



AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE  
DE SÃO PAULO

**SOLUÇÕES  $P_N$  PARA OS PROBLEMAS DA MODERAÇÃO  
E DO CÁLCULO DE CÉLULA EM GEOMETRIA PLANA**

**ALEXANDRE DAVID CALDEIRA**

Tese apresentada como parte dos requisitos para obtenção do Grau de Doutor em Ciências na Área de Reatores Nucleares de Potência e Tecnologia do Combustível Nuclear.

Orientador:  
Dr. Roberto David Martinez Garcia

**São Paulo  
1999**

A meus pais Gilberto e Suely,  
à minha esposa Leila e  
a meus filhos Igor e Caio.

## AGRADECIMENTOS

Ao Instituto de Estudos Avançados (IEAv), do Centro Técnico Aeroespacial (CTA), pela oportunidade de continuar o meu aprendizado e por todo apoio ao longo destes anos.

Ao Programa RHAE, do Ministério da Ciência e Tecnologia, pela bolsa de estudos concedida.

Ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN-CNEN/SP), pelos cursos ministrados.

Ao Dr. Roberto David Martinez Garcia pela orientação durante o desenvolvimento desta tese.

A todos que, direta ou indiretamente, contribuíram para a realização deste trabalho.

# **SOLUÇÕES $P_N$ PARA OS PROBLEMAS DA MODERAÇÃO E DO CÁLCULO DE CÉLULA EM GEOMETRIA PLANA**

**Alexandre David Caldeira**

## **RESUMO**

Neste trabalho são desenvolvidas soluções  $P_N$  para os problemas da moderação e do cálculo de célula em geometria plana. Para realçar as principais contribuições deste desenvolvimento podem ser mencionadas: i) a nova solução particular desenvolvida para o método  $P_N$  aplicado ao problema da moderação no modelo de multigrupos, que originou uma nova classe de polinômios denominados polinômios generalizados de Chandrasekhar; ii) o tratamento de uma situação específica, conhecida como degenerescência, originada por uma particularidade envolvendo as constantes de grupo e iii) a primeira aplicação do método  $P_N$ , para  $N$  arbitrário, ao cálculo de criticalidade celular relatada na literatura.

**$P_N$  SOLUTIONS FOR THE SLOWING-DOWN AND THE CELL  
CALCULATION PROBLEMS IN PLANE GEOMETRY**

**Alexandre David Caldeira**

**ABSTRACT**

In this work  $P_N$  solutions for the slowing-down and cell problems in slab geometry are developed. To highlight the main contributions of this development, one can mention: i) the new particular solution developed for the  $P_N$  method applied to the slowing-down problem in the multigroup model, originating a new class of polynomials denominated Chandrasekhar generalized polynomials; ii) the treatment of a specific situation, known as a degeneracy, arising from a particularity in the group constants and iii) the first application of the  $P_N$  method, for arbitrary  $N$ , in criticality calculations at the cell level reported in literature.

## SUMÁRIO

	<b>Página</b>
<b>1 INTRODUÇÃO</b>	<b>1</b>
1.1 O Método $P_N$	1
1.2 Histórico	2
1.3 Proposta do Trabalho	3
1.4 Contribuições do Trabalho	4
<b>2 A SOLUÇÃO <math>P_N</math> DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE APLICADA À FAIXA DE MODERAÇÃO</b>	<b>6</b>
2.1 A Solução $P_N$ Homogênea da Equação de Transporte	6
2.2 A Solução $P_N$ Particular da Equação de Transporte	10
2.3 Determinação dos Coeficientes da Solução Homogênea	12
2.4 Expressões para o Cálculo dos Fluxos e das Correntes de Grupo	13
2.5 Soluções $P_N$ Degeneradas	14
2.6 Implementação Computacional e Resultados Numéricos	17
<b>3 A SOLUÇÃO <math>P_N</math> DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE MATRICIAL APLICADA AO CÁLCULO DE CÉLULA</b>	<b>24</b>
3.1 Formulação do Problema	24
3.2 A Solução $P_N$ Homogênea da Equação de Transporte Matricial	27
3.3 Aplicação da Solução $P_N$ à Região do Combustível	30
3.4 Aplicação da Solução $P_N$ às Regiões Intermediárias	33
3.5 Aplicação da Solução $P_N$ à Região Externa	35
3.6 Aplicação das Condições de Continuidade	38
3.7 Implementação Computacional	46
3.8 Resultados Numéricos	49

<b>4 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES</b>	<b>70</b>
<b>APÊNDICE 1 – Função de ponderação para condensação da biblioteca a 69 grupos</b>	<b>73</b>
<b>APÊNDICE 2 – Dados de entrada para o código ANISN</b>	<b>75</b>
<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b>	<b>77</b>

## 1 INTRODUÇÃO

Neste capítulo são apresentados uma descrição sucinta e um histórico resumido do método  $P_N$  para a solução da equação de transporte de nêutrons. São apresentadas, também, a proposta do presente trabalho, onde são discutidas as abordagens investigadas para o problema do cálculo de célula em geometria plana, e as principais contribuições resultantes deste trabalho.

### 1.1 O Método $P_N$

A idéia fundamental do método  $P_N$  para a solução da equação de transporte de nêutrons<sup>1</sup> consiste em se aproximar a dependência angular do fluxo de nêutrons através de uma expansão em harmônicos esféricos, procedimento este que se reduz a uma expansão em polinômios de Legendre para a geometria plana com simetria azimutal, pois, nesta geometria, uma única variável é suficiente para descrever a dependência angular do fluxo de nêutrons. Introduzindo-se esta expansão do fluxo de nêutrons na equação de transporte e aplicando-se uma condição de truncamento convenientemente escolhida, obtém-se um conjunto acoplado de  $(N + 1)$  equações diferenciais de primeira ordem para os primeiros  $(N + 1)$  momentos de Legendre dos fluxos angulares, onde  $N$  é a ordem da aproximação  $P_N$  utilizada. Propondo-se um comportamento exponencial para estes momentos, o problema de se resolver este conjunto de equações diferenciais recai na solução de um problema de autovalores. A solução  $P_N$  é dada pela superposição das autofunções correspondentes, e os coeficientes na superposição são encontrados resolvendo-se um sistema de equações lineares algébricas, obtido através da aplicação das condições de contorno do problema que se deseja solucionar.

