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \nu(z, E) \sigma_f(z, E) f_g(E) dE \quad (2.20)$$

e

$$\sigma_{s,l}^{g' \rightarrow g} = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \sigma_{s,l}(z, E' \rightarrow E) f_{g'}(E') dE' dE. \quad (2.21)$$

É importante destacar que a determinação de $f_g(E)$ não é tão simples, já que depende de características de cada sistema específico examinado. Um tratamento mais detalhado da formulação multigrupo de energia pode ser visto em [18, 37, 61].

2.2 O método de ordenadas discretas

Um dos métodos mais amplamente utilizados na solução da equação de transporte, para a discretização da variável angular, é o método de ordenadas discretas, conhecido como S_N . Originalmente proposto por Wick [93] e extensamente desenvolvido por Chandrasekhar [31], o método sugere o uso de um

esquema de quadratura como aproximação do termo integral da equação de transporte. Considerando-se o problema de uma placa plana em uma dimensão e com simetria azimutal, a variável direção se reduz a $\Omega = \mu \mathbf{e}_z$ com $\mu = \cos(\theta)$, em que θ representa o ângulo polar formado entre a direção de movimento do nêutron com o eixo Z e $|\mathbf{e}_z| = 1$. O método supracitado considera um conjunto finito de direções μ_j , $j = 1, \dots, N$. De modo geral, a aproximação da integral de uma função a partir de uma fórmula de quadratura numérica é escrita como

$$\int_{-1}^1 f(\mu) d\mu \approx \sum_{j=1}^N \omega_j f(\mu_j), \quad (2.22)$$

onde $\mu_j \in [-1, 1]$ são os N nós da quadratura e ω_j são os pesos correspondentes. Para Wick [93] os nós e pesos devem ser escolhidos de acordo com a fórmula de quadratura Gaussiana, pois assim a expressão (2.22) é exata para qualquer polinômio em μ cujo grau seja menor ou igual a $(2N - 1)$.

Aplicando-se esta quadratura numérica à equação de transporte para cada grupo g , tem-se a versão em ordenadas discretas da equação (2.9), para $\Omega = \mu \mathbf{e}_z$ dada por

$$\begin{aligned} \mu_i \frac{d}{dz} \Psi_g(z, \mu_i) + \sigma_{t,g}(z) \Psi_g(z, \mu_i) &= \frac{1}{2} \sum_{g'=1}^G \sigma_{s,gg'}(z) \sum_{j=1}^N \omega_j \Psi_{g'}(z, \mu_j) \\ &+ \frac{\chi_g}{2} \sum_{g'=1}^G \nu \sigma_{f,g'}(z) \sum_{j=1}^N \omega_j \Psi_{g'}(z, \mu_j), \end{aligned} \quad (2.23)$$

para $i = 1, \dots, N$ e $g = 1, \dots, G$.

Na próxima seção introduz-se o problema a ser resolvido neste trabalho, primeiro em uma forma mais geral e em seguida aplicando-se as simplificações da formulação de multigrupo de energia e do método de ordenadas discretas.

2.3 O problema do k-autovalor

Uma reação de fissão nuclear em um reator pode ser iniciada a partir do lançamento de nêutrons por decaimento radioativo de uma fonte inserida no seu interior. É fundamental que os processos de reação em cadeia da fissão nuclear ocorram de modo sustentável, ou seja, a quantidade de nêutrons que são produzidos deve ser igual a quantidade de nêutrons que são absorvidos ou que deixam o sistema. Quando o ganho e a perda de nêutrons em um reator se mantém em equilíbrio diz-se que o reator está em estado *crítico*.

Introduz-se o fator $\frac{1}{k}$ no termo de fissão da equação (2.2) como uma forma de atingir esse equilíbrio. Além disso, são consideradas condições de contorno do tipo vácuo. Assim, a partir dessa equação e das condições de contorno obtém-se o seguinte problema do k-autovalor unidimensional para um domínio $z \in [0, a]$:

$$\begin{aligned}
 [\mathbf{\Omega} \cdot \nabla + \sigma_t(z, E)] \Psi(z, \mathbf{\Omega}, E) = & \\
 \frac{1}{4\pi} \int_0^\infty \int_{\mathbb{S}^2} \sigma_s(z, \mathbf{\Omega}' \rightarrow \mathbf{\Omega}, E' \rightarrow E) \Psi(z, \mathbf{\Omega}', E) d\mathbf{\Omega}' dE' & \\
 + \frac{1}{k} \frac{\chi(E)}{4\pi} \int_0^\infty \nu(z, E') \sigma_f(z, E') dE' \int_{\mathbb{S}^2} \Psi(z, \mathbf{\Omega}', E) d\mathbf{\Omega}', & \\
 \end{aligned} \tag{2.24}$$

$$\Psi(0, \mathbf{\Omega}, E) = 0 \tag{2.25}$$

e

$$\Psi(a, \mathbf{\Omega}, E) = 0. \tag{2.26}$$

O sistema obtido a partir das equações (2.24) a (2.26) sempre possui a solução nula, ou seja, $\Psi(z, \mathbf{\Omega}, E) = 0$. Dessa forma, o objetivo será encontrar o maior valor de k , também chamado de *fator de multiplicação efetivo*, e indicado por k_{eff} , de modo que exista uma solução não nula. Segundo Cacuci [23] é possível mostrar que na presença de uma região com material físsil sempre existe tal k . Ainda, conforme Cacuci, para um reator de potência, se a produção de nêutrons

por eventos de fissão equilibra a perda de nêutrons por captura ou fuga, então será possível obter um fluxo de nêutrons não nulo em estado estacionário.

Assim sendo, o valor de k será ajustado para se atingir esse equilíbrio. Dependendo do valor de k o reator pode ser *subcrítico*, *crítico* ou *supercrítico*. Se $k < 1$ o sistema é dito subcrítico e é necessário aumentar a produção de nêutrons da fonte de fissão. Se $k = 1$ o sistema é crítico e está em equilíbrio. Por fim, se $k > 1$ o sistema é dito supercrítico e a quantidade de nêutrons produzidos no processo de fissão deve ser reduzida.

Considerando-se o problema do k -autovalor unidimensional, heterogêneo com $r = 1, \dots, R$ regiões, G grupos de energia, com espalhamento isotrópico e simetria azimutal, a equação (2.24) é reescrita como

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \Psi_r(z, \mu) + \mathbf{S}_r \Psi_r(z, \mu) = \frac{1}{2} \mathbf{T}_r \int_{-1}^1 \Psi_r(z, \mu') d\mu', \quad (2.27)$$

onde

$$\Psi_r(z, \mu) = \begin{pmatrix} \Psi_{r,1}(z, \mu) \\ \Psi_{r,2}(z, \mu) \\ \vdots \\ \Psi_{r,G}(z, \mu) \end{pmatrix} \quad (2.28)$$

é um vetor de G componentes com os fluxos angulares de grupo na região r , $z \in (z_{r-1}, z_r)$ é a variável espacial na região r medida em cm , \mathbf{S}_r é uma matriz diagonal com as seções de choque total de grupo $\sigma_{t,1}^r, \dots, \sigma_{t,G}^r$, \mathbf{T}_r é uma matriz $G \times G$ com as seções de choque de espalhamento para o caso isotrópico juntamente com a parcela correspondente a fissão, cujos termos são dados por

$$\sigma_{g,g'}^r = \sigma_{s,gg'}^r + \frac{1}{k} \chi_g^r (\nu \sigma_f)_{g'}^r, \quad 1 \leq g, g' \leq G. \quad (2.29)$$

O termo $\sigma_{s,gg'}^r$ corresponde a seção de choque de espalhamento do grupo g' para o grupo g na região r , a variável k é o fator de multiplicação que pretende-se obter, $(\nu \sigma_f)_{g'}^r$ é o número médio de nêutrons emitidos por fissão multiplicado pela seção de choque de fissão no grupo g' na região r e χ_g^r corresponde a fração de nêutrons

que surgem no grupo g na região r . Observa-se que o segundo termo do lado direito em (2.29) é nulo para as regiões em que não há fissão.

A Figura 2.2 representa uma célula plana de um reator nuclear composta por R regiões.

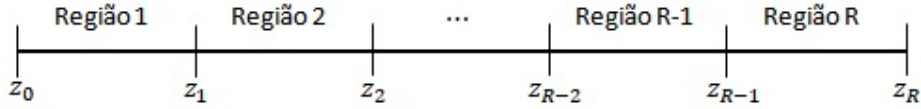


Figura 2.2: Geometria de uma célula plana com R regiões

A fim de completar a formulação do problema avaliam-se as condições de contorno e continuidade para os fluxos angulares de grupo. Em $z = z_0 = 0$, para $\mu \geq 0$ tem-se

$$\Psi_1(0, \mu) = \rho \Psi_1(0, -\mu). \quad (2.30)$$

Em relação as regiões intermediárias, as condições de continuidade para $r = 1, 2, \dots, R-1$ e para $\mu \geq 0$ são dadas por

$$\Psi_r(z_r, \pm\mu) = \Psi_{r+1}(z_r, \pm\mu). \quad (2.31)$$

Por fim, a condição de contorno em $z = z_R$ para $\mu \geq 0$ é dada por

$$\Psi_R(z_R, -\mu) = \rho \Psi_R(z_R, \mu). \quad (2.32)$$

Nas equações (2.30) e (2.32) considera-se $\rho = 0$ para condição de contorno do tipo vácuo ou $\rho = 1$ para contorno do tipo reflexivo.

No capítulo 3, a partir da formulação do problema do k -autovalor, desenvolve-se a solução através da abordagem Analítica em Ordenadas Discretas, ADO.

3 CÁLCULO DO K-AUTOVALOR VIA DETERMINANTE

Desenvolve-se neste capítulo a solução Analítica em Ordenadas Discretas, ADO, proposta por Barichello e Siewert [7], para o problema de criticalidade dado pela equação (2.27). Entre as vantagens trazidas pelo método ADO está a possibilidade do cálculo de constantes de separação através de um problema de autovalor de ordem reduzida. Além disso, é possível usar esquemas de quadratura arbitrários e a solução é escrita de forma analítica na variável espacial.

Conforme Siewert [83] e Caldeira [24] é mais apropriado considerar a variável espacial medida em termos do livre caminho médio. Para isso, em qualquer região r , indicando o menor valor da seção de choque total de grupo por $\sigma_{t,min}^r$, insere-se a variável óptica adimensional $\tau(z) = \tau_{r-1} + (z - z_{r-1})\sigma_{t,min}^r$, sendo que

$$\tau_{r-1} = \sum_{i=1}^{r-1} (z_i - z_{i-1}) \sigma_{t,min}^r. \quad (3.1)$$

Então, seguindo a notação usada em [24], reescreve-se a equação (2.27), para $\tau \in (\tau_{r-1}, \tau_r)$

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} \Psi_r(\tau, \mu) + \Sigma_r \Psi_r(\tau, \mu) = \frac{1}{2} \mathbf{C}_r \int_{-1}^1 \Psi_r(\tau, \mu') d\mu', \quad (3.2)$$

de modo que $\Sigma_r = \mathbf{S}_r / \sigma_{t,min}^r$ e $\mathbf{C}_r = \mathbf{T}_r / \sigma_{t,min}^r$. Analogamente, as condições de contorno e continuidade também são reescritas em termos da variável óptica τ como

$$\Psi_1(0, \mu) = \rho \Psi_1(0, -\mu), \quad (3.3)$$

$$\Psi_r(\tau_r, \pm\mu) = \Psi_{r+1}(\tau_r, \pm\mu), \quad (3.4)$$

para $r = 1, 2, \dots, R - 1$, e

$$\Psi_R(\tau_R, -\mu) = \rho \Psi_R(\tau_R, \mu). \quad (3.5)$$

3.1 Solução ADO para o problema do k-autovalor

Para o desenvolvimento da solução Analítica em Ordenadas Discretas, reescreve-se o termo integral da equação (3.2),

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} \Psi_r(\tau, \mu) + \Sigma_r \Psi_r(\tau, \mu) = \frac{1}{2} \mathbf{C}_r \int_0^1 [\Psi_r(\tau, \mu') + \Psi_r(\tau, -\mu')] d\mu'. \quad (3.6)$$

Em particular, neste trabalho considera-se um mapeamento do já conhecido esquema de quadratura de Gauss-Legendre com nós e pesos dados por $\{y_j, v_j\}$ no intervalo $[-1, 1]$ para o intervalo $[0, 1]$, de modo que os novos nós e pesos $\{\mu_j, \omega_j\}$ são dados por $\mu_j = \frac{1}{2}(y_j + 1)$ e $\omega_j = \frac{1}{2}v_j$. Dessa forma obtém-se uma ordem de quadratura N em cada um dos subintervalos $[-1, 0]$ e $[0, 1]$. Ou seja, para o mesmo valor de N do modelo clássico, descrito na seção 2.2, obtém-se o dobro da quantidade de ordenadas discretas. Portanto a versão em ordenadas discretas da equação (3.6), em cada região $r = 1, 2, \dots, R$, assume a forma:

$$\mu_i \frac{d}{d\tau} \Psi_r(\tau, \mu_i) + \Sigma_r \Psi_r(\tau, \mu_i) = \frac{1}{2} \mathbf{C}_r \sum_{j=1}^N \omega_j [\Psi_r(\tau, \mu_j) + \Psi_r(\tau, -\mu_j)] \quad (3.7)$$

e

$$-\mu_i \frac{d}{d\tau} \Psi_r(\tau, -\mu_i) + \Sigma_r \Psi_r(\tau, -\mu_i) = \frac{1}{2} \mathbf{C}_r \sum_{j=1}^N \omega_j [\Psi_r(\tau, \mu_j) + \Psi_r(\tau, -\mu_j)], \quad (3.8)$$

para $i = 1, 2, \dots, N$. As equações (3.7) e (3.8) representam um sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem. Então, supomos a solução da forma

$$\Psi_r(\tau, \pm\mu_i) = \phi_r(\xi_r, \pm\mu_i) e^{-\tau/\xi_r}. \quad (3.9)$$

Substituindo (3.9) nas equações (3.7) e (3.8) obtém-se

$$\begin{aligned} \pm \mu_i \frac{d}{d\tau} [\phi_r(\xi_r, \pm\mu_i) e^{-\tau/\xi_r}] + \Sigma_r \phi_r(\xi_r, \pm\mu_i) e^{-\tau/\xi_r} = \\ \frac{1}{2} \mathbf{C}_r \sum_{j=1}^N \omega_j [\phi_r(\xi_r, \pm\mu_j) + \phi_r(\xi_r, \mp\mu_j)] e^{-\tau/\xi_r}, \end{aligned} \quad (3.10)$$

para $i = 1, \dots, N$ e $r = 1, \dots, R$. Simplificando e reescrevendo (3.10) tem-se

$$\left(\boldsymbol{\Sigma}_r \mp \frac{\mu_i}{\xi_r} \mathbf{I}_G \right) \boldsymbol{\phi}_r(\xi_r, \pm \mu_i) = \frac{1}{2} \mathbf{C}_r \sum_{j=1}^N \omega_j \left(\boldsymbol{\phi}_r(\xi_r, \pm \mu_j) + \boldsymbol{\phi}_r(\xi_r, \mp \mu_j) \right). \quad (3.11)$$

Agora, definem-se os seguintes vetores de ordem NG e matrizes de ordem $NG \times NG$

$$\boldsymbol{\Phi}_r^\pm(\xi_r) = [\phi_1(\xi_r, \pm \mu_1), \dots, \phi_1(\xi_r, \pm \mu_1), \dots, \phi_G(\xi_r, \pm \mu_N), \dots, \phi_G(\xi_r, \pm \mu_N)]^T, \quad (3.12)$$

$$\mathbf{W} = \text{diag} \{ \omega_1 \mathbf{I}_G, \dots, \omega_N \mathbf{I}_G \}, \quad (3.13)$$

$$\mathbf{M} = \text{diag} \{ \mu_1 \mathbf{I}_G, \dots, \mu_N \mathbf{I}_G \}, \quad (3.14)$$

onde \mathbf{I}_G é a matriz identidade de ordem G , e

$$\mathbf{D}_r = \text{diag} \{ \boldsymbol{\Sigma}_r, \dots, \boldsymbol{\Sigma}_r \}. \quad (3.15)$$