## 1.2 Histórico

O método  $P_N$  foi sugerido pela primeira vez por Jeans, em 1917, como uma técnica de solução da equação de transferência radiativa.<sup>2</sup> Em teoria de transporte de nêutrons, o método foi aplicado inicialmente por Marshak<sup>3</sup> e desenvolvido extensivamente por Mark,<sup>4,5</sup> na década de 40. Desde então, o método  $P_N$  tem sido bastante aplicado na resolução de problemas monoenergéticos.<sup>6-17</sup>

No caso de problemas dependentes da energia formulados no modelo multigrupo,<sup>1</sup> soluções  $P_N$  expressas em forma vetorial foram desenvolvidas e utilizadas na solução de alguns problemas específicos.<sup>6,18,19</sup> Davison,<sup>6</sup> embasado no trabalho de Mandl,<sup>20</sup> desenvolveu em detalhe o formalismo analítico necessário para se resolver o problema de uma placa homogênea com espalhamento isotrópico através do método  $P_N$ . Em 1985, Lee, Fan e Dias<sup>18</sup> utilizaram o método  $P_N$  para resolver alguns problemas formulados em multiregiões e multigrupos, com espalhamento anisotrópico. Entre esses problemas encontra-se um problema de criticalidade com 2 grupos de energia e 3 regiões a nível de “assembly”, onde as espessuras das regiões materiais são maiores que o menor dos livres caminhos médios do nêutron. Em 1993, Siewert<sup>19</sup> utilizou a técnica de variação de parâmetros para desenvolver uma solução  $P_N$  particular para problemas de transporte multigrupo com um termo de fonte genérico (dependente da posição e ângulo). Nesse trabalho, foi resolvido um problema de termalização descrito por uma placa de água de 30 cm, com 6 grupos de energia e espalhamento anisotrópico de ordem 3.

Em todos os trabalhos acima mencionados, a solução  $P_N$  é calculada para todos os grupos simultaneamente, evitando iterações sobre os grupos de energia. Essa formulação matricial simultânea é particularmente interessante quando no problema a ser resolvido encontra-se presente a fissão ou o “upscattering”, situações em que soluções iterativas da equação de transporte podem apresentar dificuldades de convergência.<sup>21</sup> Por outro lado, na ausência de fissão e “upscattering” a matriz de transferência entre grupos é do tipo triangular inferior e a formulação matricial simultânea pode não ser a melhor maneira de se resolver o problema; neste caso, a formulação grupo a grupo pode apresentar

vantagens sobre a formulação matricial simultânea, por exigir menos recursos computacionais.

Para finalizar, cabe mencionar que existem na literatura abordagens  $P_N$  que utilizam esquemas de discretização espacial (veja, por exemplo, os trabalhos de Fletcher<sup>22,23</sup> e Kobayashi<sup>24,25</sup>), porém não serão discutidos aqui por fugirem do escopo deste trabalho.

### 1.3 Proposta do Trabalho

O problema que se pretende resolver neste trabalho consiste na determinação da solução estacionária nas diversas regiões da célula que corresponde ao estado crítico da mesma. Em outras palavras, deseja-se determinar o valor do fator de multiplicação efetivo ( $k_{ef}$ ) da célula, bem como os fluxos escalares e as correntes de grupo correspondentes.

Considerando-se, por simplicidade, uma célula composta por três regiões, combustível, encamisamento e moderador/refrigerante, e que estas regiões diferem muito no que diz respeito aos fenômenos físicos predominantes (na região de combustível prevalece a fissão, enquanto que no encamisamento e na região moderadora/refrigerante prevalece a moderação de nêutrons), inicialmente julgou-se mais adequado adotar uma abordagem onde se resolve o problema região por região, ao invés de se utilizar uma solução global para todas as regiões. Assim, na região de combustível, como a fissão provoca um acoplamento entre os grupos da faixa térmica e os da faixa rápida, o problema foi formulado simultaneamente para todos os grupos de energia. Já no caso das outras regiões, dividiu-se a faixa de energia em duas. Na faixa em que só ocorre “down-scattering”, adotou-se uma formulação grupo a grupo onde as contribuições dos grupos com energia superior a um determinado grupo são conhecidas e podem ser agrupadas como um termo de fonte. Na faixa em que ocorre “upscattering”, adotou-se uma formulação matricial, porém com um termo adicional de fonte, representando as contribuições provenientes da faixa de “downscattering” previamente calculadas.

Além das considerações físicas, foi necessário levar-se em conta aspectos computacionais na escolha da abordagem adequada. A abordagem região por região requer uma varredura espacial para se obter a solução do problema convergida, sendo esta a sua principal desvantagem, enquanto que na abordagem global está implícito um processo iterativo para se determinar o zero de um determinante. Num problema com  $R$  regiões materiais e  $NGR$  grupos de energia, a abordagem região por região requer (sem considerar o desacoplamento entre as faixas de energia de moderação e térmica), em cada varredura espacial, a solução de 2 sistemas lineares de ordem  $NGR \times (N + 1)/2$  e  $2 \times (R - 2)$  sistemas lineares de ordem  $NGR \times (N + 1)$ , onde  $N$  é a ordem da aproximação  $P_N$  utilizada. Por outro lado, a abordagem global requer, em cada iteração necessária para a determinação de  $k_{ef}$ , o cálculo do determinante de uma matriz de ordem  $(R - 1) \times NGR \times (N + 1)$ , o que pode implicar num requisito de memória e tempo de computação maior neste último caso, já que o tempo de computação necessário para se resolver um sistema linear ou calcular o determinante de uma matriz é proporcional ao cubo da ordem das matrizes envolvidas.

Apesar da esperada vantagem computacional, a solução  $P_N$  para o problema do cálculo de célula através da abordagem região por região não pôde ser utilizada, por apresentar dificuldades de convergência no processo de varredura espacial que não puderam ser superadas. Entretanto, durante o desenvolvimento desta abordagem, uma nova solução  $P_N$  para o problema da moderação de nêutrons foi encontrada e é apresentada no Capítulo 2. Assim, para solucionar o problema do cálculo de célula utilizou-se a abordagem global que é apresentada no Capítulo 3.

#### 1.4 Contribuições do Trabalho

Como principais contribuições deste trabalho podem ser mencionadas: i) uma nova solução particular desenvolvida para o método  $P_N$  aplicada ao problema da moderação no modelo de multigrupos, que originou uma nova classe de polinômios denominados polinômios generalizados de Chandrasekhar; ii) o tratamento de uma situação específica, denominada degenerescência, provocada por uma particularidade envolvendo as

constantes de grupo e iii) a primeira aplicação do método  $P_N$ , para  $N$  arbitrário, ao cálculo de criticalidade celular relatada na literatura.

## 2 A SOLUÇÃO $P_N$ DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE APLICADA À FAIXA DE MODERAÇÃO

Neste capítulo são apresentadas a solução  $P_N$  da versão homogênea da equação de transporte e a solução  $P_N$  particular da versão heterogênea da mesma equação, quando aplicadas à faixa de moderação. São apresentados, também, o sistema de equações lineares algébricas cuja solução determina os coeficientes da solução homogênea e as expressões utilizadas para o cálculo dos fluxos escalares e das correntes de grupo. Neste capítulo é ainda mostrada a solução  $P_N$  degenerada, provocada por uma peculiaridade envolvendo as constantes de grupo. Finalmente, é abordada a estratégia utilizada na parte computacional e são apresentados alguns resultados numéricos.

### 2.1 A Solução $P_N$ Homogênea da Equação de Transporte

Considerando-se a situação em que se deseja resolver a equação de transporte multigrupo na faixa de moderação (“downscattering”), sem a presença de fissão, a equação de transporte pode ser escrita para o grupo  $j$ , onde  $1 \leq j \leq NDS$ , na forma<sup>26</sup>

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi_j(z, \mu) + \sigma_j \psi_j(z, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^j \sum_{l=0}^L \sigma_{ji}(l) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi_i(z, \mu') d\mu', \quad (2.1)$$

onde  $\psi_j(z, \mu)$  é o fluxo angular no grupo  $j$ ,  $z \in (z_L, z_R)$  é a variável espacial, medida em cm,  $\mu \in [-1, 1]$  é o co-seno do ângulo polar com relação ao eixo  $z$ , que especifica a direção do movimento dos nêutrons,  $\sigma_j$  representa a seção de choque macroscópica total ( $\text{cm}^{-1}$ ) e  $\sigma_{ji}(l)$  representa o momento de Legendre de ordem  $l$  da seção de choque de transferência do grupo  $i$  para o grupo  $j$  ( $\text{cm}^{-1}$ ).

Para concluir a formulação do problema, as condições de contorno às quais a Equação (2.1) está sujeita são expressas, para  $\mu \in [0, 1]$ , por

$$\psi_j(z_L, \mu) = L_j(\mu) \quad (2.2a)$$

e

$$\psi_j(z_R, -\mu) = R_j(\mu), \quad (2.2b)$$

onde  $L_j(\mu)$  e  $R_j(\mu)$  representam distribuições genéricas de nêutrons no grupo  $j$  incidindo pela esquerda e pela direita da placa, respectivamente, e são supostas conhecidas.

O método dos harmônicos esféricos consiste, essencialmente, em se aproximar a dependência angular do fluxo de nêutrons através de uma expansão em harmônicos esféricos, procedimento este que se reduz a uma expansão em polinômios de Legendre (daí o nome método  $P_N$ ) para a geometria plana com simetria azimutal, pois uma única variável angular é suficiente para descrever a dependência angular do fluxo de nêutrons. Assim, a solução da versão homogênea da Equação (2.1), isto é,

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi_j(z, \mu) + \sigma_j \psi_j(z, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L \sigma_{jl}(l) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi_j(z, \mu') d\mu', \quad (2.3)$$

é escrita na aproximação  $P_N$  como (veja, por exemplo, as Referências 27 e 28)

$$\psi_j^h(z, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (2n+1) \phi_{j,n}^h(z) P_n(\mu), \quad (2.4)$$

onde o sobrescrito  $h$  denota solução homogênea,  $N$  é considerado ímpar,  $P_n(\mu)$  denota o polinômio de Legendre de ordem  $n$  e  $\phi_{j,n}^h(z)$  é o momento de Legendre de ordem  $n$  do fluxo angular na posição  $z$ , expresso por

$$\phi_{j,n}^h(z) = \int_{-1}^1 \psi_j^h(z, \mu) P_n(\mu) d\mu. \quad (2.5)$$

Substituindo-se a expansão dada pela Equação (2.4) na Equação (2.3), multiplicando-se a equação resultante por  $(2n+1)P_n(\mu)/2$  e integrando-se na variável  $\mu$

no intervalo  $[-1, 1]$ , obtém-se o sistema de equações diferenciais de primeira ordem para os momentos de ordem  $n = 0, 1, \dots, N$  do fluxo angular

$$(n+1) \frac{d}{dz} \phi_{j,n+1}^h(z) + n \frac{d}{dz} \phi_{j,n-1}^h(z) + \sigma_j h_{j,n} \phi_{j,n}^h(z) = 0, \quad (2.6)$$

sendo  $h_{j,n} = (2n+1) - \sigma_j(n) / \sigma_j$ ,  $n \leq L$ , e  $h_{j,n} = 2n+1$ ,  $n > L$ . Como no sistema de equações representado pela Equação (2.6) existem  $N+1$  equações com  $N+2$  incógnitas, necessita-se de uma equação adicional para solucionar este sistema. Esta equação é usualmente obtida através da condição de truncamento

$$\frac{d}{dz} \phi_{j,N+1}^h(z) = 0. \quad (2.7)$$

Propondo-se para os momentos  $\phi_{j,n}^h(z)$  uma solução do tipo

$$\phi_{j,n}^h(z) \propto g_{j,n}(\xi) e^{-\sigma_j z^2 \xi}, \quad (2.8)$$

onde  $\xi$  é um parâmetro e  $g_{j,n}(\xi)$  é um polinômio de grau  $n$  em  $\xi$ , e inserindo-se a Equação (2.8) na Equação (2.6), verifica-se que os polinômios  $g_{j,n}(\xi)$ , que são comumente conhecidos como polinômios de Chandrasekhar, por terem sido introduzidos por S. Chandrasekhar,<sup>29</sup> satisfazem a relação de recorrência de três termos

$$\xi h_{j,n} g_{j,n}(\xi) = (n+1) g_{j,n+1}(\xi) + n g_{j,n-1}(\xi), \quad (2.9)$$

para  $n = 0, 1, \dots, N$  e podem ser normalizados tomando-se  $g_{j,0}(\xi) = 1$ .