Assim, reescreve-se a equação (3.11) obtendo-se o seguinte sistema de ordem NG para cada uma das r regiões

$$\left(\mathbf{D}_r \mp \frac{1}{\xi_r} \mathbf{M} \right) \boldsymbol{\Phi}_r^\pm(\xi_r) = \frac{1}{2} \mathbf{C}_r \mathbf{W} [\boldsymbol{\Phi}_r^\pm(\xi_r) + \boldsymbol{\Phi}_r^\mp(\xi_r)]. \quad (3.16)$$

Definem-se também os vetores de tamanho NG

$$\mathbf{U}_r = \boldsymbol{\Phi}_r^+(\xi_r) + \boldsymbol{\Phi}_r^-(\xi_r) \quad (3.17)$$

e

$$\mathbf{V}_r = \boldsymbol{\Phi}_r^+(\xi_r) - \boldsymbol{\Phi}_r^-(\xi_r). \quad (3.18)$$

Somando-se as equações (3.16) tem-se

$$\left(\mathbf{D}_r - \frac{1}{\xi_r} \mathbf{M} \right) \boldsymbol{\Phi}_r^+(\xi_r) + \left(\mathbf{D}_r + \frac{1}{\xi_r} \mathbf{M} \right) \boldsymbol{\Phi}_r^-(\xi_r) = \mathbf{C}_r \mathbf{W} [\boldsymbol{\Phi}_r^+(\xi_r) + \boldsymbol{\Phi}_r^-(\xi_r)]. \quad (3.19)$$

Usando-se as expressões para \mathbf{U}_r e \mathbf{V}_r para reescrever (3.19) obtém-se

$$\mathbf{D}_r \mathbf{U}_r - \frac{1}{\xi_r} \mathbf{M} \mathbf{V}_r = \mathbf{C}_r \mathbf{W} \mathbf{U}_r, \quad (3.20)$$

ou ainda,

$$\left(\mathbf{D}_r - \mathbf{C}_r \mathbf{W}\right) \mathbf{M}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{U}_r = \frac{1}{\xi_r} \mathbf{M} \mathbf{V}_r. \quad (3.21)$$

Dessa forma obtém-se o seguinte problema de autovalor

$$\mathbf{A}_r \mathbf{X}_r = \frac{1}{\xi_r} \mathbf{Z}_r, \quad (3.22)$$

onde

$$\mathbf{A}_r = \left(\mathbf{D}_r - \mathbf{C}_r \mathbf{W}\right) \mathbf{M}^{-1}, \quad (3.23)$$

$$\mathbf{X}_r = \mathbf{M} \mathbf{U}_r \quad (3.24)$$

e

$$\mathbf{Z}_r = \mathbf{M} \mathbf{V}_r. \quad (3.25)$$

Agora, subtraindo as equações (3.16) tem-se

$$\left(\mathbf{D}_r - \frac{1}{\xi_r} \mathbf{M}\right) \Phi_r^+(\xi_r) - \left(\mathbf{D}_r + \frac{1}{\xi_r} \mathbf{M}\right) \Phi_r^-(\xi_r) = 0, \quad (3.26)$$

que pode ser reescrita como

$$\mathbf{D}_r \mathbf{V}_r = \frac{1}{\xi_r} \mathbf{M} \mathbf{U}_r, \quad (3.27)$$

ou ainda,

$$\mathbf{D}_r \mathbf{M}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{V}_r = \frac{1}{\xi_r} \mathbf{M} \mathbf{U}_r. \quad (3.28)$$

Desse modo, escreve-se outro problema de autovalor, a saber,

$$\mathbf{B}_r \mathbf{Z}_r = \frac{1}{\xi_r} \mathbf{X}_r, \quad (3.29)$$

onde $\mathbf{B}_r = \mathbf{D}_r \mathbf{M}^{-1}$. Então, das equações (3.22) e (3.29) obtemos os seguintes problemas de autovalor

$$(\mathbf{B}_r \mathbf{A}_r) \mathbf{X}_r = \lambda_r \mathbf{X}_r \quad (3.30)$$

e

$$(\mathbf{A}_r \mathbf{B}_r) \mathbf{Z}_r = \lambda_r \mathbf{Z}_r, \quad (3.31)$$

com $\lambda_r = \frac{1}{\xi_r^2}$. Isolando \mathbf{Z}_r na equação (3.22) e somando-se \mathbf{X}_r em ambos os lados obtém-se

$$(\mathbf{I}_{NG} + \xi_r \mathbf{A}_r) \mathbf{X}_r = \mathbf{X}_r + \mathbf{Z}_r. \quad (3.32)$$

Substituindo as equações (3.24) e (3.25) na equação (3.32) obtém-se

$$(\mathbf{I}_{NG} + \xi_r \mathbf{A}_r) \mathbf{X}_r = \mathbf{M} (\mathbf{U}_r + \mathbf{V}_r), \quad (3.33)$$

e, portanto

$$(\mathbf{I}_{NG} + \xi_{r,j} \mathbf{A}_r) \mathbf{X}_r(\xi_{r,j}) = 2\mathbf{M}\Phi_r^+(\xi_{r,j}). \quad (3.34)$$

Isolando $\Phi_r^+(\xi_{r,j})$ na equação (3.34) obtém-se

$$\Phi_r^+(\xi_{r,j}) = \frac{1}{2}\mathbf{M}^{-1} (\mathbf{I}_{NG} + \xi_{r,j} \mathbf{A}_r) \mathbf{X}_r(\xi_{r,j}). \quad (3.35)$$

Da mesma forma, isolando \mathbf{Z}_r na equação (3.22) mas agora subtraindo-se \mathbf{X}_r em ambos os lados obtém-se

$$(-\mathbf{I}_{NG} + \xi_r \mathbf{A}_r) \mathbf{X}_r = -\mathbf{X}_r + \mathbf{Z}_r. \quad (3.36)$$

Substituindo as equações (3.24) e (3.25) na equação (3.36) obtém-se

$$(\mathbf{I}_{NG} - \xi_r \mathbf{A}_r) \mathbf{X}_r = \mathbf{M} (\mathbf{U}_r - \mathbf{V}_r), \quad (3.37)$$

e, portanto

$$(\mathbf{I}_{NG} - \xi_{r,j} \mathbf{A}_r) \mathbf{X}_r(\xi_{r,j}) = 2\mathbf{M}\Phi_r^-(\xi_{r,j}). \quad (3.38)$$

Isolando $\Phi_r^-(\xi_{r,j})$ na equação (3.38) obtém-se

$$\Phi_r^-(\xi_{r,j}) = \frac{1}{2}\mathbf{M}^{-1} (\mathbf{I}_{NG} - \xi_{r,j} \mathbf{A}_r) \mathbf{X}_r(\xi_{r,j}). \quad (3.39)$$

Com isso, definem-se os vetores solução como

$$\Psi_r^+(\tau) = [\Psi_{r,1}(\tau, \mu_1), \dots, \Psi_{r,1}(\tau, \mu_N), \dots, \Psi_{r,G}(\tau, \mu_1), \dots, \Psi_{r,G}(\tau, \mu_N)]^T \quad (3.40)$$

e

$$\Psi_r^-(\tau) = [\Psi_{r,1}(\tau, -\mu_1), \dots, \Psi_{r,1}(\tau, -\mu_N), \dots, \Psi_{r,G}(\tau, -\mu_1), \dots, \Psi_{r,G}(\tau, -\mu_N)]^T. \quad (3.41)$$

Tendo-se resolvido o problema de autovalores (3.30) ou (3.31) e obtendo-se as soluções elementares (3.35) e (3.39) a solução em ordenadas discretas da equação (3.6) em cada região r , usando-se o princípio da superposição, é dada por

$$\Psi_r^+(\tau) = \sum_{j=1}^{NG} [A_{r,j} \Phi_r^+(\xi_{r,j}) e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\xi_{r,j}} + B_{r,j} \Phi_r^-(\xi_{r,j}) e^{-(\tau_r-\tau)/\xi_{r,j}}] \quad (3.42)$$

e

$$\Psi_r^-(\tau) = \sum_{j=1}^{NG} [A_{r,j} \Phi_r^-(\xi_{r,j}) e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\xi_{r,j}} + B_{r,j} \Phi_r^+(\xi_{r,j}) e^{-(\tau_r-\tau)/\xi_{r,j}}], \quad (3.43)$$

de modo que os coeficientes $A_{r,j}$ e $B_{r,j}$ são desconhecidos.

3.2 Desenvolvimento da solução em função dos autovalores ADO

A partir de agora elabora-se o desenvolvimento da solução dada por (3.42) e (3.43) em termos de autovalores (ou constantes de separação) obtidos com base nos problemas de autovalor (3.30) ou (3.31). Faz-se necessário esse estudo já que, diferentemente de problemas em meios não multiplicativos, quando há fissão em alguma região as constantes de separação não são todas reais. No decorrer da implementação constatou-se o aparecimento de constantes de separação do tipo imaginário puro na região em que há fissão. Além disso, com o aumento do número de grupos de energia e da ordem de quadratura, N , observa-se o surgimento de pares de números complexos conjugados tanto no meio multiplicativo quanto nas demais regiões, como também observado por outros autores, [24] e [25].

Neste ponto, adota-se abordagem análoga a [24] e [25], em que a solução é escrita separando-se o somatório conforme o formato das constantes de separação. Para a região contendo material físsil, divide-se a solução em três somatórios. Nesse caso, supondo que J_I constantes de separação são imaginários puros, J_R são reais e J_C são complexas com parte real não nula. Ou seja, $\xi_{r,j} = i\eta_{r,j}$ para $j = 1, \dots, J_I$,

$\xi_{r,j} \in \mathbb{R}$ para $j = J_I + 1, \dots, J_I + J_R$ e $\xi_{r,j} = \lambda_{r,j} + i\eta_{r,j}$ com $\lambda_{r,j} \neq 0$ para $j = J_I + J_R + 1, \dots, J_I + J_R + J_C$, sendo que $J_I + J_R + J_C = NG$. Dessa forma, a solução geral para uma região r , com a presença de material físsil, é escrita como

$$\begin{aligned} \Psi_r^+(\tau) &= \sum_{j=1}^{J_I} [A_{r,j} \Phi_r^+(\xi_{r,j}) e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\xi_{r,j}} + B_{r,j} \Phi_r^-(\xi_{r,j}) e^{-(\tau_r-\tau)/\xi_{r,j}}] \\ &+ \sum_{j=J_I+1}^{J_I+J_R} [A_{r,j} \Phi_r^+(\xi_{r,j}) e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\xi_{r,j}} + B_{r,j} \Phi_r^-(\xi_{r,j}) e^{-(\tau_r-\tau)/\xi_{r,j}}] \\ &+ \sum_{j=J_I+J_R+1}^{NG} [A_{r,j} \Phi_r^+(\xi_{r,j}) e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\xi_{r,j}} + B_{r,j} \Phi_r^-(\xi_{r,j}) e^{-(\tau_r-\tau)/\xi_{r,j}}] \end{aligned} \quad (3.44)$$

e

$$\begin{aligned} \Psi_r^-(\tau) &= \sum_{j=1}^{J_I} [A_{r,j} \Phi_r^-(\xi_{r,j}) e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\xi_{r,j}} + B_{r,j} \Phi_r^+(\xi_{r,j}) e^{-(\tau_r-\tau)/\xi_{r,j}}] \\ &+ \sum_{j=J_I+1}^{J_I+J_R} [A_{r,j} \Phi_r^-(\xi_{r,j}) e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\xi_{r,j}} + B_{r,j} \Phi_r^+(\xi_{r,j}) e^{-(\tau_r-\tau)/\xi_{r,j}}] \\ &+ \sum_{j=J_I+J_R+1}^{NG} [A_{r,j} \Phi_r^-(\xi_{r,j}) e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\xi_{r,j}} + B_{r,j} \Phi_r^+(\xi_{r,j}) e^{-(\tau_r-\tau)/\xi_{r,j}}] \end{aligned} \quad (3.45)$$

Em problemas heterogêneos, para as demais regiões, onde não ocorre fissão e, conseqüentemente, não há constantes de separação do tipo imaginário puro, a solução será dada por

$$\begin{aligned} \Psi_r^+(\tau) &= \sum_{j=1}^{J_R} [A_{r,j} \Phi_r^+(\xi_{r,j}) e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\xi_{r,j}} + B_{r,j} \Phi_r^-(\xi_{r,j}) e^{-(\tau_r-\tau)/\xi_{r,j}}] \\ &+ \sum_{j=J_R+1}^{NG} [A_{r,j} \Phi_r^+(\xi_{r,j}) e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\xi_{r,j}} + B_{r,j} \Phi_r^-(\xi_{r,j}) e^{-(\tau_r-\tau)/\xi_{r,j}}] \end{aligned} \quad (3.46)$$

e

$$\begin{aligned} \Psi_r^-(\tau) &= \sum_{j=1}^{J_R} [A_{r,j} \Phi_r^-(\xi_{r,j}) e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\xi_{r,j}} + B_{r,j} \Phi_r^+(\xi_{r,j}) e^{-(\tau_r-\tau)/\xi_{r,j}}] \\ &+ \sum_{j=J_R+1}^{NG} [A_{r,j} \Phi_r^-(\xi_{r,j}) e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\xi_{r,j}} + B_{r,j} \Phi_r^+(\xi_{r,j}) e^{-(\tau_r-\tau)/\xi_{r,j}}]. \end{aligned} \quad (3.47)$$

Desenvolvendo-se o primeiro somatório da solução dada por (3.44) e (3.45) tem-se, para $\xi_{r,j} = i\eta_{r,j}$, $j = 1, \dots, J_I$

$$e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\xi_{r,j}} = e^{\frac{\tau_{r-1}}{\xi_{r,j}}} \left[\cos\left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}}\right) + i \sin\left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}}\right) \right] \quad (3.48)$$

e

$$e^{-(\tau_r-\tau)/\xi_{r,j}} = e^{\frac{-\tau_r}{\xi_{r,j}}} \left[\cos\left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}}\right) - i \sin\left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}}\right) \right]. \quad (3.49)$$

E, por sua vez, sejam as autofunções dadas por

$$\Phi_r^+(\xi_{r,j}) = \Re\{\Phi_r^+(\xi_{r,j})\} + i\Im\{\Phi_r^+(\xi_{r,j})\} \quad (3.50)$$

e

$$\Phi_r^-(\xi_{r,j}) = \Re\{\Phi_r^-(\xi_{r,j})\} + i\Im\{\Phi_r^-(\xi_{r,j})\}. \quad (3.51)$$

Daí, seque que

$$\begin{aligned} \Phi_r^+(\xi_{r,j}) e^{-\frac{(\tau-\tau_{r-1})}{\xi_{r,j}}} &= e^{\frac{\tau_{r-1}}{\xi_{r,j}}} \left\{ \left[\Re\{\Phi_r^+(\xi_{r,j})\} \cos\left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}}\right) - \Im\{\Phi_r^+(\xi_{r,j})\} \sin\left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}}\right) \right] \right. \\ &\quad \left. + i \left[\Re\{\Phi_r^+(\xi_{r,j})\} \sin\left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}}\right) + \Im\{\Phi_r^+(\xi_{r,j})\} \cos\left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}}\right) \right] \right\} \quad (3.52) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \Phi_r^-(\xi_{r,j}) e^{-\frac{(\tau_r-\tau)}{\xi_{r,j}}} &= e^{\frac{-\tau_r}{\xi_{r,j}}} \left\{ \left[\Re\{\Phi_r^-(\xi_{r,j})\} \cos\left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}}\right) + \Im\{\Phi_r^-(\xi_{r,j})\} \sin\left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}}\right) \right] \right. \\ &\quad \left. + i \left[-\Re\{\Phi_r^-(\xi_{r,j})\} \sin\left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}}\right) + \Im\{\Phi_r^-(\xi_{r,j})\} \cos\left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}}\right) \right] \right\}. \quad (3.53) \end{aligned}$$

Novamente, seguindo a formulação proposta em [25], cujo objetivo é construir a matriz das condições de contorno e continuidade sem termos complexos, tem-se que o produto entre os termos exponenciais e as autofunções assumem partes real e imaginária. Supõe-se, então, que as constantes $A_{r,j}$ e $B_{r,j}$ sejam também números complexos. Os produtos de $A_{r,j}$ e $B_{r,j}$ por $e^{\frac{\tau_{r-1}}{\xi_{r,j}}}$ e $e^{\frac{-\tau_r}{\xi_{r,j}}}$, respectivamente, são escritos como

$$A_{r,j} e^{\frac{\tau_{r-1}}{\xi_{r,j}}} = A_{r,j}^R + iA_{r,j}^I \quad (3.54)$$

e

$$B_{r,j} e^{\frac{-\tau_r}{\xi_{r,j}}} = B_{r,j}^R + iB_{r,j}^I \quad (3.55)$$

Assim, observando-se que $\Phi_r^-(\xi_{r,j}) = \overline{\Phi_r^+(\xi_{r,j})}$, como pode-se ver das equações (3.35) e (3.39), obtém-se

$$\begin{aligned} A_{r,j} \Phi_r^+(\xi_{r,j}) e^{-\frac{(\tau-\tau_{r-1})}{\xi_{r,j}}} &= (A_{r,j}^R + iA_{r,j}^I) \\ &\left\{ \left[\Re \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \cos \left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}} \right) - \Im \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \sin \left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}} \right) \right] \right. \\ &\quad \left. + i \left[\Re \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \sin \left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}} \right) + \Im \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \cos \left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}} \right) \right] \right\} \quad (3.56) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} B_{r,j} \Phi_r^-(\xi_{r,j}) e^{-\frac{(\tau_r-\tau)}{\xi_{r,j}}} &= (B_{r,j}^R + iB_{r,j}^I) \\ &\left\{ \left[\Re \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \cos \left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}} \right) - \Im \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \sin \left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}} \right) \right] \right. \\ &\quad \left. - i \left[\Re \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \sin \left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}} \right) + \Im \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \cos \left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}} \right) \right] \right\}. \quad (3.57) \end{aligned}$$

Somando-se as equações (3.56) e (3.57) obtém-se uma expressão para o fluxo angular dada por uma parte real e uma parte imaginária. Impondo a condição que a solução situe-se no campo real e renomeando as constantes $A_{r,j}$ e $B_{r,j}$, chega-se à seguinte expressão para o primeiro somatório

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{J_I} &\left\{ A_{r,j} \left[\Re \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \cos \left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}} \right) - \Im \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \sin \left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}} \right) \right] + \right. \\ &\quad \left. + B_{r,j} \left[\Re \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \sin \left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}} \right) + \Im \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \cos \left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}} \right) \right] \right\}, \quad (3.58) \end{aligned}$$

agora com $A_{r,j}$ e $B_{r,j}$ reais.