Da condição de truncamento, expressa pela Equação (2.7), observa-se que os valores de  $\xi$  são os zeros do polinômio  $g_{j,N+1}(\xi)$  e são conhecidos como autovalores do método  $P_N$ . Como  $g_{j,N+1}(\xi)$  é um polinômio que só envolve potências pares de  $\xi$ , os autovalores  $P_N$  aparecem em pares simétricos  $\pm \xi_{j,k}$ ,  $k = 1, 2, \dots, K = (N+1)/2$ .

Eliminando-se da Equação (2.9) os polinômios de grau ímpar, pode ser deduzida<sup>27</sup> uma relação de recorrência de três termos que envolve somente os polinômios de Chandrasekhar de grau par, qual seja

$$\frac{n(n-1)}{h_{j,n-1}} g_{j,n-2}(\xi) + \left[ \frac{(n+1)^2}{h_{j,n+1}} + \frac{n^2}{h_{j,n-1}} - h_{j,n} \xi^2 \right] g_{j,n}(\xi) + \frac{(n+1)(n+2)}{h_{j,n+2}} g_{j,n+2}(\xi) = 0. \quad (2.10)$$

Utilizando-se a Equação (2.10) para  $n = 2, 4, \dots, N-1$ , o problema de se calcular os autovalores  $P_N$  pode ser reformulado<sup>27</sup> como o problema de se calcular os autovalores  $\{\xi_{j,k}^2\}$  da matriz tridiagonal  $E$  de ordem  $K$ , com elementos

$$E_{\alpha,\alpha+1} = \frac{2\alpha(2\alpha-1)}{h_{j,2\alpha-2} h_{j,2\alpha-1}}, \quad (2.11a)$$

$$E_{\alpha,\alpha} = \frac{1}{h_{j,2\alpha-2}} \left[ \frac{4(\alpha-1)^2}{h_{j,2\alpha-3}} + \frac{(2\alpha-1)^2}{h_{j,2\alpha-1}} \right] \quad (2.11b)$$

$$E_{\alpha+1,\alpha} = \frac{2\alpha(2\alpha-1)}{h_{j,2\alpha} h_{j,2\alpha-1}}, \quad (2.11c)$$

onde  $\alpha \geq 1$ .

Como para os polinômios de Chandrasekhar verifica-se a relação  $g_{j,n}(-\xi) = (-1)^n g_{j,n}(\xi)$ , somente é necessário o cálculo destes polinômios para os autovalores maiores que zero. Para os autovalores  $\xi_{j,k}$  compreendidos na região do contínuo  $[0, 1]$  utilizou-se<sup>30</sup> a Equação (2.9), iniciando-se com o valor normalizado  $g_{j,0}(\xi_{j,k}) = 1$ . Entretanto, para os autovalores com magnitude maior que a unidade esse método de cálculo não é adequado. Assim, quando  $\xi_{j,k} > 1$ , é obtida, a partir da Equação (2.9), uma relação de recorrência para as razões

$$f_{j,n}(\xi_{j,k}) = \frac{g_{j,n+1}(\xi_{j,k})}{g_{j,n}(\xi_{j,k})}, \quad (2.12)$$

qual seja

$$f_{j,n}(\xi_{j,k}) = h_{j,n}(\xi_{j,k}) - (n+1)f_{j,n-1}(\xi_{j,k}) \quad (2.13)$$

Iniciando-se com o valor  $f_{j,N}(\xi_{j,k}) = 0$  e utilizando-se a Equação (2.13) sucessivamente para  $n = N, N-1, \dots, 1$ , são obtidos os valores das razões  $f_{j,N-1}(\xi_{j,k}), f_{j,N-2}(\xi_{j,k}), \dots, f_{j,0}(\xi_{j,k})$ . Então, os valores dos polinômios podem ser obtidos reescrevendo-se a Equação (2.12) como  $g_{j,n+1}(\xi_{j,k}) = f_{j,n}(\xi_{j,k})g_{j,n}(\xi_{j,k})$  e utilizando-se esta equação sucessivamente para  $n = 0, 1, \dots, N-1$ , com o valor inicial  $g_{j,0}(\xi_{j,k}) = 1$ .

Assim, para uma região uniforme que se estende de  $z_L$  a  $z_R$ , os momentos de Legendre da solução homogênea para o grupo  $j$  podem ser expressos por<sup>27</sup>

$$\phi_{j,n}^h(z) = \sum_{k=1}^K \left[ A_{j,k} e^{-\sigma_j(z-z_L)/\xi_{j,k}} + (-1)^n B_{j,k} e^{-\sigma_j(z-z_R)/\xi_{j,k}} \right] g_{j,n}(\xi_{j,k}), \quad (2.14)$$

onde  $\{A_{j,k}\}$  e  $\{B_{j,k}\}$  são coeficientes a determinar utilizando-se as condições de contorno.

## 2.2 A Solução $P_N$ Particular da Equação de Transporte

A solução geral da Equação (2.1) é uma combinação da solução da versão homogênea dessa equação, como apresentado na Seção 2.1, e uma solução particular, exceto para o primeiro grupo de energia onde a solução homogênea já é a solução geral. A solução particular para o grupo em questão pode ser encontrada por inspeção, acrescentando-se à Equação (2.6) um termo adicional de fonte, correspondente à moderação proveniente dos grupos de maior energia, e propondo-se uma solução com o mesmo comportamento exponencial dos grupos de origem. Conclui-se que a solução particular resultante pode ser escrita na forma<sup>31,32</sup>

$$\psi_j^p(z, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (2n+1) \phi_{j,n}^p(z) P_n(\mu), \quad (2.15)$$

onde o sobrescrito  $p$  denota solução particular e os momentos de Legendre  $\phi_{j,n}^p(z)$  são dados por

$$\phi_{j,n}^p(z) = \sum_{i=1}^{j-1} \sum_{k=1}^K \left[ A_{i,k} e^{-\sigma_i(z-z)/\xi_{i,k}} + (-1)^n B_{i,k} e^{-\sigma_i(z_R-z)/\xi_{i,k}} \right] g_n^{ji}(\xi_{i,k}), \quad (2.16)$$

e satisfazem os primeiros  $N+1$  momentos da Equação (2.1). Considerando-se, por hipótese, que nenhum dos autovalores do grupo  $j$  é tal que  $\sigma_i \xi_{j,k'} = \sigma_j \xi_{i,k}$ , pode-se mostrar que os polinômios generalizados<sup>31,32</sup> de Chandrasekhar  $\{g_n^{ji}(\xi_{i,k})\}$  obedecem o sistema tridiagonal de equações algébricas formado tomando  $n = 0, 1, \dots, N$  na equação