O segundo somatório da solução permanece inalterado, pois as constantes de separação são reais e, portanto, sua expressão é real. Para o terceiro

somatório, sendo as constantes de separação nesse caso da forma $\xi_{r,j} = \lambda_{r,j} + i\eta_{r,j}$, consideram-se as parcelas consecutivas, correspondentes as constantes de separação complexas conjugadas, em conjunto. Assim, desenvolvendo-se o produto das autofunções pelas exponenciais obtém-se

$$\begin{aligned} \Phi_r^+(\xi_{r,j}) e^{-\frac{(\tau-\tau_{r-1})}{\xi_{r,j}}} &= e^{-\frac{(\tau-\tau_{r-1})\lambda_{r,j}}{\xi_{r,j}\overline{\xi_{r,j}}}} \\ &\left\{ \left[\Re \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \cos \left(\frac{(\tau-\tau_{r-1})\eta_{r,j}}{\xi_{r,j}\overline{\xi_{r,j}}} \right) - \Im \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \sin \left(\frac{(\tau-\tau_{r-1})\eta_{r,j}}{\xi_{r,j}\overline{\xi_{r,j}}} \right) \right] + \right. \\ &\left. i \left[\Re \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \sin \left(\frac{(\tau-\tau_{r-1})\eta_{r,j}}{\xi_{r,j}\overline{\xi_{r,j}}} \right) + \Im \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \cos \left(\frac{(\tau-\tau_{r-1})\eta_{r,j}}{\xi_{r,j}\overline{\xi_{r,j}}} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.59)$$

e

$$\begin{aligned} \Phi_r^-(\xi_{r,j}) e^{-\frac{(\tau_r-\tau)}{\xi_{r,j}}} &= e^{-\frac{(\tau_r-\tau)\lambda_{r,j}}{\xi_{r,j}\overline{\xi_{r,j}}}} \\ &\left\{ \left[\Re \{ \Phi_r^-(\xi_{r,j}) \} \cos \left(\frac{(\tau_r-\tau)\eta_{r,j}}{\xi_{r,j}\overline{\xi_{r,j}}} \right) - \Im \{ \Phi_r^-(\xi_{r,j}) \} \sin \left(\frac{(\tau_r-\tau)\eta_{r,j}}{\xi_{r,j}\overline{\xi_{r,j}}} \right) \right] + \right. \\ &\left. i \left[\Re \{ \Phi_r^-(\xi_{r,j}) \} \sin \left(\frac{(\tau_r-\tau)\eta_{r,j}}{\xi_{r,j}\overline{\xi_{r,j}}} \right) + \Im \{ \Phi_r^-(\xi_{r,j}) \} \cos \left(\frac{(\tau_r-\tau)\eta_{r,j}}{\xi_{r,j}\overline{\xi_{r,j}}} \right) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.60)$$

Efetuando-se o produto das autofunções pelos termos exponenciais da parcela seguinte, ou seja, da parcela referente a $\xi_{r,j+1} = \overline{\xi_{r,j}}$, tem-se

$$\begin{aligned} \Phi_r^+(\xi_{r,j+1}) e^{-\frac{(\tau-\tau_{r-1})}{\xi_{r,j+1}}} &= e^{-\frac{(\tau-\tau_{r-1})\lambda_{r,j+1}}{\xi_{r,j+1}\overline{\xi_{r,j+1}}}} \\ &\left\{ \left[\Re \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j+1}) \} \cos \left(\frac{(\tau-\tau_{r-1})\eta_{r,j+1}}{\xi_{r,j+1}\overline{\xi_{r,j+1}}} \right) + \Im \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j+1}) \} \sin \left(\frac{(\tau-\tau_{r-1})\eta_{r,j+1}}{\xi_{r,j+1}\overline{\xi_{r,j+1}}} \right) \right] + \right. \\ &\left. i \left[-\Re \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j+1}) \} \sin \left(\frac{(\tau-\tau_{r-1})\eta_{r,j+1}}{\xi_{r,j+1}\overline{\xi_{r,j+1}}} \right) + \Im \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j+1}) \} \cos \left(\frac{(\tau-\tau_{r-1})\eta_{r,j+1}}{\xi_{r,j+1}\overline{\xi_{r,j+1}}} \right) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.61)$$

e

$$\begin{aligned}
& \Phi_r^-(\xi_{r,j+1}) e^{-\frac{(\tau_r-\tau)}{\xi_{r,j+1}}} = e^{-\frac{(\tau_r-\tau)\lambda_{r,j+1}}{\xi_{r,j+1}\xi_{r,j+1}}} \\
& \left\{ \left[\Re \{ \Phi_r^-(\xi_{r,j+1}) \} \cos \left(\frac{(\tau_r-\tau)\eta_{r,j+1}}{\xi_{r,j+1}\xi_{r,j+1}} \right) + \Im \{ \Phi_r^-(\xi_{r,j+1}) \} \sin \left(\frac{(\tau_r-\tau)\eta_{r,j+1}}{\xi_{r,j+1}\xi_{r,j+1}} \right) \right] + \right. \\
& \left. i \left[-\Re \{ \Phi_r^-(\xi_{r,j+1}) \} \sin \left(\frac{(\tau_r-\tau)\eta_{r,j+1}}{\xi_{r,j+1}\xi_{r,j+1}} \right) + \Im \{ \Phi_r^-(\xi_{r,j+1}) \} \cos \left(\frac{(\tau_r-\tau)\eta_{r,j+1}}{\xi_{r,j+1}\xi_{r,j+1}} \right) \right] \right\}. \quad (3.62)
\end{aligned}$$

Posto isto, o terceiro somatório pode ser reescrito como

$$\begin{aligned}
& \sum_{\substack{j=J_I+J_R+1 \\ \Delta j=2}}^{NG} \left[A_{r,j} \Phi_r^+(\xi_{r,j}) e^{-\frac{(\tau-\tau_{r-1})}{\xi_{r,j}}} + B_{r,j} \Phi_r^-(\xi_{r,j}) e^{-\frac{(\tau_r-\tau)}{\xi_{r,j}}} + \right. \\
& \left. + A_{r,j+1} \Phi_r^+(\xi_{r,j+1}) e^{-\frac{(\tau-\tau_{r-1})}{\xi_{r,j+1}}} + B_{r,j+1} \Phi_r^-(\xi_{r,j+1}) e^{-\frac{(\tau_r-\tau)}{\xi_{r,j+1}}} \right]. \quad (3.63)
\end{aligned}$$

Neste ponto, agrupam-se a primeira com a terceira parcelas e a segunda com a quarta parcelas de (3.63). Supõe-se que os coeficientes $A_{r,j}$, $A_{r,j+1}$, $B_{r,j}$ e $B_{r,j+1}$ assumam partes real e imaginária, efetua-se o produto dos coeficientes pelas autofunções e pelas exponenciais, impondo a condição de que a solução situe-se no campo real. Renomeando-se os coeficientes $A_{r,j}$, $A_{r,j+1}$, $B_{r,j}$ e $B_{r,j+1}$ obtém-se a solução

$$\begin{aligned}
\Psi_r(\tau, +\mu_j) &= \sum_{j=1}^{J_I} \left\{ A_{r,j} \left[\Re \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \cos \left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}} \right) - \Im \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \sin \left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}} \right) \right] + \right. \\
& \left. + B_{r,j} \left[\Re \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \sin \left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}} \right) + \Im \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \cos \left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}} \right) \right] \right\} + \\
& + \sum_{j=J_I+1}^{J_I+J_R} \left[A_{r,j} \Phi_r^+(\xi_{r,j}) e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\xi_{r,j}} + B_{r,j} \Phi_r^-(\xi_{r,j}) e^{-(\tau_r-\tau)/\xi_{r,j}} \right] + \\
& + \sum_{\substack{j=J_I+J_R+1 \\ \Delta j=2}}^{NG} \left\{ \left[A_{r,j} P_{r,\Phi^+}^-(\tau - \tau_{r-1}, \xi_{r,j}) + A_{r,j+1} Q_{r,\Phi^+}^+(\tau - \tau_{r-1}, \xi_{r,j}) \right] e^{-\frac{(\tau-\tau_{r-1})\lambda_{r,j}}{\xi_{r,j}\xi_{r,j}}} + \right. \\
& \left. + \left[B_{r,j} P_{r,\Phi^-}^-(\tau - \tau, \xi_{r,j}) + B_{r,j+1} Q_{r,\Phi^-}^+(\tau - \tau, \xi_{r,j}) \right] e^{-\frac{(\tau_r-\tau)\lambda_{r,j}}{\xi_{r,j}\xi_{r,j}}} \right\}. \quad (3.64)
\end{aligned}$$

Um cálculo análogo mostra que a solução para as direções $-\mu_i$ é dada por

$$\begin{aligned}
\Psi_r(\tau, -\mu_i) = & \sum_{j=1}^{J_I} \left\{ A_{r,j} \left[\Re \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \cos \left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}} \right) + \Im \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \sin \left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}} \right) \right] + \right. \\
& + B_{r,j} \left[\Re \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \sin \left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}} \right) - \Im \{ \Phi_r^+(\xi_{r,j}) \} \cos \left(\frac{\tau}{\eta_{r,j}} \right) \right] \left. \right\} + \\
& + \sum_{j=J_I+1}^{J_I+J_R} \left[A_{r,j} \Phi_r^+(\xi_{r,j}) e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\xi_{r,j}} + B_{r,j} \Phi_r^-(\xi_{r,j}) e^{-(\tau_r-\tau)/\xi_{r,j}} \right] + \\
& + \sum_{\substack{j=J_I+J_R+1 \\ \Delta j=2}}^{NG} \left\{ \left[A_{rj} P_{r,\Phi_-}^-(\tau - \tau_{r-1}, \xi_{r,j}) + A_{r,j+1} Q_{r,\Phi_-}^+(\tau - \tau_{r-1}, \xi_{r,j}) \right] e^{-\frac{(\tau-\tau_{r-1})\lambda_{rj}}{\xi_{r,j}\xi_{r,j}}} + \right. \\
& \left. + \left[B_{r,j} P_{r,\Phi_+}^-(\tau_r - \tau, \xi_{r,j}) + B_{r,j+1} Q_{r,\Phi_+}^+(\tau_r - \tau, \xi_{r,j}) \right] e^{-\frac{(\tau_r-\tau)\lambda_{rj}}{\xi_{r,j}\xi_{r,j}}} \right\}, \quad (3.65)
\end{aligned}$$

onde

$$P_{r,\Phi_{\pm}}^{\pm}(\tau, \xi_{r,j}) = \Re \{ \Phi_r^{\pm}(\xi_{r,j}) \} \cos \left(\frac{\tau \eta_{rj}}{\xi_{rj} \xi_{rj}} \right) \pm \Im \{ \Phi_r^{\pm}(\xi_{r,j}) \} \sin \left(\frac{\tau \eta_{rj}}{\xi_{rj} \xi_{rj}} \right) \quad (3.66)$$

e

$$Q_{r,\Phi_{\pm}}^{\pm}(\tau, \xi_{r,j}) = \Re \{ \Phi_r^{\pm}(\xi_{r,j}) \} \sin \left(\frac{\tau \eta_{rj}}{\xi_{rj} \xi_{rj}} \right) \pm \Im \{ \Phi_r^{\pm}(\xi_{r,j}) \} \cos \left(\frac{\tau \eta_{rj}}{\xi_{rj} \xi_{rj}} \right). \quad (3.67)$$

Desta forma, a solução ADO fica descrita para todos os possíveis casos de constantes de separação e para todas as regiões do problema.

3.3 Equação característica

A solução obtida na seção 3.2 apresenta $2NG$ coeficientes em cada uma das R regiões, ou seja, um total de $2NGR$ incógnitas. Com a utilização das condições de contorno e de continuidade entre meios obtém-se o mesmo número de equações. Das condições de continuidade tem-se

$$\Psi_r(\tau_r, \pm\mu_i) = \Psi_{r+1}(\tau_r, \pm\mu_i), \quad (3.68)$$

para $r = 1, 2, \dots, R - 1$, $i = 1, 2, \dots, N$ e para cada um dos G grupos. Isto gera $2NG(R - 1)$ equações. A partir das condições de contorno em $\tau = \tau_0$ e em $\tau = \tau_R$ obtém-se as demais $2NG$ equações.

$$\Psi_1(0, +\mu_i) = \rho\Psi_1(0, -\mu_i) \quad (3.69)$$

e

$$\Psi_R(\tau_R, -\mu_i) = \rho\Psi_R(\tau_R, +\mu_i), \quad (3.70)$$

onde usa-se $\rho = 0$ para contorno do tipo vácuo e $\rho = 1$ para contorno do tipo reflexivo. Com isso gera-se o sistema homogêneo de equações lineares

$$\mathbf{E}\mathbf{X} = \mathbf{0}, \quad (3.71)$$

onde a matriz \mathbf{E} é da forma

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} U_1 & V_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ R_1 & S_1 & -U_2 & -V_2 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ V_1 & U_1 & -S_2 & -R_2 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & R_2 & S_2 & -U_3 & -V_3 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & V_2 & U_2 & -S_3 & -R_3 & 0 & \dots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & R_{R-1} & S_{R-1} & -U_R & -V_R \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & V_{R-1} & U_{R-1} & -S_R & -R_R \\ 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & V_R & U_R \end{bmatrix} \quad (3.72)$$

para condições de contorno do tipo vácuo em ambas as extremidades ou,

$$\mathbf{F}\mathbf{X} = \mathbf{0}, \quad (3.73)$$

onde a matriz \mathbf{F} é da forma

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix}
U_1 - S_1 & V_1 - R_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
R_1 & S_1 & -U_2 & -V_2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
V_1 & U_1 & -S_2 & -R_2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
0 & 0 & R_2 & S_2 & -U_3 & -V_3 & \dots & 0 & 0 \\
0 & 0 & V_2 & U_2 & -S_3 & -R_3 & \dots & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & \dots & 0 & 0 & R_{R-1} & S_{R-1} & -U_R & -V_R \\
0 & 0 & \dots & 0 & 0 & V_{R-1} & U_{R-1} & -S_R & -R_R \\
0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & V_R & U_R
\end{bmatrix} \quad (3.74)$$

para condições do tipo reflexiva à esquerda e vácuo à direita, ou

$$\mathbf{GX} = 0 \quad (3.75)$$

onde a matriz \mathbf{G} é da forma

$$\mathbf{G} = \begin{bmatrix}
U_1 - S_1 & V_1 - R_1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
R_1 & S_1 & -U_2 & -V_2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
V_1 & U_1 & -S_2 & -R_2 & 0 & 0 & \dots & 0 & 0 \\
0 & 0 & R_2 & S_2 & -U_3 & -V_3 & \dots & 0 & 0 \\
0 & 0 & V_2 & U_2 & -S_3 & -R_3 & \dots & 0 & 0 \\
\vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\
0 & 0 & \dots & 0 & 0 & R_{R-1} & S_{R-1} & -U_R & -V_R \\
0 & 0 & \dots & 0 & 0 & V_{R-1} & U_{R-1} & -S_R & -R_R \\
0 & 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 0 & R_R - V_R & S_R - U_R
\end{bmatrix} \quad (3.76)$$

para condições de contorno do tipo reflexiva em ambas as extremidades. E o vetor \mathbf{X} é

$$\mathbf{X} = \begin{bmatrix} \mathbf{A}_1 \\ \mathbf{B}_1 \\ \mathbf{A}_2 \\ \mathbf{B}_2 \\ \vdots \\ \mathbf{A}_R \\ \mathbf{B}_R \end{bmatrix}. \quad (3.77)$$