$$\begin{aligned} \left( \frac{\sigma_j \xi_{i,k}}{\sigma_i} \right) h_{j,n} g_n^{ji}(\xi_{i,k}) &= (n+1) g_{n+1}^{ji}(\xi_{i,k}) + n g_{n-1}^{ji}(\xi_{i,k}) \\ &+ \left( \frac{\xi_{i,k}}{\sigma_j} \right) \sum_{\alpha=i}^{j-1} \sigma_{j\alpha}(n) g_n^{\alpha i}(\xi_{i,k}), \end{aligned} \quad (2.17)$$

e usando a condição de truncamento  $g_{N+1}^{ji}(\xi_{i,k}) = 0$ . Estes polinômios podem ser obtidos resolvendo-se o sistema tridiagonal de equações algébricas através de um pacote de sub-rotinas, como discutido na Seção 2.6. O caso degenerado, em que um ou mais autovalores do grupo  $j$  obedecem a relação  $\sigma_i \xi_{j,k'} = \sigma_j \xi_{i,k}$ , será tratado na Seção 2.5.

Entretanto, considerando-se que quando o grupo de partida é o mesmo que o de chegada os polinômios generalizados de Chandrasekhar se reduzem aos polinômios usuais  $\{g_{j,n}(\xi_{j,k})\}$ , a solução geral da Equação (2.1) na aproximação  $P_N$ , dada pela adição da solução particular à homogênea, pode ser generalizada para qualquer grupo  $j = 1, 2, \dots, NDS$  como

$$\psi_j(z, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (2n+1) \phi_{j,n}(z) P_n(\mu), \quad (2.18)$$

onde

$$\phi_{j,n}(z) = \sum_{i=1}^j \sum_{k=1}^K \left[ A_{i,k} e^{-\sigma_i(z-z)/\xi_{i,k}} + (-1)^n B_{i,k} e^{-\sigma_i(z_R-z)/\xi_{i,k}} \right] g_n^{ji}(\xi_{i,k}). \quad (2.19)$$

### 2.3 Determinação dos Coeficientes da Solução Homogênea

Como no método  $P_N$  não é possível satisfazer exatamente as condições de contorno do problema, os coeficientes  $\{A_{j,k}\}$  e  $\{B_{j,k}\}$ , as únicas quantidades que ainda não foram determinadas para a obtenção dos momentos  $\{\phi_{j,n}(z)\}$ , são calculados fazendo-se a solução geral satisfazer condições de contorno aproximadas, como as de Mark e Marshak.<sup>1,11</sup>

Para a condição de contorno de Mark, considerando-se as Equações (2.2) para  $\mu = \mu_m$ ,  $m = 1, 2, \dots, K$ , os zeros positivos do polinômio  $P_{N+1}(\mu)$ , obtém-se o sistema de equações algébricas

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (2n+1) P_n(\mu_m) \sum_{k=1}^K [A_{j,k} + (-1)^n B_{j,k} e^{-\sigma_j \Delta / \xi_{j,k}}] g_{j,n}(\xi_{j,k}) &= L_j(\mu_m) \\ - \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (2n+1) P_n(\mu_m) \sum_{i=1}^{j-1} \sum_{k=1}^K [A_{i,k} + (-1)^n B_{i,k} e^{-\sigma_i \Delta / \xi_{i,k}}] g_n^{ji}(\xi_{i,k}) & \end{aligned} \quad (2.20a)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (2n+1) P_n(\mu_m) \sum_{k=1}^K [B_{j,k} + (-1)^n A_{j,k} e^{-\sigma_j \Delta / \xi_{j,k}}] g_{j,n}(\xi_{j,k}) &= R_j(\mu_m) \\ - \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (2n+1) P_n(\mu_m) \sum_{i=1}^{j-1} \sum_{k=1}^K [B_{i,k} + (-1)^n A_{i,k} e^{-\sigma_i \Delta / \xi_{i,k}}] g_n^{ji}(\xi_{i,k}), & \end{aligned} \quad (2.20b)$$

sendo  $\Delta = z_R - z_L$ .

Para a condição de contorno de Marshak, as Equações (2.2) são multiplicadas por  $P_{2\alpha+1}(\mu)$ ,  $\alpha = 0, 1, \dots, (N-1)/2$ , e integradas na variável  $\mu$  no intervalo  $[0, 1]$ , originando o sistema de equações algébricas

$$\frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (2n+1) S_{\alpha,n} \sum_{k=1}^K [A_{j,k} + (-1)^n B_{j,k} e^{-\sigma_j \Delta / \xi_{j,k}}] g_{j,n}(\xi_{j,k}) = \int_0^1 P_{2\alpha+1}(\mu) L_j(\mu) d\mu$$

$$-\frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (2n+1) S_{\alpha,n} \sum_{i=1}^{j-1} \sum_{k=1}^K \left[ A_{i,k} + (-1)^n B_{i,k} e^{-\sigma_i \Delta / \xi_{i,k}} \right] g_n^{ji}(\xi_{i,k}) \quad (2.21a)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (2n+1) S_{\alpha,n} \sum_{k=1}^K \left[ B_{j,k} + (-1)^n A_{j,k} e^{\sigma_j \Delta / \xi_{j,k}} \right] g_{j,n}(\xi_{j,k}) &= \int_0^1 P_{2\alpha+1}(\mu) R_j(\mu) d\mu \\ -\frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (2n+1) S_{\alpha,n} \sum_{i=1}^{j-1} \sum_{k=1}^K \left[ B_{i,k} + (-1)^n A_{i,k} e^{-\sigma_i \Delta / \xi_{i,k}} \right] g_n^{ji}(\xi_{i,k}), & \quad (2.21b) \end{aligned}$$

onde as constantes

$$S_{\alpha,n} = \int_0^1 P_{2\alpha+1}(\mu) P_n(\mu) d\mu \quad (2.22)$$

podem ser calculadas por recorrência como apresentado na Referência 33.

## 2.4 Expressões para o Cálculo dos Fluxos e das Correntes de Grupo

Considerando-se que as constantes  $\{A_{j,k}\}$  e  $\{B_{j,k}\}$  foram determinadas através das Equações (2.20) ou (2.21), os fluxos e as correntes de grupo podem ser obtidos através de

$$\phi_{j,0}(z) = \int_{-1}^1 \psi_j(z, \mu) d\mu \quad (2.23a)$$

e

$$\phi_{j,1}(z) = \int_{-1}^1 \psi_j(z, \mu) \mu d\mu, \quad (2.23b)$$

respectivamente. Assim, de acordo com a Equação (2.19) para  $n=0$  e  $n=1$ :

$$\phi_{j,0}(z) = \sum_{i=1}^j \sum_{k=1}^K \left[ A_{i,k} e^{-\sigma_i(z-z_L)/\xi_{i,k}} + B_{i,k} e^{-\sigma_i(z_R-z)/\xi_{i,k}} \right] g_0^{ji}(\xi_{i,k}) \quad (2.24a)$$

e

$$\phi_{j,1}(z) = \sum_{i=1}^j \sum_{k=1}^K \left[ A_{i,k} e^{-\sigma_i(z-z_L)/\xi_{i,k}} - B_{i,k} e^{-\sigma_i(z_R-z)/\xi_{i,k}} \right] g_1^{ji}(\xi_{i,k}). \quad (2.24b)$$

## 2.5 Soluções $P_N$ Degeneradas

Considerando-se, agora, uma situação específica, denominada caso degenerado, que pode ocorrer quando, entre dois grupos distintos, existir a presença de pelo menos um autovalor que satisfaça a relação  $\sigma_i \xi_{j,k} = \sigma_j \xi_{i,k}$ , onde  $\sigma_i$  e  $\sigma_j$  representam, respectivamente, as seções de choque macroscópicas totais dos grupos  $i$  e  $j$  e  $\xi_{i,k}$  e  $\xi_{j,k}$  representam, respectivamente, o  $k$ -ésimo autovalor dos grupos  $i$  e  $j$  (se necessário, pode-se reordenar os autovalores desses grupos de modo que o índice  $k$  dos autovalores que causam a degenerescência seja sempre o mesmo). Nestas condições, a maneira de se calcular a contribuição do grupo de maior energia para a solução particular do grupo de menor energia precisa ser modificada,<sup>34</sup> pois o comportamento exponencial presente no termo inhomogêneo da equação diferencial correspondente ao grupo de menor energia está também presente na solução da versão homogênea desta equação.

Assim, supondo-se inicialmente que não exista degenerescência, a contribuição do autovalor  $\xi_{i,k}$ , pertencente ao grupo  $i$ , para o momento de Legendre de ordem  $n$  da solução particular do grupo  $j$  pode ser expressa por

$$\phi_{j,n}^{p,i}(z) = C_{i,k}^n(z; \xi_{i,k}/\sigma_i) \left[ \hat{g}_n^{ji}(\xi_{i,k}) + \gamma_k g_{j,n}(\sigma_j \xi_{i,k}/\sigma_i) \right], \quad (2.25)$$

com  $C_{i,k}^n(z; \xi) = A_{i,k} e^{-(z-z_L)/\xi} + (-1)^n B_{i,k} e^{-(z_R-z)/\xi}$ , sendo  $\hat{g}_n^{ji}(\xi)$  o  $n$ -ésimo polinômio de um conjunto qualquer de polinômios que satisfaz a Equação (2.17),  $g_{j,n}(\xi)$  o polinômio de Chandrasekhar para o grupo  $j$  e

$$\gamma_k = \frac{-\hat{g}_{N+1}^{ji}(\xi_{i,k})}{g_{j,N+1}(\sigma_j \xi_{i,k}/\sigma_i)}. \quad (2.26)$$

O termo entre colchetes na Equação (2.25) pode ser visto como uma maneira alternativa de se definir os polinômios generalizados de Chandrasekhar. Para o caso degenerado, a constante  $\gamma_k$  se torna singular pois  $\hat{g}_{N+1}^{j_i}(\xi_{i,k}) \neq 0$  e  $g_{j,N+1}(\sigma_j \xi_{i,k}/\sigma_i) = 0$  e, neste caso, a Equação (2.25) precisa ser modificada. Como múltiplos da solução  $P_N$  homogênea podem sempre ser arbitrariamente adicionados à solução  $P_N$  particular,<sup>27</sup> selecionando-se múltiplos convenientes da solução  $P_N$  homogênea e adicionando-os à Equação (2.25) esta singularidade pode ser removida. Desta forma, se pode escrever

$$\begin{aligned} \phi_{j,n}^{n,i}(z) &= C_{i,k}^n(z; \xi_{i,k}/\sigma_i) \hat{g}_{i,n}^n(\xi_{i,k}) \\ &+ \gamma_k \left[ C_{i,k}^n(z; \xi_{i,k}/\sigma_i) g_{j,n}(\sigma_j \xi_{i,k}/\sigma_i) - C_{i,k}^n(z; \xi_{j,k}/\sigma_j) g_{j,n}(\xi_{j,k}) \right]. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Tomando-se o limite  $\xi_{i,k} \rightarrow \sigma_i \xi_{j,k}/\sigma_j$  e utilizando-se a regra de L'Hospital, obtém-se a contribuição degenerada do grupo  $i$  para o grupo  $j$ , qual seja,

$$\begin{aligned} \phi_{j,n}^{r,i}(z) &= C_{i,k}^n(z; \xi_{i,k}/\sigma_i) \left[ \hat{g}_{i,n}^n(\xi_{i,k}) + \delta_k \hat{g}_{j,n}(\xi_{j,k}) \right] \\ &+ \frac{\sigma_i \delta_k}{\sigma_j} C_{i,k}^n(z; \xi_{i,k}/\sigma_i) g_{j,n}(\xi_{j,k}), \end{aligned} \quad (2.28)$$

onde

$$\hat{g}_{j,n}(\xi_{j,k}) = \frac{dg_{j,n}(\xi)}{d\xi} \Big|_{\xi=\xi_{j,k}}, \quad (2.29)$$

$$\delta_k = \frac{-\hat{g}_{N+1}^{j_i}(\xi_{i,k})}{\hat{g}_{j,N+1}(\xi_{j,k})} \quad (2.30)$$

$$\hat{C}_{i,k}^n(z; \xi_{i,k}/\sigma_i) = \frac{\sigma_i}{\xi_{i,k}^2} \left[ A_{i,k}(z - z_L) e^{-\sigma_i(z-z_L)/\xi_{i,k}} + (-1)^n B_{i,k}(z - z_R) e^{-\sigma_i(z_R-z)/\xi_{i,k}} \right]. \quad (2.31)$$