Os vetores \mathbf{A}_r e \mathbf{B}_r , $r = 1, 2, \dots, R$, são de dimensão NG e suas componentes são os coeficientes $A_{r,j}$ e $B_{r,j}$ correspondentes. Além disso, as submatrizes \mathbf{U}_r , \mathbf{R}_r , \mathbf{S}_r e \mathbf{V}_r são dadas por

$$\mathbf{U}_r = \Phi_r^+(\xi_{r,j}), \quad (3.78)$$

$$\mathbf{R}_r = \Phi_r^+(\xi_{r,j}) e^{-(\tau_r - \tau_{r-1})/\xi_{r,j}}, \quad (3.79)$$

$$\mathbf{S}_r = \Phi_r^-(\xi_{r,j}) \quad (3.80)$$

e

$$\mathbf{V}_r = \Phi_r^-(\xi_{r,j}) e^{-(\tau_r - \tau_{r-1})/\xi_{r,j}}. \quad (3.81)$$

Os sistemas lineares homogêneos $\mathbf{E}\mathbf{X} = \mathbf{0}$, $\mathbf{F}\mathbf{X} = \mathbf{0}$ ou $\mathbf{G}\mathbf{X} = \mathbf{0}$ possuem solução diferente da trivial somente se o determinante da matriz correspondente for nulo. Assim, a equação característica $\det\mathbf{E} = 0$, $\det\mathbf{F} = 0$ ou $\det\mathbf{G} = 0$ produz a condição para encontrar o valor de k_{eff} , que equivale ao maior valor de k em (2.29), que possui um significado físico para a solução da equação (2.27), conforme [23].

4 RESULTADOS NUMÉRICOS PARA A ABORDAGEM 1

No capítulo 3 desenvolveu-se a solução do problema de cálculo do fator de multiplicação efetivo, k_{eff} , sob a abordagem do método ADO, juntamente com o cálculo de um determinante, em geometria unidimensional e para o caso multi-grupo de energia. Neste capítulo apresentam-se simulações numéricas com base na metodologia proposta.

Para implementação computacional, em todos os casos usou-se Linguagem Fortran com o uso do pacote de subrotinas LAPACK (Linear Algebra Package). Este pacote tem o propósito de fornecer rotinas para a solução de problemas relacionados a Álgebra Linear, tais como resolução de sistemas de equações lineares, entre outros cálculos relacionados. Em todos os casos pode-se trabalhar com matrizes reais ou complexas e em precisão simples ou dupla. O LAPACK foi elaborado para substituir os pacotes EISPACK e LINPACK com a finalidade de atingir uma maior eficiência, conforme descrito em [3], adicionando novas funcionalidades e integrando os dois conjuntos de algoritmos em um pacote unificado. Para obtenção dos resultados numéricos foi usado um computador Intel Core i3 2.0GHz com 4Gb de memória RAM.

Neste trabalho, o problema de autovalor (3.30) ou (3.31) gerado pela solução ADO da equação de transporte de nêutrons é resolvido usando-se a subrotina DGEEV, que calcula os autovalores e autovetores de uma matriz real e não simétrica de ordem n .

Diferentemente de abordagens existentes na literatura, que usaram o método da bissecção [16, 24], neste trabalho o cálculo do fator de multiplicação efetivo, k_{eff} , foi realizado usando-se o método da secante [21] com estimativas iniciais

obtidas de acordo com [43], em que escolhe-se como estimativa inferior um valor 20% abaixo do valor esperado de k_{eff} e para a estimativa superior, um valor 20% acima.

O determinante das matrizes \mathbf{E} , \mathbf{F} e \mathbf{G} , definidas na seção 3.3, é obtido através da subrotina DGETRF, a qual calcula a fatoração LU de uma matriz geral $A_{m \times n}$ usando pivotamento parcial com trocas de linhas. A fatoração tem a forma $A = P \times L \times U$ onde P é a matriz de permutações. O critério de parada utilizado é o desvio relativo entre duas estimativas sucessivas de k_{eff} menor do que determinado valor, o qual é especificado em cada problema teste.

Seguindo essa abordagem examinam-se três problemas teste descritos a seguir.

4.1 PROBLEMA 1: Placa plana homogênea - 2 grupos de energia

Este problema foi resolvido por Rulko [82], utilizando o código TWO-DANT, e posteriormente por Batistela [16], pelo método LTS_N . Considera-se uma placa plana homogênea de espessura $a = 15 \text{ cm}$, espalhamento isotrópico e condições de contorno do tipo vácuo em ambas as extremidades. O problema é avaliado para três casos do parâmetro $\sigma_{s,21}$, a saber, 0.1, 0.4 e 0.7. Os demais parâmetros encontram-se na Tabela 4.1, onde as seções de choque são dadas em cm^{-1} .

Tabela 4.1: Parâmetros para o PROBLEMA 1

| $\sigma_{t,1}$ | $\sigma_{t,2}$ | $\sigma_{s,11}$ | $\sigma_{s,12}$ | $\sigma_{s,22}$ | $\nu\sigma_{f,1}$ | $\nu\sigma_{f,2}$ |
|----------------|----------------|-----------------|-----------------|-----------------|-------------------|-------------------|
| 1.0 | 1.0 | 0.3 | 0.0 | 0.99 | 0.0025 | 0.015 |

Para os três valores testados do parâmetro $\sigma_{s,21}$ observou-se, entre as NG constantes de separação obtidas, apenas uma imaginária pura, a qual nomeia-se $\xi_1 = i\eta_1$, sendo as demais reais. De acordo com a formulação desenvolvida no

capítulo 3, a solução deste problema é escrita na forma

$$\begin{aligned} \Psi(\tau, +\mu_i) = & A_1 \left[\Re \{ \Phi^+(\xi_1) \} \cos \left(\frac{\tau}{\eta_1} \right) - \Im \{ \Phi^+(\xi_1) \} \sin \left(\frac{\tau}{\eta_1} \right) \right] + \\ & + B_1 \left[\Re \{ \Phi^+(\xi_1) \} \sin \left(\frac{\tau}{\eta_1} \right) + \Im \{ \Phi^+(\xi_1) \} \cos \left(\frac{\tau}{\eta_1} \right) \right] + \\ & + \sum_{j=2}^{NG} \left[A_j \Phi^+(\xi_j) e^{-\tau/\xi_j} + B_j \Phi^-(\xi_j) e^{-(a-\tau)/\xi_j} \right] \end{aligned} \quad (4.1)$$

e

$$\begin{aligned} \Psi(\tau, -\mu_i) = & A_1 \left[\Re \{ \Phi^-(\xi_1) \} \cos \left(\frac{\tau}{\eta_1} \right) - \Im \{ \Phi^-(\xi_1) \} \sin \left(\frac{\tau}{\eta_1} \right) \right] + \\ & + B_1 \left[\Re \{ \Phi^-(\xi_1) \} \sin \left(\frac{\tau}{\eta_1} \right) + \Im \{ \Phi^-(\xi_1) \} \cos \left(\frac{\tau}{\eta_1} \right) \right] + \\ & + \sum_{j=2}^{NG} \left[A_j \Phi^-(\xi_j) e^{-\tau/\xi_j} + B_j \Phi^+(\xi_j) e^{-(a-\tau)/\xi_j} \right]. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Aplicando-se as condições de contorno $\Psi(0, +\mu_i) = 0$ e $\Psi(a, -\mu_i) = 0$, com $a = 15 \text{ cm}$, obtém-se:

$$A_1 \Re \{ \Phi^+(\xi_1) \} + B_1 \Re \{ \Phi^+(\xi_1) \} + \sum_{j=2}^{NG} [A_j \Phi^+(\xi_j) + B_j \Phi^-(\xi_j) e^{-a/\xi_j}] = 0 \quad (4.3)$$

e

$$\begin{aligned} & A_1 \left[\Re \{ \Phi^-(\xi_1) \} \cos \left(\frac{a}{\eta_1} \right) - \Im \{ \Phi^-(\xi_1) \} \sin \left(\frac{a}{\eta_1} \right) \right] + \\ & + B_1 \left[\Re \{ \Phi^-(\xi_1) \} \sin \left(\frac{a}{\eta_1} \right) + \Im \{ \Phi^-(\xi_1) \} \cos \left(\frac{a}{\eta_1} \right) \right] + \\ & + \sum_{j=2}^{NG} [A_j \Phi^-(\xi_j) e^{-\frac{a}{\xi_j}} + B_j \Phi^+(\xi_j)] = 0. \end{aligned} \quad (4.4)$$

Inicialmente, constroi-se a matriz dos coeficientes para as equações (4.3) e (4.4). Em seguida, escolhem-se as duas estimativas iniciais para k e então aplica-se o método da secante para se obter o valor de k que anula o determinante dessa matriz.

Para o caso em que $\sigma_{s,21} = 0.1$ as estimativas iniciais foram 0.08 e 0.12; para $\sigma_{s,21} = 0.4$ adotou-se 0.30 e 0.46; e para $\sigma_{s,21} = 0.7$, adotou-se 0.54 e 0.80.

Nota-se que a ordem de quadratura N representa $2N$ pontos no intervalo $[-1, 1]$ para o método ADO, enquanto que para os métodos LTS_N , [16], e TWODANT, [82], são N pontos para o mesmo intervalo. Por esse motivo a comparação dos resultados é feita com ordem N para o ADO e $2N$ para LTS_N e TWODANT.

Os resultados obtidos para os três casos, considerando-se o desvio relativo entre duas estimativas sucessivas para k , para cada valor de N , menor do que 10^{-8} , encontram-se na Tabela 4.2. Na mesma tabela e na Tabela e 4.3 listam-se resultados obtidos na literatura para fins de comparação.

Tabela 4.2: Resultados para o PROBLEMA 1: ADO_N e LTS_{2N}

| N | $\sigma_{s,21} = 0.1$ | | $\sigma_{s,21} = 0.4$ | | $\sigma_{s,21} = 0.7$ | |
|-----|-----------------------|-----------------|-----------------------|-----------------|-----------------------|-----------------|
| | ADO_N | LTS_{2N} [16] | ADO_N | LTS_{2N} [16] | ADO_N | LTS_{2N} [16] |
| 2 | 0.098788 | 0.099983 | 0.384618 | 0.382617 | 0.670448 | 0.668283 |
| 4 | 0.098787 | 0.099812 | 0.384615 | 0.384274 | 0.670444 | 0.670026 |
| 6 | 0.098787 | - | 0.384614 | 0.384526 | 0.670441 | 0.670322 |
| 8 | 0.098787 | - | 0.384614 | - | 0.670441 | - |
| 24 | 0.098787 | - | 0.384614 | - | 0.670441 | - |

Tabela 4.3: Resultados para o PROBLEMA 1: ADO_N e $TWODANT_{2N}$

| N | $\sigma_{s,21} = 0.1$ | | $\sigma_{s,21} = 0.4$ | | $\sigma_{s,21} = 0.7$ | |
|-----|-----------------------|----------------|-----------------------|----------------|-----------------------|----------------|
| | ADO_N | TD_{2N} [82] | ADO_N | TD_{2N} [82] | ADO_N | TD_{2N} [82] |
| 24 | 0.098787 | 0.09879 | 0.384614 | 0.38461 | 0.670441 | 0.67043 |

Na Tabela 4.2 observa-se que o método ADO consegue fixar 6 casas decimais para o valor de k a partir de $N = 4$, para os três valores testados de $\sigma_{s,21}$.

Os resultados obtidos possuem 4 ou 5 casas decimais de concordância com a resolução proposta por Rulko [82] para $N = 48$ e até três casas decimais de concordância com o método LTS_N , proposto por Batistela [16]. De modo que o método ADO obteve a solução para valores menores da ordem de quadratura quando comparado aos demais métodos.

4.2 PROBLEMA 2: Placa plana heterogênea - 2 grupos de energia

Inicialmente proposto por Häggblom et al. [49] e posteriormente resolvido por Ackroyd et al. [2] utilizando o código ANISN, Lee et al. [58] e por Caldeira e Garcia [24], ambos usando o método P_N . Este problema é dividido em dois casos: primeiro com uma placa de controle inserida, caso em que há três regiões. No segundo caso, sem a placa de controle, há duas regiões. Em ambos os casos a região 1 corresponde ao combustível, a região 2 ao moderador e a região 3, se houver, a placa de controle. As condições de contorno são reflexivas em ambas as extremidades para os dois casos. A Figura 4.1 e a Figura 4.2 mostram uma representação geométrica para as duas situações.

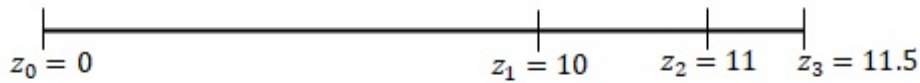


Figura 4.1: Representação geométrica do PROBLEMA 2 com placa de controle



Figura 4.2: Representação geométrica do PROBLEMA 2 sem placa de controle

A Tabela 4.5 apresenta os dados de seções de choque macroscópicas e o espectro de fissão para as três regiões. Na sequência, as Tabelas 4.6 e 4.7 apresentam os resultados obtidos neste trabalho comparando-os com os apresentados em [24] e [57]. Novamente, fez-se uso do método da secante no processo iterativo do cálculo de k considerando-se como critério de parada um erro relativo menor do que 10^{-8} para dois valores sucessivos de k , para cada N . As estimativas iniciais para o caso

com a placa de controle foram 0.25 e 0.39 e, para o caso sem a placa de controle, 0.45 e 0.68.

Tabela 4.4: Parâmetros para o PROBLEMA 2

| Constantes de grupo | Combustível ($r = 1$) | Água ($r = 2$) | Placa de controle ($r = 3$) |
|---------------------|----------------------------|---------------------|----------------------------------|
| $\sigma_{t,1}^r$ | 0.3 | 0.401 | 0.8 |
| $\sigma_{t,2}^r$ | 1.0 | 1.3 | 2.0 |
| $\sigma_{s,11}^r$ | 0.27 | 0.32 | 0.6 |
| $\sigma_{s,12}^r$ | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| $\sigma_{s,21}^r$ | 0.01 | 0.08 | 0.0 |
| $\sigma_{s,22}^r$ | 0.9 | 1.29 | 0.1 |
| $(\nu\sigma_f)_1^r$ | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| $(\nu\sigma_f)_2^r$ | 0.12 | 0.0 | 0.0 |
| χ_1^r | 1.0 | - | - |
| χ_2^r | 0.0 | - | - |

Tabela 4.5: Resultados para o PROBLEMA 2 com placa de controle: ADO_N e P_{2N-1}

| N | ADO_N | P_{2N-1} [24] | P_{2N-1} [57] |
|-----|----------|-----------------|-----------------|
| 2 | 0.328813 | 0.327334 | 0.327334 |
| 4 | 0.328169 | 0.328166 | 0.328166 |
| 6 | 0.328181 | 0.328188 | 0.328188 |
| 8 | 0.328181 | 0.328184 | 0.328244 |
| 50 | 0.328181 | 0.328181 | - |
| 100 | 0.328181 | 0.328181 | - |
| 150 | 0.328181 | 0.328181 | - |
| 200 | 0.328181 | 0.328181 | - |

Para o PROBLEMA 2, os resultados obtidos pelo método ADO, a medida que N cresce, apresentam um maior número de dígitos significativos em concordância, comparado com o método P_N . O método ADO obteve os mesmos valores finais de k para valores menores da ordem de quadratura N . Para o caso com placa de controle a Tabela 4.5 mostra que os resultados convergem a partir de $N = 6$ com seis casas decimais de concordância, enquanto que o método P_N alcança essa mesma precisão a partir de $N = 99$. Já para o caso sem a placa de controle a Tabela 4.6 mostra a convergência dos valores para k com seis casas decimais de precisão a

Tabela 4.6: Resultados para o PROBLEMA 2 sem placa de controle: ADO_N e P_{2N-1}

| N | ADO_N | P_{2N-1} [24] | P_{2N-1} [57] |
|-----|----------|-----------------|-----------------|
| 2 | 0.555676 | 0.569479 | 0.569479 |
| 4 | 0.565216 | 0.566833 | 0.566833 |
| 6 | 0.565957 | 0.566462 | 0.566462 |
| 8 | 0.566109 | 0.566342 | 0.566342 |
| 30 | 0.566189 | - | - |
| 50 | 0.566189 | 0.566193 | - |
| 100 | 0.566189 | 0.566190 | - |
| 150 | 0.566189 | 0.566189 | - |
| 200 | 0.566189 | 0.566189 | - |

partir de $N = 30$, enquanto que o método P_N atinge essa mesma precisão a partir de $N = 299$.

4.3 PROBLEMA 3: Placa plana heterogênea - 10 grupos de energia

Este problema foi proposto por Batistela et al. [17] e resolvido pelo método LTS_N . Inicialmente formulado como sendo composto por três regiões, das quais a primeira e a terceira compostas pelo material 1 e de espessura 20 *cm* cada e a segunda região, de espessura 15 *cm*, é composta pelo material 2 (material físsil). As condições de contorno em ambas as extremidades são do tipo vácuo. Subsequentemente, o mesmo problema foi considerado em [24] por Caldeira e Garcia, porém, formulado como uma placa composta de material físsil (material 2) de $z_0 = 0$ a $z_1 = 7.5$ *cm* e pelo material 1 de $z_1 = 7.5$ *cm* a $z_2 = 27.5$ *cm* com condição de contorno reflexiva em $z_0 = 0$ e vácuo em $z_2 = 27.5$ *cm*. Neste trabalho adota-se a formulação proposta em [24], conforme Figura 4.3, pois nesse caso o sistema gerado pelas condições de contorno e continuidade entre as regiões terá $2NG$ equações a menos em relação a caracterização adotada em Batistela et al. [17].

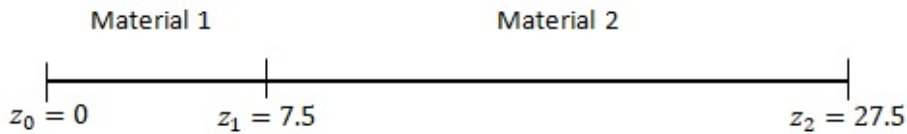


Figura 4.3: Representação geométrica do PROBLEMA 3

Os dados de seções de choque macroscópica e dos espectros de fissão deste problema, para as regiões 1 e 2, encontram-se nas Tabelas 4.7 a 4.9, conforme definidos em Batistela et al. [17]. Convém notar que em Caldeira e Garcia [24] foi identificada uma inconsistência nesses dados. A seção de choque de espalhamento do grupo 1 para a região 2 (soma da primeira linha da Tabela 4.9) excede a seção de choque total correspondente, $\sigma_{t,1}^2$, em 0.007322 cm^{-1} . Apesar disso, os dados utilizados tanto neste trabalho quanto em [24] foram os apresentados em Batistela et al. [17].

Em Batistela et al. [17] são apresentados resultados apenas para $N \leq 8$, os quais são mostrados na Tabela 4.10 juntamente com os resultados obtidos pelo método ADO desenvolvido aqui e pelo método P_N em [24].

Durante a implementação desse problema observou-se que para baixas ordens de quadratura, $N \leq 8$, as constantes de separação obtidas através do método ADO são todas reais na região 2 e, na região 1, uma constante de separação imaginária pura ocorreu sendo as demais reais. Para ordens mais altas, $N \geq 10$, a região 1 sempre apresenta uma constante de separação imaginária pura enquanto as demais são reais ou pares de números complexos conjugados. Da mesma forma, na região 2, surgem constantes de separação dadas por pares de números complexos conjugados além das reais. Além disso, ambas as regiões apresentam número crescente de pares complexos conjugados para as constantes de separação com o aumento de N . Para este problema o critério de parada adotado foi o erro relativo entre dois valores sucessivos de k menor do que 10^{-9} .

Tabela 4.7: Dados de seção de choque total e espectro de fissão do PROBLEMA 3

| g | $\sigma_{t,g}^1$ | $\sigma_{t,g}^2$ | $(\nu\sigma_f)_g^1$ | χ_g^1 |
|-----|------------------|------------------|---------------------|------------|
| 1 | 0.2245876 | 0.691908 | 0.0009735 | 0.07 |
| 2 | 0.5529316 | 1.163784 | 0.001153 | 0.12 |
| 3 | 0.835548 | 1.146798 | 0.01756 | 0.202 |
| 4 | 1.4625101 | 1.281052 | 0.238 | 0.603 |
| 5 | 0.12507 | 0.35936 | 0.00081 | 0.0017 |
| 6 | 0.26377 | 0.2932 | 0.0035 | 0.001 |
| 7 | 0.0.644427 | 0.52023 | 0.0123 | 0.0006 |
| 8 | 0.8241506 | 0.71652 | 0.024 | 0.0004 |
| 9 | 0.28768 | 0.43845 | 0.005 | 0.0013 |
| 10 | 0.197631 | 0.07911 | 0.0009 | 0.0 |

Tabela 4.8: Dados de seção de choque de espalhamento $\sigma_{s,gg'}^r$ em $r = 1$ para o PROBLEMA 3

| g' | $g = g' - 1$ | $g = g'$ | $g = g' + 1$ | $g = g' + 2$ | $g = g' + 3$ | $g = g' + 4$ |
|------|--------------|----------|--------------|--------------|--------------|--------------|
| 1 | 0.0 | 0.16094 | 0.05824 | 0.003059 | 0.00123 | 0.00042 |
| 2 | 0.0325 | 0.45088 | 0.066442 | 0.00235 | 0.0 | 0.0 |
| 3 | 0.1234 | 0.63597 | 0.057518 | 0.0021 | 0.001 | 0.0 |
| 4 | 0.0006101 | 1.2839 | 0.0021 | 0.0003 | 0.0 | 0.0 |
| 5 | 0.001 | 0.07421 | 0.02176 | 0.0045 | 0.0021 | 0.0 |
| 6 | 0.0198 | 0.2019 | 0.02857 | 0.0104 | 0.0 | 0.0 |
| 7 | 0.1743 | 0.3689 | 0.046377 | 0.0444 | 0.01 | 0.0 |
| 8 | 0.0004426 | 0.30826 | 0.007038 | 0.5011 | 0.0 | 0.0 |
| 9 | 0.0938 | 0.1271 | 0.04561 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 10 | 0.000201 | 0.19296 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |

Para o PROBLEMA 3 observa-se na Tabela 4.11 que a partir de $N = 6$ o método ADO fixa 7 casas decimais de concordância, coincidindo com o valor obtido pelo método DS_N a partir de $N = 20$. Os métodos P_N e S_N fixam 6 casas decimais a partir de P_{199} e S_{200} e sete casas decimais a partir de P_{299} e S_{300} .

Na Tabela 4.11 comparam-se resultados entre os métodos ADO, P_N , S_N e DS_N para ordens mais elevadas de N , observando-se que o método DS_N é análogo ao método ADO em relação ao número de ordenadas discretas no intervalo $[-1, 1]$.

Tabela 4.9: Dados de seção de choque de espalhamento $\sigma_{s,ij}^r$ em $r = 2$ para o PROBLEMA 3

| j | $i = j - 1$ | $i = j$ | $i = j + 1$ | $i = j + 2$ | $i = j + 3$ | $i = j + 4$ |
|-----|-------------|---------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| 1 | 0.0 | 0.24413 | 0.1741 | 0.051 | 0.2 | 0.03 |
| 2 | 0.174 | 0.62077 | 0.224 | 0.105 | 0.04 | 0.0 |
| 3 | 0.043 | 0.83158 | 0.152 | 0.09 | 0.03 | 0.0 |
| 4 | 0.074 | 1.1125 | 0.09 | 0.001 | 0.0 | 0.0 |
| 5 | 0.084 | 0.19286 | 0.0484 | 0.01 | 0.0 | 0.0 |
| 6 | 0.075 | 0.11588 | 0.0751 | 0.02 | 0.0 | 0.0 |
| 7 | 0.024 | 0.3571 | 0.123 | 0.007 | 0.0 | 0.0 |
| 8 | 0.077 | 0.4542 | 0.179 | 0.005 | 0.0 | 0.0 |
| 9 | 0.065 | 0.2742 | 0.0987 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |
| 10 | 0.0004 | 0.07421 | 0.0 | 0.0 | 0.0 | 0.0 |

Tabela 4.10: Resultados para o PROBLEMA 3, para ordem $N < 20$

| N | ADO_N | P_{2N-1} [24] | LTS_{2N} [17] |
|-----|-----------|-----------------|-----------------|
| 1 | - | 1.09206 | 1.09206 |
| 2 | 1.0965420 | 1.09615 | 1.09615 |
| 3 | - | 1.09637 | 1.09637 |
| 4 | 1.0965049 | 1.09643 | 1.09651 |
| 5 | - | 1.09646 | - |
| 6 | 1.0965042 | - | - |
| 8 | 1.0965042 | - | - |
| 10 | 1.0965042 | - | - |

A Tabela 4.11 mostra que o método ADO aplicado ao PROBLEMA 3 obtém os mesmos valores finais para k comparado aos demais métodos para uma ordem de quadratura menor.

De modo geral, a resolução dos problemas 1, 2 e 3 pelo método ADO mostrou resultados que estão de acordo com os apresentados na literatura. Sendo que foram considerados problemas multigrupo tanto em meio homogêneo quanto em meios heterogêneos e considerando-se condições de contorno do tipo vácuo ou reflexiva.

Tendo-se analisado o cálculo do fator de multiplicação através de uma abordagem de cálculo do determinante com sucesso, a seguir apresenta-se uma pro-

Tabela 4.11: Resultados para o PROBLEMA 3, para ordem $N \geq 20$

| N | ADO_N | P_{2N-1} [24] | S_{2N} [24] | DS_N [24] |
|-----|-----------|-----------------|---------------|-------------|
| 10 | 1.0965042 | 1.0964924 | 1.0964924 | - |
| 20 | 1.0965042 | 1.0965012 | 1.0965012 | 1.0965042 |
| 50 | 1.0965042 | 1.0965037 | 1.0965037 | 1.0965042 |
| 100 | 1.0965042 | 1.0965040 | 1.0965040 | 1.0965042 |
| 150 | - | 1.0965041 | 1.0965041 | 1.0965042 |
| 250 | - | 1.0965041 | 1.0965041 | 1.0965042 |

posta de análise através de esquemas iterativos que seguem a ideia do Método da Potência conhecido na literatura [21].

5 K-AUTOVALOR VIA ESQUEMA ITERATIVO

Neste capítulo apresenta-se como alternativa de solução para o problema de cálculo do fator de multiplicação efetivo, k_{eff} , a associação do método ADO com um esquema iterativo. A proposta é considerar o termo de fissão na equação de transporte como sendo uma fonte externa, ou seja, correspondente a uma parte não homogênea da equação, a qual será atualizada a cada iteração. Uma das vantagens desse método é o fato dos autovalores λ_r serem todos reais na parte homogênea da solução, mesmo na região em que ocorre a fissão, visto que este termo é considerado a parte.

5.1 Processo iterativo para o cálculo de k

Para o caso unidimensional e monoenergético, com espalhamento isotrópico e simetria azimutal, o problema de criticalidade é descrito pela equação

$$\mu \frac{d}{dz} \Psi(z, \mu) + \sigma_t(z) \Psi(z, \mu) = \frac{\sigma_s(z)}{2} \int_{-1}^1 \Psi(z, \mu') d\mu' + \frac{1}{k} \frac{\nu \sigma_f(z)}{2} \int_{-1}^1 \Psi(z, \mu') d\mu' \quad (5.1)$$

e pelas condições de contorno, que podem ser do tipo vácuo ou reflexiva.

Definindo-se os operadores \mathbf{T} , \mathbf{S} e \mathbf{F}

$$\mathbf{T}\Psi \equiv \mu \frac{d}{dz} \Psi(z, \mu) + \sigma_t(z) \Psi(z, \mu), \quad (5.2)$$

$$\mathbf{S}\Psi \equiv \frac{\sigma_s(z)}{2} \int_{-1}^1 \Psi(z, \mu') d\mu', \quad (5.3)$$

$$\mathbf{F}\Psi \equiv \frac{\nu(z) \sigma_f(z)}{2} \int_{-1}^1 \Psi(z, \mu') d\mu', \quad (5.4)$$

a equação (5.1) é reescrita como

$$\mathbf{T}\Psi = \mathbf{S}\Psi + \frac{1}{k} \mathbf{F}\Psi. \quad (5.5)$$

Assim, para $k \cong k^{(0)}$ e $\mathbf{F}\Psi^{(0)} \cong S^{(0)}$, resolve-se a equação

$$(\mathbf{T} - \mathbf{S}) \Psi^{(1)} = \frac{1}{k^{(0)}} S^{(0)}. \quad (5.6)$$

O resultado para Ψ , indicado por $\Psi^{(1)}$, será usado para o cálculo do termo de fonte da próxima iteração como

$$S^{(1)} = \mathbf{F}\Psi^{(1)} = \frac{\nu(z)\sigma_f(z)}{2} \int_{-1}^1 \Psi^{(1)}(z, \mu') d\mu'. \quad (5.7)$$

Considerando que também pode-se gerar estimativas atualizadas para k , determina-se uma solução $\Psi^{(2)}$ resolvendo-se

$$(\mathbf{T} - \mathbf{S}) \Psi^{(2)} = \frac{1}{k^{(1)}} S^{(1)}. \quad (5.8)$$

A solução $\Psi^{(2)}$ obtida de (5.8) é usada para gerar um novo termo de fonte e assim por diante. De modo geral, obtém-se a $\Psi^{(n+1)}$ resolvendo-se

$$(\mathbf{T} - \mathbf{S}) \Psi^{(n+1)} = \frac{1}{k^{(n)}} S^{(n)}, \quad (5.9)$$

onde

$$S^{(n)} = \mathbf{F}\Psi^{(n)}. \quad (5.10)$$

Para as estimativas de k faz-se um tratamento análogo ao usado pelo Método da Potência, como descrito em [37]. Considerando que o esquema iterativo aplicado apresenta um resultado satisfatório, para um valor de n suficientemente grande deve-se ter

$$(\mathbf{T} - \mathbf{S}) \Psi^{(n+1)} \cong \frac{1}{k^{(n+1)}} \mathbf{F}\Psi^{(n+1)}. \quad (5.11)$$

Para um valor finito de n é provável que $\Psi^{(n+1)}$ e $k^{(n+1)}$ não satisfaçam a equação (5.5) precisamente. Porém, seguindo [37], integra-se a equação (5.11) sobre a variável espacial para se obter uma estimativa satisfatória para $k^{(n+1)}$ dada por

$$k^{(n+1)} \cong \frac{\int \mathbf{F}\Psi^{(n+1)} dz}{\int (\mathbf{T} - \mathbf{S}) \Psi^{(n+1)} dz}. \quad (5.12)$$

A partir da solução do sistema para a_i e b_i obtém-se $\Psi_p^+(\tau) = [a_1 \dots a_N]^T$ e $\Psi_p^-(\tau) = [b_1 \dots b_N]^T$. Portanto, a soma das soluções homogênea e particular resulta em

$$\Psi_r(\tau, \pm\mu_i) = \sum_{j=1}^N \left[A_j \Phi(\xi_j, \pm\mu_i) e^{\frac{-(\tau-\tau_{r-1})}{\xi_j}} + B_j \Phi(\xi_j, \mp\mu_i) e^{\frac{-(\tau_r-\tau)}{\xi_j}} \right] + \Psi_r^p(\tau, \pm\mu_i). \quad (5.16)$$

Aplicando-se as condições de contorno, que podem ser tanto do tipo vácuo quanto do tipo reflexiva, e as condições de continuidade entre meios, como descrita pela equação (3.68), determinam-se os coeficientes A_j e B_j . Em seguida, determina-se $k^{(1)}$ a partir da fórmula (5.13), onde as integrais são calculadas analiticamente.