Se o grupo  $j$  não for o último grupo de energia, a degenerescência se propagará aos grupos  $\alpha = j+1, j+2, \dots, NDS$ . Para abordar esta propagação da degenerescência são introduzidos termos na solução particular destes grupos cujo comportamento espacial é expresso pelo produto de fatores lineares e exponenciais. Assim, a contribuição degenerada para estes grupos é expressa por

$$\begin{aligned} \phi_{\alpha,n}^{p,j}(z) = & C_{i,k}^n(z; \xi_{i,k}/\sigma_i) \left[ \hat{g}_n^{\alpha i}(\xi_{i,k}) + \delta_k \dot{g}_n^{\alpha j}(\xi_{j,k}) \right] \\ & + \frac{\sigma_i \delta_i}{\sigma_j} C_{i,k}^n(z; \xi_{i,k}/\sigma_i) \dot{g}_n^{\alpha j}(\xi_{j,k}), \end{aligned} \quad (2.32)$$

onde

$$\dot{g}_n^{\alpha j}(\xi_{j,k}) = \left. \frac{d\dot{g}_n^{\alpha j}(\xi)}{d\xi} \right|_{\xi = \xi_{j,k}}, \quad (2.33)$$

e os polinômios  $\hat{g}_n^{\alpha i}(\xi_{i,k})$  satisfazem o sistema tridiagonal formado usando

$$\begin{aligned} \left( \frac{\sigma_{i+1} \xi_{i,k}}{\sigma_i} \right) h_{\alpha,n} \hat{g}_n^{\alpha i}(\xi_{i,k}) = & (n+1) \hat{g}_{n+1}^{\alpha i}(\xi_{i,k}) + n \hat{g}_{n-1}^{\alpha i}(\xi_{i,k}) \\ & \left[ \left( \frac{\xi_{i,k}}{\sigma_i} \right) \left[ \sum_{m=i}^{j-1} \sigma_{\alpha m}(n) g_n^{mi}(\xi_{i,k}) + \sum_{m=j}^{\alpha-1} \sigma_{\alpha m}(n) \hat{g}_n^{mi}(\xi_{i,k}) \right] \right] \end{aligned} \quad (2.34)$$

para  $n = 0, 1, \dots, N$  e as condições de truncamento  $\hat{g}_{N+1}^{\alpha i}(\xi_{i,k}) = -\delta_k \dot{g}_{N+1}^{\alpha j}(\xi_{j,k})$ .

Alguns detalhes relacionados ao cálculo de alguns destes polinômios precisam ser fornecidos para que se possa implementar as soluções  $\mathbf{P}_N$  degeneradas. Os polinômios  $\hat{g}_n^{ii}(\xi_{i,k})$  foram obtidos utilizando-se o valor inicial  $\hat{g}_0^{ii}(\xi_{i,k}) = 0$  e a Equação (2.17) para  $n = 0, 1, \dots, N$ . No cálculo das derivadas dos polinômios de Chandrasekhar,  $\dot{g}_{j,n}(\xi_{j,k})$ , foi usado valor inicial  $\dot{g}_{j,n}(\xi_{j,k}) = 0$  e a relação de recorrência

$$\xi h_{j,n} \dot{g}_{j,n}(\xi) = (n+1) \dot{g}_{j,n+1}(\xi) + n \dot{g}_{j,n-1}(\xi) - h_{j,n} g_{j,n}(\xi), \quad (2.35)$$

para  $n = 0, 1, \dots, N$ . Ao invés de se utilizar separadamente os polinômios  $\hat{g}_n^{\alpha i}(\xi_{i,k})$  e as derivadas dos polinômios generalizados de Chandrasekhar  $\dot{g}_n^{\alpha j}(\xi_{j,k})$  na Equação (2.32) para  $\alpha = j+1, j+2, \dots, NDS$ , usou-se diretamente um novo polinômio, definido como

$$q_n^\alpha(\xi_{i,k}) = \hat{g}_n^{\alpha i}(\xi_{i,k}) + \delta_k \dot{g}_n^{\alpha j}(\xi_{j,k}). \quad (2.36)$$

Estes polinômios obedecem o sistema tridiagonal formado usando

$$\begin{aligned}
\left(\frac{\sigma_\alpha \xi_{i,k}}{\sigma_i}\right) h_{\sigma,n} q_\sigma^\alpha(\xi_{i,k}) &= (n+1)q_{n+1}^\sigma(\xi_{i,k}) + nq_{n-1}^\sigma(\xi_{i,k}) \\
&- \left(\frac{\delta_\nu}{\xi_{j,k}}\right) \left[ (n+1)g_{n-1}^\alpha(\xi_{i,k}) + ng_{n-1}^{\sigma\nu}(\xi_{i,k}) \right] \\
&+ \left(\frac{\xi_{i,k}}{\sigma_i}\right) \left[ \sum_{\alpha=i}^{i-1} \sigma_{\alpha n}(\alpha) g_\alpha^{\sigma\nu}(\xi_{i,k}) + \sum_{\alpha=i}^{\alpha-1} \sigma_{\alpha n}(\alpha) q_\alpha^n(\xi_{i,k}) \right] \quad (2.37)
\end{aligned}$$

para  $n = 0, 1, \dots, N$  e a condição de truncamento  $q_{N+1}^\alpha(\xi_{i,k}) = 0$ .

## 2.6 Implementação Computacional e Resultados Numéricos

A estratégia adotada na parte computacional para solucionar um determinado problema requer que, uma vez encontrada a solução para um grupo de energia qualquer, sejam calculadas todas as quantidades de interesse que definem a contribuição do grupo em questão para os grupos restantes. Assim, para cada grupo, os autovalores e os polinômios de Chandrasekhar são calculados conforme apresentado nas Seções 2.1 e 2.2, sendo que para os autovalores é utilizada a sub-rotina IMTQL1 pertencente ao pacote de sub-rotinas EISPACK;<sup>35</sup> para os polinômios generalizados de Chandrasekhar e para os polinômios definidos pela Equação (2.36) é utilizada a sub-rotina DGTSL pertencente ao pacote de sub-rotinas LINPACK.<sup>36</sup> Após a obtenção dos coeficientes  $\{A_{j,k}\}$  e  $\{B_{j,k}\}$ , através da solução das Equações (2.20) ou (2.21), utilizando-se as sub-rotinas DGEFA e DGESL do pacote LINPACK, as quantidades de interesse para os grupos restantes são acumuladas, evitando-se, assim, o armazenamento de informações volumosas, como os autovalores e os polinômios de Chandrasekhar para todos os grupos de energia. Esta estratégia permite uma grande economia de memória no computador, tornando a solução grupo a grupo muito conveniente para a faixa de energia de moderação.