Para a próxima iteração deve-se calcular as componentes do vetor $S^{(1)}$, dado por

$$S^{(1)} = \mathbf{F}\Psi^{(1)} = \frac{\nu\sigma_f}{2} \int_{-1}^1 \Psi^{(1)}(\tau, \mu') d\mu' \quad (5.17)$$

ou, em ordenadas discretas,

$$S^{(1)} = \frac{\nu\sigma_f}{2} \sum_{i=1}^N \omega_i [\Psi^{(1)}(\tau, +\mu_i) + \Psi^{(1)}(\tau, -\mu_i)]. \quad (5.18)$$

A expressão para o vetor $S^{(1)}$ dada pela equação (5.18) depende da variável τ e, além disso, $S^{(1)}$ deve ter $2N$ componentes. Assim, propõe-se o cálculo das coordenadas do vetor $S^{(1)}$ de duas formas diferentes. Como primeira opção, chamada de CASO 1, o fluxo escalar em (5.18) é calculado em $2N$ pontos distintos no interior do intervalo correspondente a região em que ocorre a fissão, de modo que cada componente i do vetor $S^{(1)}$ é dada por

$$S^{(1)}(i) = \frac{\nu\sigma_f}{2} \sum_{j=1}^N \omega_j [\Psi^{(1)}(\tau_i, \mu_j) + \Psi^{(1)}(\tau_i, -\mu_j)], \quad (5.19)$$

para $i = 1, \dots, 2N$. Para a segunda opção, chamada de CASO 2, divide-se a região em $2N$ subintervalos e calcula-se o fluxo escalar médio correspondente em cada um

dos subintervalos gerados. Nesse caso, as componentes de $S^{(1)}$ são dadas por

$$S^{(1)}(i) = \frac{1}{h} \left[\frac{\nu\sigma_f}{2} \int_{-1}^1 \left\{ \int_{\tau_{i-1}}^{\tau_i} \Psi^{(1)}(\tau, \mu') d\tau \right\} d\mu' \right], \quad (5.20)$$

onde h é igual a medida de cada subintervalo da região e τ_{i-1} e τ_i são as extremidades do subintervalo, para $i = 1, \dots, 2N$.

Com a estimativa para $S^{(1)}$ definida, determina-se a solução particular através do sistema (5.15). Em seguida, calculam-se os coeficientes A_j e B_j e então, a estimativa $k^{(2)}$ para o valor de k_{eff} . Apesar de outras abordagens para a escolha das componentes da fonte terem sido testadas, estas duas mostraram resultados mais consistentes. Por isso, segue-se esse procedimento para as demais iterações até que determinado critério de parada seja atingido.

No capítulo 6 adota-se essa metodologia para o cálculo do fator de multiplicação efetivo em problemas teste considerando-se as duas possibilidades de estimativas apresentadas para $S^{(n)}(i)$.

6 RESULTADOS NUMÉRICOS PARA A ABORDAGEM 2

A metodologia apresentada no capítulo 5 será usada para a resolução de três problemas teste, todos eles para nêutrons monoenergéticos e com espalhamento isotrópico. Esses problemas já foram resolvidos usando-se o método ADO e serão comparados com os respectivos resultados obtidos, de modo que o desvio relativo é calculado entre o resultado pelo método ADO e o resultado obtido na última iteração com o método da abordagem 2.

6.1 PROBLEMA 4: Placa plana homogênea

Este problema foi apresentado por Stepanek [89] e consiste em determinar o valor do fator de multiplicação k em uma placa plana homogênea de espessura 10 cm , com espalhamento isotrópico, condições de contorno do tipo vácuo em ambas as extremidades e com parâmetros $\sigma_t = 1,0\text{ cm}^{-1}$, $\sigma_{s0} = 0,92\text{ cm}^{-1}$ e $\nu\sigma_f = 0,1\text{ cm}^{-1}$.

Para as estimativas iniciais considera-se $k^{(0)} = 1$ pois, a priori, este é o valor para o qual o reator está em estado crítico e $S^{(0)}$ um vetor unitário com cada componente igual a 1. Como critério de parada adotaram-se as seguintes três condições:

1. O módulo da diferença entre duas estimativas consecutivas de k deve ser menor do que 10^{-4} , ou seja, $|k^{(j+1)} - k^{(j)}| < 10^{-4}$;
2. O erro da fonte, calculado pela norma da diferença, para duas iterações consecutivas deve ser menor do que 10^{-4} , ou seja, $\|S^{(j+1)} - S^{(j)}\|_2 < 10^{-4}$;

3. A diferença entre as estimativas de k para dois valores consecutivos de N , N_1 e N_2 , deve ser menor do que 10^{-2} .

Os resultados obtidos para a estimativa de k , para o CASO 1 e para o CASO 2, encontram-se nas tabelas 6.1 e 6.2.

Tabela 6.1: Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 4: CASO 1

| $N \setminus$ Iteração | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | ADO | Desvio Relativo |
|------------------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|-----------------|
| 4 | 0.878505 | 0.950780 | 0.950799 | 0.950803 | 0.950803 | 0.953478 | 0.28% |
| 8 | 0.878500 | 0.934338 | 0.934355 | 0.934359 | 0.934359 | 0.953476 | 2.01% |
| 16 | 0.878499 | 0.925215 | 0.925231 | 0.925234 | 0.925234 | 0.953476 | 2.96% |

Tabela 6.2: Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 4: CASO 2

| $N \setminus$ Iteração | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | ADO | Desvio Relativo |
|------------------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|-----------------|
| 4 | 0.878505 | 0.897418 | 0.897408 | 0.897410 | 0.897410 | 0.953478 | 5.88% |
| 8 | 0.878500 | 0.907324 | 0.907331 | 0.907333 | 0.907333 | 0.953476 | 4.84% |
| 16 | 0.878499 | 0.911631 | 0.911642 | 0.911645 | 0.911645 | 0.953476 | 4.39% |

Os resultados obtidos para o PROBLEMA 4, tanto para o CASO 1 quanto para o CASO 2, apresentam uma casa decimal de concordância na comparação com os resultados pela metodologia ADO através do cálculo de determinante, como descrito no capítulo 3. Apesar do valor de k para $N = 4$ no CASO 1 ter duas casas de concordância a partir da segunda iteração, os critérios de parada adotados são atingidos apenas na quinta iteração e para $N = 16$, o que gera um desvio de 2.96% no CASO 1 e de 4.39% no CASO 2 em relação aos resultados de referência.

Nota-se que os valores obtidos na quarta e na quinta iteração são iguais, porém na quarta iteração o critério 2 ainda não é atingido. Portanto, mesmo se for considerado um critério mais fraco para o erro entre duas estimativas da fonte, $\| S^{(j+1)} - S^{(j)} \|_2 < 10^{-3}$ por exemplo, os resultados para k não ficam melhores.

Da mesma forma, se forem considerados critérios mais fortes, isso apenas aumenta o número de iterações, caso amplie-se os critérios 1 ou 2, ou o valor de N caso o critério 3 seja mais forte.

No Apêndice A apresenta-se uma tabela com os resultados do PROBLEMA 4 para N até 256 e para ambos os casos. Percebe-se que, mesmo aumentando o valor de N , a precisão dos resultados obtidos não melhora. Ainda, as estimativas para k e, conseqüentemente, o erro relativo, dos casos 1 e 2 tendem a se aproximar. Isso ocorre pois com o aumento de N o valor das componentes do vetor $S^{(i)}$ no CASO 1 tende a se aproximar do valor das componentes do vetor $S^{(i)}$ no CASO 2, já que o fluxo médio será calculado em um intervalo cada vez menor, ou seja, se aproximando cada vez mais do fluxo em um ponto.

6.2 PROBLEMA 5: Placa heterogênea com duas regiões

Considera-se uma placa plana formada por duas regiões e com condições de contorno do tipo reflexiva à esquerda e vácuo à direita. A região com material físsil é a região 1. Os parâmetros para este problema encontram-se na Tabela 6.3.

Tabela 6.3: Parâmetros para o PROBLEMA 5

| | Região 1 | Região 2 |
|-------------------------|----------|----------|
| Espessura (<i>cm</i>) | 5.0 | 5.0 |
| σ_t | 1.0 | 1.0 |
| σ_s | 0.5 | 0.9 |
| $\nu\sigma_f$ | 0.6 | 0.0 |

As estimativas iniciais para $k^{(0)}$ e $S^{(0)}$ e os critérios de parada são os mesmos usados no PROBLEMA 4. Os resultados obtidos para o CASO 1 e para o CASO 2 encontram-se nas Tabelas 6.4 e 6.5, respectivamente.

Para este problema foram necessárias 6 iterações para o CASO 1 e 5 iterações para o CASO 2 para que os critérios de parada fossem atingidos. Em

Tabela 6.4: Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 5: CASO 1

| $N \backslash$ Iteração | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | ADO | Desvio Relativo |
|-------------------------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|----------|-----------------|
| 4 | 1.14216 | 1.15807 | 1.14236 | 1.15751 | 1.15752 | 1.15752 | 1.158917 | 0.12% |
| 8 | 1.14216 | 1.15515 | 1.14259 | 1.15463 | 1.15464 | 1.15464 | 1.158916 | 0.37% |

Tabela 6.5: Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 5: CASO 2

| $N \backslash$ Iteração | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | ADO | Desvio Relativo |
|-------------------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|-----------------|
| 4 | 1.142165 | 1.147725 | 1.147491 | 1.147496 | 1.147496 | 1.158917 | 0.99% |
| 8 | 1.142165 | 1.149949 | 1.149595 | 1.149602 | 1.149602 | 1.158916 | 0.80% |

ambos os casos foi possível obter duas casas decimais de concordância para $N = 8$ em comparação com os resultados já estabelecidos pelo método ADO em associação com o cálculo de determinante. O erro relativo no primeiro caso ficou em 0.37% e no segundo, em 0.80%.

Da mesma forma que no PROBLEMA 4, uma mudança nos critérios de parada não trará vantagens significativas em relação aos resultados mostrados nas Tabelas 6.4 e 6.5. Por exemplo, aumentando-se o valor de N (conforme Tabelas A.3 e A.4 no Apêndice A) pode-se ver que os desvios relativos continuam abaixo de 1%, em ambas as hipóteses tendendo a 0.65%.

6.3 PROBLEMA 6: Placa heterogênea com três regiões

Considera-se uma placa plana formada por três regiões de dois materiais distintos, sendo a região intermediária a que possui material físsil. As condições de contorno são do tipo vácuo em ambas as extremidades. A Figura 6.1 mostra uma representação geométrica deste problema e a Tabela 6.6 contém os parâmetros de cada região.

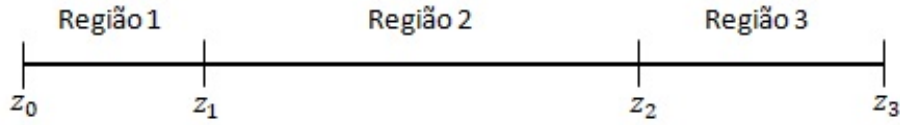


Figura 6.1: Representação geométrica do PROBLEMA 6

Tabela 6.6: Parâmetros para o PROBLEMA 6

| | Região 1 | Região 2 | Região 3 |
|--------------------|------------|------------|------------|
| | Material 2 | Material 1 | Material 2 |
| Espessura (cm) | 1.8 | 4.95 | 2.4 |
| σ_t | 2.06 | 1.265 | 2.06 |
| σ_s | 2.0405 | 1.2 | 2.0405 |
| $\nu\sigma_f$ | 0.0 | 0.09 | 0.0 |

A partir das mesmas estimativas iniciais para $k^{(0)}$ e $S^{(0)}$ dos dois problemas anteriores, obtiveram-se os resultados mostrados nas tabelas 6.7 e 6.8.

Tabela 6.7: Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 6: CASO 1

| $N \setminus$ | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | ADO | Desvio Relativo |
|---------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|-----------------|
| 4 | 0.984090 | 1.008664 | 1.008679 | 1.008678 | 1.008678 | 0.991975 | 1.68% |
| 8 | 0.984089 | 1.002298 | 1.002310 | 1.002309 | 1.002309 | 0.991974 | 1.04% |

Em ambos os casos do PROBLEMA 6 os critérios de parada foram atingidos em cinco iterações e para $N = 8$. Sendo que o desvio relativo no CASO 1 é de 1.04% e no CASO 2 é de 0.067%. Aumentando-se o valor de N os erros relativos em ambos os casos se aproximam de 0.3% e, a partir de $N = 16$ obtém-se duas casas decimais de concordância na comparação com o método ADO associado ao cálculo de um determinante, para os dois casos, como pode ser visto nas Tabelas A.5 e A.6 no Apêndice A.

Investigando o porquê dos resultados nos problemas 5 e 6 serem melhores do que os do PROBLEMA 4, em termos do erro relativo, observou-se que a variação do fluxo escalar no problema homogêneo é bem maior do que nos outros

Tabela 6.8: Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 6: CASO 2

| $N \backslash$ Iteração | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | ADO | Desvio Relativo |
|-------------------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|-----------------|
| 4 | 0.984090 | 0.989744 | 0.989740 | 0.989741 | 0.989741 | 0.991975 | 0.23% |
| 8 | 0.984089 | 0.992635 | 0.992637 | 0.992637 | 0.992637 | 0.991974 | 0.067% |

dois problemas, na região com fissão. A Tabela 6.9 mostra a variação do fluxo escalar em cada um dos três problemas considerando-se o menor e o maior valor do fluxo em 11 pontos igualmente espaçados no intervalo correspondente a região em que ocorre a fissão após a última iteração.

Tabela 6.9: Variação do fluxo escalar para os problemas 4, 5 e 6

| | Variação do fluxo escalar | | |
|--------|---------------------------|-------------|---------------|
| | PROBLEMA 4 | PROBLEMA 5 | PROBLEMA 6 |
| CASO 1 | 5.65 a 22.72 | 2.84 a 4.02 | 17.46 a 24.03 |
| CASO 2 | 5.63 a 22.63 | 2.85 a 4.02 | 17.44 a 23.99 |

Como as estimativas da fonte são obtidas através do cálculo do fluxo escalar, acredita-se que a grande variação desta medida influencia nos resultados obtidos para esta metodologia de solução do problema de k-autovalor. Para fins de comparação, reduziu-se a espessura do PROBLEMA 4 para 1 *cm* e manteve-se inalterado os demais parâmetros e condições de contorno. A partir das mesmas estimativas iniciais para $k^{(0)}$ e $S^{(0)}$ compara-se os resultados usando as duas metodologias para o ADO. A Tabela 6.10 mostra que na quinta iteração, a partir de $N = 16$, o desvio relativo é menor do que 1% para o CASO 1 e 0.31% para o CASO 2.

Tabela 6.10: Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 4 com espessura igual a 1 cm: CASO 1

| $N \backslash$ Iteração | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | ADO | Erro Relativo |
|-------------------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|---------------|
| 4 | 0.141195 | 0.146803 | 0.146775 | 0.146781 | 0.146780 | 0.143804 | 2.02% |
| 8 | 0.141227 | 0.145275 | 0.145255 | 0.145262 | 0.145261 | 0.143806 | 1.0% |
| 16 | 0.141227 | 0.144763 | 0.144745 | 0.144751 | 0.144750 | 0.143806 | 0.65% |

Tabela 6.11: Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 4 com espessura igual a 1 cm:
CASO 2

| $N \setminus$ Iteração | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | ADO | Erro Relativo |
|------------------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|---------------|
| 4 | 0.141195 | 0.142355 | 0.142344 | 0.142354 | 0.142352 | 0.143804 | 1.02% |
| 8 | 0.141227 | 0.143047 | 0.143031 | 0.143039 | 0.143038 | 0.143806 | 0.54% |
| 16 | 0.141227 | 0.143373 | 0.143356 | 0.143364 | 0.143363 | 0.143806 | 0.31% |

De fato, a variação do fluxo escalar para espessura igual a 1.0 *cm* no PROBLEMA 4 mostra-se bem menor, variando de 1.89 a 3.18, considerando-se 11 pontos igualmente espaçados no intervalo $[0, 1]$.

Nesta primeira tentativa de uso do método ADO associado a um esquema iterativo observou-se como ponto positivo o fato de não ser necessário trabalhar-se com valores complexos para as constantes de separação. Também, para valores baixos da ordem de quadratura e com poucas iterações, obteve-se resultados com uma ou duas casas decimais de precisão, representando desvios menores do que 5% e, em alguns casos, desvios menores do que 1%.

Os resultados obtidos estimulam a continuidade de pesquisas com essa abordagem no sentido de aprimorar a escolha das estimativas do termo de fonte e assim, possivelmente, alcançar resultados mais precisos.

7 CONCLUSÕES E CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho, o problema de determinação do fator de multiplicação efetivo, k_{eff} , em meio unidimensional, homogêneo e heterogêneo, para os casos monoenergético e multigrupo foi abordado utilizando o método ADO associado a dois esquemas diferentes, a saber, primeiro através do cálculo de raízes em um determinante e em seguida por meio de um processo iterativo.

Durante o estudo sob a primeira abordagem foi necessário desenvolver a solução ADO para o caso de autovalores imaginários puros e também complexos conjugados, a qual ainda não havia sido feita para este método. Essa característica está associada ao fato de se trabalhar em meios multiplicativos. Destaca-se que o aparecimento dos autovalores complexos conjugados ocorre juntamente com o aumento do número de grupos de energia e do valor da ordem de quadratura. Em todos os problemas testados foi possível calcular o valor de k_{eff} para ordens de quadratura elevada, de até 400, assim como no método P_N . Obteve-se também resultados com concordância de até 7 dígitos com o aumento da ordem de quadratura e comparáveis com a literatura, em geral chegando a essa concordância já para ordens de aproximação menores do que os outros métodos comparados. Tal desempenho do método ADO repete o observado na solução de outros problemas já abordados em diferentes aplicações.

A segunda metodologia utilizada neste trabalho considerou o termo de fissão como um termo de fonte o qual foi atualizado, juntamente com o fator de multiplicação a ser determinado, em cada iteração. A vantagem desse método em relação ao anterior é o fato de não se trabalhar com autovalores complexos, pois a parte homogênea da solução é resolvida em um meio não multiplicativo.

Para o termo de fonte considerou-se um vetor de componentes constantes em todas as iterações, evitando manipulação analítica mais extensa. Os resultados obtidos foram comparados com aqueles já calculados pela primeira abordagem ADO e obteve-se um grau de precisão de uma ou duas casas decimais de concordância. Apesar de se obter uma menor precisão em relação aquela obtida com a primeira abordagem, destaca-se o fato de que a estimativa para o fator de multiplicação foi obtida em poucas iterações (5 ou 6, dependendo do caso) e com valores reduzidos para a ordem de quadratura. É possível que o uso de soluções particulares analíticas na atualização de fontes ou outras estratégias de atualização possam auxiliar em uma melhora dos resultados desta abordagem. Tais estudos devem ser aprofundados se houver necessidade de uso desta estratégia em problemas bidimensionais.

Referências Bibliográficas

- [1] Abreu, M. P., A discrete ordinates scheme for void fraction evaluation with nonstandard reflective conditions and weakly divergent beams. *Kerntechnik*, vol. 74, pp. 55-59, 2009.
- [2] Ackroyd, R. T., Ziver, A. K., Goddard, A. J. H., A finite element method for neutron transport, Part IV: a comparison of some finite element solutions of two group benchmark problems with conventional solutions, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 7, pp. 335-349, 1980.
- [3] Anderson, E. et al., *LAPACK Users' Guide*, SIAM, Philadelphia, 1999.
- [4] Azmy, Y. Y., Comparison of three approximations to the linear-linear nodal transport method in weighted diamond-difference form. *Nuclear Science and Engineering*, vol. 100, pp. 190-200, 1988.
- [5] Azmy, Y. Y., Arbitrarily high order characteristic methods for solving the neutron transport equation. *Annals of Nuclear Energy*, vol. 19, pp. 593-606, 1992.
- [6] Badruzzaman, A., An efficient algorithm for nodal-transport solutions in multidimensional geometry. *Nuclear Science and Engineering*, vol. 89, pp. 281-290, 1985.
- [7] Barichello, L. B., Siewert, C. E., A discrete ordinates solution for a non-grey model with complete frequency redistribution, *JQSRT*, vol. 62, pp. 645-675, 1999.
- [8] Barichello, L. B., Explicit formulations for radiative transfer problems, *Thermal Measurements and Inverse Techniques*, Boca Raton: CRC Press, vol. 1, chapter 15, pages 541-562, 2011.

- [9] Barichello, L. B., Bartz, A. C. R., Camargo, M., Siewert, C. E., The temperature-jump problem for a variable collision frequency model. *Physics of Fluids*, vol. 14, pp. 517-534, 2002.
- [10] Barichello, L. B., Siewert, C. E., A discrete ordinates solution for Poiseuille flow in a plane channel. *Z. Angew. Math. Phys.*, vol. 50, pp. 972-981, 1999.
- [11] Barichello, L. B., Siewert, C. E., The temperature-jump problem in rarefied gas dynamics. *European Journal of Applied Mathematics*, vol. 11, pp. 353-364, 2000.
- [12] Barichello, L. B., Cabrera, L. C., Prolo Filho, J. F., An analytical discrete ordinates solution for two dimensional problems based on nodal schemes. *International Nuclear Atlantic Conference*, Rio de Janeiro, 2009.
- [13] Barichello, L. B., Cabrera, L. C., Prolo Filho, J. F., An analytical approach for a nodal scheme of two-dimensional neutron transport problems. *Annals of Nuclear energy*, vol. 38, pp. 1310-1317, 2011.
- [14] Barros, R. C., Larsen, E. W., A spectral nodal method for one-group x,y-geometry discrete ordinates problems. *Nuclear Science and Engineering*, vol. 111, pp. 34-45, 1992.
- [15] Barros, R. C., Alves Filho, H., Couto, N., Progress in the formulation of the approximate albedo boundary conditions for one-speed X,Y-geometry discrete ordinates and diffusion eigenvalue problems, *Progress in Nuclear Energy*, vol. 49, pp. 161-171, 2007.
- [16] Batistela, C. H. F., Estudo de criticalidade pelo método LTSN, Tese de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, 1997.

- [17] Batistela, C. H. F., de Vilhena, M. T., Borges, V., Determination of the effective multiplication factor in a slab by the LTSN method, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 26, pp. 761-767, 1999.
- [18] Bell, G. I., Glasstone, S., *Nuclear Reactor Theory*, Van Nostrand Reinhold Co, New York, 1970.
- [19] Biondo, E. D., Davidson, G. G., Pandya, T. M., Hamilton, S. P., Evans, T. M., Deterministically estimated fission source distributions for Monte Carlo k-eigenvalue problems, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 119, pp. 7-22, 2018.
- [20] Boltzmann, L., Weitere studien über das wärmeleichgewicht unter gas molekülen, *Sitzungsberichte Akademie der Wissenschaften*, vol. 60, pp. 275-376, 1872.
- [21] Burden, R. L., Faires, J. D., *Numerical Analysis*, Cengage Learning, 2016.
- [22] Cabrera, L. C. Solução espectral para modelos bidimensionais da equação linear de Boltzmann. Doutorado, Programa de Pós-Graduação em Matemática - UFRGS - Porto Alegre, 2009.
- [23] Cacuci, D. G., *Handbook of Nuclear Engineering*, Springer, New York, 2010.
- [24] Caldeira, A. D., Garcia, R. D. M., On criticality calculations in multislabs geometry, *Annals of Nuclear Energy*, vol. 28, pp. 1563-1581, 2001.
- [25] Caldeira, A. D., Soluções P_N para os problemas da moderação e do cálculo de célula em geometria plana, Tese de doutorado, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo, 1999.
- [26] Case, K. M., Elementary solutions of the transport equation and their applications, *Ann. Phys.*, vol. 9, pp. 1-23, 1960.

- [27] Case, K. M., Zweifel, P. F., Linear Transport Theory, Addison-Wesley, Reading, Mass., 1967.
- [28] Cercignani, C., Theory and application of the Boltzmann equation, Elsevier, New York, 1975.
- [29] Cercignani, C., The Boltzmann equation and its applications, Springer-Verlag, New York, 1988.
- [30] Cercignani, C., On the general solution of the steady linearized Boltzmann equation in rarefied gas. M. becker and M Fiebig eds., vol 1, A.9.1-A.9.11, DFLVR Press, Porz-Wahn, 1974.
- [31] Chandrasekhar, S., Radiative Transfer, Oxford University Press, London, 1950.
- [32] Cotta, R. M., Barichello, L. B., Explicit formulations for radiative transfer problems. In Thermal Measurements and Inverse Techniques. CRC Press, pp. 541-562, 2011.
- [33] Davison, B., Neutron Transport Theory, Oxford University Press, London, 1957.
- [34] Doicu, A., Trautmann, T., Discrete ordinate method with matrix exponential for a pseudo-spherical atmosphere: scalar case. JQSRT, vol. 110, pp. 146-158, 2009.
- [35] Dominguez, D. S., Hernandez, C. R. G, Barros, R. C., Spectral nodal method for numerically solving two-energy group X,Y geometry neutron diffusion eigenvalue problems. International Journal of Nuclear energy, Science and Technology (Print), vol. 5, p. 66-79, 2010.
- [36] Dominguez, D. S., Rocha, R. V. M., Iglesias, S. M., Escrivá, A., Alves Filho, H., A composite spatial grid spectral Green's function method for one

- speed discrete ordinates eigenvalue problems in two-dimensional cartesian geometry, *Progress in Nuclear Energy*, vol. 109, pp. 180-187, 2018.
- [37] Duderstadt, J. J., Hamilton, L. J., *Nuclear Reactor Analysis*, John Wiley, New York, 1976.
- [38] Fan, J., Boyd, I. D., Cai, C. P., Hennighausen, K., Candler, G. V., Computation of rarefied gas flow around a NACA 0012 airfoil, *AIAA Journal*, vol. 39, pp. 618-625, 2001.
- [39] Federighi, F. D., Vacuum boundary conditions for the spherical harmonics method, *Nukleonik*, vol. 6, pp. 277-285, 1964.
- [40] Fletcher, J. K., The solution of the time-independent multi-group neutron transport equation using spherical harmonics. *Annals of Nuclear Energy*, vol. 4, pp. 401-405, 1977.
- [41] Fletcher, J. K., The solution of the neutron transport equation using spherical harmonics. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, vol. 16, pp. 2827-2835, 1983.
- [42] Garcia, R.D.M., Métodos para solução da equação de transporte de partículas íntegro-diferencial, *Escola de verão em teoria de transporte de partículas nêutras*, PUCRS, Porto Alegre, 2002.
- [43] Garcia, R. D. M., Private communication, 2016.
- [44] Garcia, R. D. M., Siewert, C. E., The McCormack model for gas mixtures: heat transfer in a plane channel. *Physics of Fluids*, vol. 16, pp. 3393-3402, 2004.
- [45] Gelbard, E. M., Spherical harmonics methods: P_L and Double- P_L approximations, *Computing Methods in Reactor Physics*, pp. 267-358, H. Greenspan, C. N. Kelber and D. Okrent, Eds., Gordon & Breach, New York, 1968.

- [46] Gomes, R. R., Barros, R. C., Computational modeling of monoenergetic neutral particle inverse transport problems in slab geometry. American Institute of Physics, vol. 1479, pp. 2225-2228, 2012.
- [47] Gonzales, M., Fernández, C. G., Velarde, P., 2D numerical comparison between S_N and M_1 radiation transport methods. Annals of Nuclear Energy, vol. 36, pp. 886-895, 2009.
- [48] Günay, M., Sarer, B., Hançerliogullari, A., Three dimensional Monte Carlo calculation of gas production in structural material of APEX reactor for some evaluated data file, Annals of Nuclear Energy, vol. 55, pp. 292-296, 2013.
- [49] Häggblom, H., Ahlin, A., Nakamura, T., Transmission probability method of integral neutron transport calculation for two dimensional rectangular cells, Nuclear Science and Engineering, vol. 56, pp. 411-433, 1975.
- [50] Hébert, A., High-order diamond differencing schemes. Annals of Nuclear Energy, vol. 33, pp. 1479-1488, 2006.
- [51] Hu, B. X., Wu, Y. M., Tian, W. X., Su, G. H., and Qiu, S. Z., Development of a transient thermal-hydraulic code for analysis of China Demonstration Fast Reactor, Annals of Nuclear Energy, vol. 55, pp. 302-311, 2013.
- [52] Jeans, J. H., The equations of radiative transfer of energy. Mon. Not Royal Astron. Soc., vol. 78, pp. 28-36, 1917.
- [53] Kalos, M. H., Whitlock, P. A., Monte Carlo Methods, John Wiley and Sons, 1986.
- [54] Kofink, W., Complete spherical harmonics solution of the Boltzmann equation for neutron transport in homogeneous media with cylindrical geometry. Nuclear Science and Engineering, vol. 6, pp. 475-486, 1959.

- [55] Lapeyre, B., Pardoux, E., Sentis, R., Introduction to Monte Carlo Methods for Transport and Diffusion Equations, Oxford University Press, 2003.
- [56] Larsen, E. W., Pomraning, G. C., The P_N theory as an asymptotic limit of transport theory in planar geometry - I: Analysis, Nuclear Science and engineering, vol. 109, pp. 49-75, 1991.
- [57] Lee, C. E., Fan, W. C. P., Dias, M. P., Analytical solutions to the moment transport equations - I: One-group one-region slab and sphere criticality, Annals of Nuclear Energy, vol. 11, pp. 515-530, 1984.
- [58] Lee, C. E., Fan, W. C. P., Dias, M. P., Analytical solutions to the moment transport equations - II: multiregion, multigroup 1-D slab, cylinder and sphere criticality and source problems. Annals of Nuclear Energy, vol. 12, pp. 613-632, 1985.
- [59] Lee, M. C., Deng, J., Li, J., Jiang, S. B., Ma, C. M. Monte Carlo based treatment planning for modulated electron beam radiation therapy, Physics in Medicine and Biology., vol. 46, pp. 2177-2199, 2001.
- [60] LeVeque, R. J., Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems, Cambridge University Press, 2002.
- [61] Lewis, E. E., Miller, W. F., Computational methods of neutron transport, John Wiley and Sons, New York, 1984.
- [62] Lewis, E. E., Miller, W. F., Henry, T. P., A two-dimensional finite element method for integral neutron transport calculations. Nuclear Science and Engineering, vol. 58, pp. 203-212, 1975.
- [63] Ma, C. M., Jiang, S. B., Monte Carlo modelling of electron beams from medical accelerators, Physics in Medicine and Biology., vol. 44, pp. 157-189, 1999.

- [64] Mandl, M. E., The spherical harmonics method in plane and spherically symmetric geometry in multi-velocity-group theory, and its application in the two-velocity-group P_3 approximation. Report AERE T/R 1295, Atomic Energy Establishment, 1953.
- [65] Mark, J. C., The spherical harmonics method I, Ottawa, Canada: National Research Council of Canada, Atomic Energy Project, Report MT92, 1944.
- [66] Mark, J. C., The spherical harmonics method II, Ottawa, Canada: National Research Council of Canada, Atomic Energy Project, Report MT97, 1945.
- [67] Martin, N., Hébert, A., A three-dimensional S_N high-order diamond differencing discretization with a consistent acceleration scheme. *Annals of Nuclear Energy*, vol. 36, pp. 1787-1796, 2009.
- [68] Martin, W. R., Duderstadt, J. J., Finite element solutions of the neutron transport equation with applications to strong heterogeneities, *Nuclear Science and Engineering*, vol. 62, pp. 371-390, 1977.
- [69] McCormick, N. J., Kuscer, I., Singular eigenfunction expansions in neutron transport theory, *Adv. Nucl. Sci Technol.*, vol. 7, pp. 181-282, 1973.
- [70] Menezes, A. W., Alves Filho, H., Barros, R. C., Moraes, C. S., Dominguez, D. S., Analytical spatial reconstruction scheme for the coarse-mesh solutions generated by the constant spectral nodal method for monoenergetic discrete ordinates transport calculations in X,Y geometry fission-chain reacting systems. *Annals of Nuclear Energy*, vol. 53, pp. 274-279, 2013.
- [71] Mervin, B. T., Mosher, S. W., Wagner, J. C., and Maldonado, G. I., Uncertainty underprediction in Monte Carlo eigenvalue calculations, *Nuclear Science and Engineering*, vol. 173, pp. 276-292, 2013.

- [72] Metropolis, N., and Ulam, S., The Monte Carlo method, *Journal of the American Statistical Association*, vol. 44, pp. 335-341, 1949.
- [73] Mishra, S. C., Kim, M. Y., Maruyama, S., Performance evaluation of four radiative transfer methods in solving multi-dimensional radiation and/or conduction heat transfer problems, *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 55, pp. 5819-5835, 2012a.
- [74] Mishra, S. C., Roy, H. K., Misra, N., Discrete ordinate method with a new and a simple quadrature scheme. *JQSRT*, vol. 101, pp. 249-262, 2006.
- [75] Modest, M. F., *Radiative Heat Transfer*, MC Graw-Hill, New York, 1993.
- [76] Naqa, I. E., Deasy, J. O., and Vicic, M. Locally adaptive denoising of monte carlo dose distribution via hybrid median filtering. In *Nuclear science Symposium Conference record, IEEE (Oct 2003)*, vol. 4, pp. 2703-2706, 2003
- [77] Picoloto, C. B. *Formulações espectralnodais em cálculos neutrônicos multidimensionais*. Doutorado, Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica - UFRGS - Porto Alegre, 2015.
- [78] Pomraning, G. C., An improved free-surface boundary condition for the P_3 approximation, *Nuclear Science and Engineering*, vol. 18, pp. 528-530, 1964.
- [79] Pomraning, G. C., Variational boundary conditions for the spherical harmonics approximation to the neutron transport equation. *Ann. Phys.*, vol. 27, pp. 193-215, 1964.
- [80] Prolo Filho, J. F. *Abordagens espectralnodais para modelos multidimensionais em transporte de partículas*. Doutorado, Programa de Pós Graduação em Matemática - UFRGS - Porto Alegre, 2011.

- [81] Reichert, J. T., Barichello, L. B., An analytical approach to the solution of the transport equation for photons. Tech. rep., M&C, Rio de Janeiro, 2011.
- [82] Rulko, Robert P., Variational derivation of multigroup P_2 equations and boundary conditions in planar geometry, Nuclear Science and Engineering, vol. 121, pp. 371-392, 1995.
- [83] Siewert, C. E., A spherical-harmonics method for multi-group or non-gray radiation transport, JQSRT, vol. 49, pp. 95-106, 1993.
- [84] Siewert, C. E., Couette flow for a binary gas mixture. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, vol. 70, pp. 321-332, 2001.
- [85] Siewert, C. E., The temperature-jump problem based on the CES model of the linearized Boltzmann equation. Z. Angew. Math. Phys., vol. 55, pp. 92-104, 2004.
- [86] Silva, D. M., Alves Filho, H., Barros, R. C., A hybrid spectral nodal method for multigroup X,Y-geometry discrete ordinates eigenvalue problems, Progress in Nuclear Energy (New Series), vol. 95, pp. 33-39, 2017.
- [87] Spanier, J., Gelbard, E. M., Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems, Dover Publications, 1968, reprint 2008.
- [88] Silva, F. C., Alves Filho, H., Barros, R. C., A Hybrid spectral nodal method for one-speed discrete ordinates eigenvalue problems in two-dimensional cartesian geometry, Hybrid Methods in engineering: modeling, programming, analysis, animation, vol. 3, pp. 1-15, 2001.
- [89] Stepanek, J., The DPN Surface Flux Integral Neutron Transport Method for Slab Geometry, Nuclear Science and Engineering, vol. 78, pp. 53-65, 1981.

- [90] Tres, A., Picoloto, C. B., Filho, J. F. P., Cunha, R. D., Barichello, L. B., Explicit formulation of a nodal transport method for discrete ordinates calculations in two-dimensional fixed source problems. *Kerntechnik*, vol. 79, pp. 155-162, 2014.
- [91] Verhaegen, F., Seuntjens, J., Monte Carlo modelling of external radiotherapy photon beams, *Physics in Medicine and Biology*, vol. 48, pp. 107-164, 2003.
- [92] Vyawahare, V. A., Nataraj, P. S. V., Fractional-order modelling of neutron transport in a nuclear reactor, *Applied Mathematical Modelling*, vol. 37, pp. 9747-9767, 2013.
- [93] Wick, G. C., Über ebene Diffusionsproblem, *Z. Phys.*, vol. 121, pp. 702-705, 1943.

Apêndice A TABELAS DOS PROBLEMAS 4 A 6

As Tabelas A.1 e A.2 apresentam os resultados obtidos para valores de N até 256 para o problema 4 e para os casos 1 e 2.

Tabela A.1: Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 4: CASO 1, $N \leq 256$

| $N \backslash$ Iteração | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | ADO | Desvio Relativo |
|-------------------------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|-----------------|
| 4 | 0.87851 | 0.95078 | 0.95080 | 0.95080 | 0.95080 | 0.95348 | 0.28% |
| 8 | 0.87850 | 0.93434 | 0.93436 | 0.93436 | 0.93436 | 0.95348 | 2.01% |
| 16 | 0.87850 | 0.92522 | 0.92523 | 0.92523 | 0.92523 | 0.95348 | 2.96% |
| 32 | 0.87850 | 0.92032 | 0.92033 | 0.92034 | 0.92034 | 0.95348 | 3.48% |
| 64 | 0.87850 | 0.91777 | 0.91778 | 0.91778 | 0.91778 | 0.95348 | 3.74% |
| 128 | 0.87850 | 0.91646 | 0.91647 | 0.91648 | 0.91648 | 0.95348 | 3.88% |
| 256 | 0.87850 | 0.91580 | 0.91581 | 0.91582 | 0.91582 | 0.95348 | 3.95% |

Tabela A.2: Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 4: CASO 2, $N \leq 256$

| $N \backslash$ Iteração | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | ADO | Desvio Relativo |
|-------------------------|---------|---------|---------|---------|---------|---------|-----------------|
| 4 | 0.87851 | 0.89742 | 0.89741 | 0.89741 | 0.89741 | 0.95348 | 5.88% |
| 8 | 0.87850 | 0.90732 | 0.90733 | 0.90733 | 0.90733 | 0.95348 | 4.84% |
| 16 | 0.87850 | 0.91163 | 0.91164 | 0.91165 | 0.91165 | 0.95348 | 4.39% |
| 32 | 0.87850 | 0.91350 | 0.91352 | 0.91352 | 0.91352 | 0.95348 | 4.19% |
| 64 | 0.87850 | 0.91435 | 0.91436 | 0.91437 | 0.91437 | 0.95348 | 4.10% |
| 128 | 0.87850 | 0.91475 | 0.91476 | 0.91477 | 0.91477 | 0.95348 | 4.06% |
| 256 | 0.87850 | 0.91494 | 0.91496 | 0.91496 | 0.91496 | 0.95348 | 4.04% |

As Tabelas A.3 e A.4 apresentam os resultados obtidos para valores de N até 256 para o problema 5 e para os casos 1 e 2.

As Tabelas A.5 e A.6 apresentam os resultados obtidos para valores de N até 256 para o problema 6 e para os casos 1 e 2.

Tabela A.3: Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 5: CASO 1, $N \leq 256$

| $N \setminus$ Iteração | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | 6 | ADO | Desvio Relativo |
|------------------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|-----------------|
| 4 | 1.1422 | 1.1581 | 1.1424 | 1.1575 | 1.1575 | 1.1575 | 1.1589 | 0.12% |
| 8 | 1.1422 | 1.1552 | 1.1426 | 1.1546 | 1.1546 | 1.1546 | 1.1589 | 0.37% |
| 16 | 1.1422 | 1.1535 | 1.1427 | 1.1530 | 1.1531 | 1.1531 | 1.1589 | 0.51% |
| 32 | 1.1422 | 1.1527 | 1.1428 | 1.1522 | 1.1522 | 1.1522 | 1.1589 | 0.58% |
| 64 | 1.1422 | 1.1522 | 1.1429 | 1.1517 | 1.1518 | 1.1518 | 1.1589 | 0.62% |
| 128 | 1.1422 | 1.1520 | 1.1429 | 1.1515 | 1.1515 | 1.1515 | 1.1589 | 0.64% |
| 256 | 1.1422 | 1.1519 | 1.1429 | 1.1514 | 1.1514 | 1.1514 | 1.1589 | 0.65% |

Tabela A.4: Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 5: CASO 2, $N \leq 256$

| $N \setminus$ Iteração | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | ADO | Desvio Relativo |
|------------------------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|-----------------|
| 4 | 1.1422 | 1.1477 | 1.1475 | 1.1475 | 1.1475 | 1.1589 | 0.99% |
| 8 | 1.1422 | 1.1499 | 1.1496 | 1.1496 | 1.1496 | 1.1589 | 0.80% |
| 16 | 1.1422 | 1.1509 | 1.1505 | 1.1505 | 1.1505 | 1.1589 | 0.72% |
| 32 | 1.1422 | 1.1514 | 1.1509 | 1.1509 | 1.1509 | 1.1589 | 0.69% |
| 64 | 1.1422 | 1.1516 | 1.1511 | 1.1511 | 1.1511 | 1.1589 | 0.67% |
| 128 | 1.1422 | 1.1516 | 1.1512 | 1.1512 | 1.1512 | 1.1589 | 0.67% |
| 256 | 1.1422 | 1.1517 | 1.1512 | 1.1513 | 1.1513 | 1.1589 | 0.66% |

Tabela A.5: Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 6: CASO 1, $N \leq 256$

| $N \setminus$ Iteração | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | ADO | Desvio Relativo |
|------------------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|-----------------|
| 4 | 0.984090 | 1.008664 | 1.008679 | 1.008678 | 1.008678 | 0.991975 | 1.68% |
| 8 | 0.984089 | 1.002298 | 1.002310 | 1.002309 | 1.002309 | 0.991974 | 1.04% |
| 16 | 0.984080 | 0.998774 | 0.998784 | 0.998783 | 0.998783 | 0.991974 | 0.69% |
| 32 | 0.984089 | 0.996893 | 0.996901 | 0.996900 | 0.996900 | 0.991974 | 0.50% |
| 64 | 0.984089 | 0.995916 | 0.995923 | 0.995923 | 0.995923 | 0.991974 | 0.40% |
| 128 | 0.984089 | 0.995417 | 0.995424 | 0.995424 | 0.995424 | 0.991974 | 0.35% |
| 256 | 0.984089 | 0.995166 | 0.995172 | 0.995172 | 0.995172 | 0.991974 | 0.32% |

Tabela A.6: Valores do k_{eff} para o PROBLEMA 6: CASO 2, $N \leq 256$

| $N \setminus$ Iteração | 1 | 2 | 3 | 4 | 5 | ADO | Desvio Relativo |
|------------------------|----------|----------|----------|----------|----------|----------|-----------------|
| 4 | 0.984090 | 0.989744 | 0.989740 | 0.989741 | 0.989741 | 0.991975 | 0.23% |
| 8 | 0.984089 | 0.992635 | 0.992637 | 0.992637 | 0.992637 | 0.991974 | 0.067% |
| 16 | 0.984089 | 0.993884 | 0.993889 | 0.993889 | 0.993889 | 0.991974 | 0.19% |
| 32 | 0.984089 | 0.994431 | 0.994436 | 0.994436 | 0.994436 | 0.991974 | 0.25% |
| 64 | 0.984089 | 0.994680 | 0.994686 | 0.994686 | 0.994686 | 0.991974 | 0.27% |
| 128 | 0.984089 | 0.994798 | 0.994805 | 0.994804 | 0.994804 | 0.991974 | 0.28% |
| 256 | 0.984089 | 0.994856 | 0.994862 | 0.994862 | 0.994862 | 0.991974 | 0.29% |

Apêndice B COMPARAÇÃO ENTRE OS MÉTODOS DA SECANTE E DA BISSECÇÃO

Neste apêndice apresentam-se as comparações, em número de iterações, entre os resultados obtidos com o método ADO seguindo a primeira abordagem, entre os métodos da secante e da bissecção para os dois casos do PROBLEMA 2. O critério de parada para ambos os métodos iterativos é o erro entre duas estimativas de k menor do que 10^{-8} . As Tabelas B.1 e B.2 mostram os resultados para os casos com e sem a placa de controle, respectivamente.

Tabela B.1: Secante x Bissecção para o PROBLEMA 2 com placa de controle

| N | SECANTE | | BISSECÇÃO | |
|-----|----------|--------------|-----------|--------------|
| | k | Nº Iterações | k | Nº Iterações |
| 10 | 0.328181 | 8 | 0.328181 | 25 |
| 20 | 0.328181 | 11 | 0.328181 | 25 |
| 30 | 0.328181 | 11 | 0.328181 | 25 |
| 40 | 0.328181 | 11 | 0.328181 | 25 |
| 50 | 0.328181 | 10 | 0.328181 | 25 |
| 100 | 0.328181 | 12 | 0.328181 | 25 |
| 200 | 0.328181 | 18 | 0.328181 | 25 |

Tabela B.2: Secante x Bissecção para o PROBLEMA 2 sem placa de controle

| N | SECANTE | | BISSECÇÃO | |
|-----|----------|--------------|-----------|--------------|
| | k | Nº Iterações | k | Nº Iterações |
| 10 | 0.566154 | 6 | 0.566154 | 25 |
| 20 | 0.566187 | 9 | 0.566187 | 25 |
| 30 | 0.566189 | 9 | 0.566189 | 25 |
| 40 | 0.566189 | 10 | 0.566189 | 25 |
| 50 | 0.566189 | 10 | 0.566189 | 25 |
| 100 | 0.566189 | 12 | 0.566189 | 25 |
| 200 | 0.566189 | 12 | 0.566189 | 25 |

As Tabelas B.1 e B.2 mostram que o método da secante atinge o valor do parâmetro k para um número menor de iteração em comparação ao método da bissecção.

Apêndice C **RESULTADOS DOS PROBLEMAS 4 A 6 SEGUNDO A ABORDAGEM 1**

Nesta seção apresentam-se os resultados dos problemas 4 a 6 segundo a abordagem 1, obtidas na etapa da qualificação. O problema 4 é comparado com os resultados obtidos pelo método LTS_N , em [16] e pelo código ANISN em [89].

Tabela C.1: Valores para k_{eff} para o PROBLEMA 4 segundo a abordagem 1

| N | ADO_{2N} | LTS_N | ANISN |
|-----|------------|----------|---------|
| 2 | 0.953478 | 0.93905 | - |
| 4 | 0.953476 | 0.95155 | 0.95207 |
| 6 | 0.953476 | - | - |
| 8 | 0.953476 | 0.953201 | 0.95316 |
| 12 | 0.953476 | 0.953354 | - |
| 16 | 0.953476 | 0.953409 | 0.95338 |

A Tabela C.2 apresenta os resultados para o problema 5. Também comparando com os resultados obtidos pelo método LTS_N em [16] e pelo código ANISN em [89].

Tabela C.2: Valores para k_{eff} para o PROBLEMA 5 segundo a abordagem 1

| N | ADO_{2N} | LTS_N | ANISN |
|-----|------------|----------|-------|
| 2 | 1.158917 | 1.15775 | - |
| 4 | 1.158916 | 1.15975 | - |
| 6 | 1.158916 | 1.158847 | - |
| 8 | 1.158916 | 1.158893 | 1.159 |
| 10 | 1.158916 | 1.158914 | - |
| 12 | 1.158916 | 1.158916 | - |

Pro fim, a Tabela C.3 apresenta os resultados para o problema 6. Estes são comparados com os resultados obtidos pelo método LTS_N em [16] e pelo código ANISN em [82].

Tabela C.3: Valores para k_{eff} para o PROBLEMA 6 segundo a abordagem 1

| N | ADO_{2N} | LTS_N | ANISN |
|-----|------------|----------|---------|
| 2 | 0.991975 | 0.983450 | - |
| 4 | 0.991974 | 0.990950 | 0.99130 |
| 6 | 0.991974 | 0.991791 | - |
| 8 | 0.991974 | 0.991844 | 0.99173 |
| 10 | 0.991974 | 0.991897 | - |
| 12 | 0.991974 | 0.991929 | - |
| 14 | 0.991975 | 0.991957 | - |
| 16 | 0.991974 | 0.991961 | 0.99192 |
| 32 | 0.991974 | - | 0.99194 |