Durante a implementação computacional deste desenvolvimento foram realizados alguns cálculos comparativos com o objetivo de validar a metodologia aqui

apresentada. No primeiro trabalho realizado,<sup>31</sup> foram comparados, com resultados publicados na literatura,<sup>26</sup> os fluxos escalares para os dois primeiros grupos de um problema de vinte grupos de energia com espalhamento anisotrópico de ordem dez. Este problema-teste é definido como uma placa de espessura igual a 20 cm, com seções de choque macroscópicas ( $\text{cm}^{-1}$ ) descritas através das expressões matemáticas, para  $i = 1, 2, \dots, 20$ ,

$$\sigma_i = \left[ 2i - 3(\delta_{i,5} + \delta_{i,10}) \right] / 20 \quad (2.38a)$$

$$\sigma_{ij}(l) = (2l+1)s_{ij}^l / [100(i-j+1)] \quad (2.38b)$$

para  $j = 1, 2, \dots, i$  e  $l = 0, 1, \dots, 10$ , sendo

$$s_{ij} = (140 - i - j) / 200. \quad (2.38c)$$

A placa está sujeita à uma distribuição isotrópica unitária de radiação incidente somente no primeiro grupo de energia e na superfície à esquerda, isto é,

$$L_i(\mu) = \delta_{i,1} \quad (2.38d)$$

$$R_i(\mu) = 0. \quad (2.38e)$$

Verificou-se, nestes cálculos, uma convergência mais lenta dos resultados obtidos nos contornos da placa com o aumento da ordem de aproximação  $N$ , principalmente no contorno de incidência, o que confirma observações anteriores.<sup>19,27</sup> Por exemplo, para a aproximação  $N = 59$ , o maior desvio encontrado em relação aos resultados da literatura para o primeiro grupo foi de 0,002% no contorno à direita e para o segundo grupo foi de 0,19% no contorno à esquerda.

No segundo trabalho<sup>32</sup> foram considerados dois problemas-teste: no primeiro, foram comparados com resultados obtidos na literatura,<sup>26</sup> para diversas ordens de aproximação, os fluxos escalares, os albedos de grupo e os fatores de transmissão para todos os vinte grupos de energia do problema descrito anteriormente. Na Tabela 1 são apresentados os resultados alcançados com a aproximação  $P_{299}$ , assim como os obtidos

através do método  $F_N$  na Referência 26, os quais são precisos dentro de  $\pm 1$  no último algarismo mostrado, para os albedos de grupo

$$A_i^* = J_i^-(z_L)/J_1^+(z_L) \quad (2.39a)$$

e os fatores de transmissão de grupo

$$B_i^* = J_i^+(z_R)/J_1^+(z_L), \quad (2.39b)$$

onde as correntes parciais são definidas por

$$J_i^\pm(z) = \int_0^1 \psi_i(z, \pm\mu) \mu d\mu. \quad (2.40)$$

No segundo problema, foram comparados, com resultados da literatura, para diversas ordens de aproximação, os albedos e os fatores de transmissão de grupo para os dezenove grupos de energia de um problema definido como uma placa de ferro de 10 cm de espessura, com espalhamento isotrópico e constantes de grupo tabeladas na Referência 37, sujeita, também, a uma distribuição isotrópica unitária incidente somente no primeiro grupo de energia e na superfície à esquerda. Na Tabela 2 são apresentados os resultados alcançados com a aproximação  $P_{299}$ , assim como os obtidos através do método  $F_N$  na Referência 37, os quais são precisos dentro de  $\pm 1$  no último algarismo mostrado.

No terceiro trabalho<sup>34</sup> foram comparados com resultados publicados na literatura<sup>37</sup> e são apresentados na Tabela 3 os albedos e os fatores de transmissão de grupo calculados para um problema de dezesseis grupos de energia definido como uma placa de 1 cm de espessura com espalhamento isotrópico, sujeita a uma distribuição isotrópica unitária incidente somente no primeiro grupo de energia e na superfície à esquerda, com seções de choque macroscópicas totais ( $\text{cm}^{-1}$ ) definidas por  $\sigma_1 = 11$ ,  $\sigma_i = 10 + i/14$ ,  $i = 2, 3, \dots, 14$ ,  $\sigma_{15} = 10^4$ ,  $\sigma_{16} = 20$ , e as seções de choque de transferência macroscópicas ( $\text{cm}^{-1}$ ) por  $\sigma_{i+k,i} = 3/(k+1)$ , para  $i = 1, 2, \dots, 14$  e  $k = 0, 1, \dots, 16-i$ ,  $\sigma_{15,15} = 0$ ,  $\sigma_{16,15} = 10^{-4}$  e  $\sigma_{16,16} = 5$ . Como os grupos 1 e 14 possuem as mesmas seções de choque totais e seções de choque transferência intragrupo, este conjunto de constantes de grupo

fictício apresenta uma degenerescência entre estes grupos de energia, para todos os autovalores.<sup>37</sup>

Tabela 1 – Albedos e fatores de transmissão para o problema de 20 grupos de energia.

$i$	$A_i^*$		$B_i^*$	
	$P_{299}$	Ref. 26	$P_{299}$	Ref. 26
1	6,4355(-3) <sup>†</sup>	6,4394(-3)	7,3100(-2)	7,3100(-2)
2	2,4470(-3)	2,4468(-3)	2,6667(-3)	2,6667(-3)
3	1,3719(-3)	1,3718(-3)	1,0693(-3)	1,0693(-3)
4	9,0667(-4)	9,0655(-4)	5,7560(-4)	5,7560(-4)
5	9,1012(-4)	9,1002(-4)	6,0465(-4)	6,0465(-4)
6	5,1704(-4)	5,1696(-4)	2,5976(-4)	2,5976(-4)
7	4,1129(-4)	4,1123(-4)	1,8942(-4)	1,8942(-4)
8	3,3801(-4)	3,3795(-4)	1,4482(-4)	1,4482(-4)
9	2,8454(-4)	2,8449(-4)	1,1456(-4)	1,1456(-4)
10	2,8841(-4)	2,8836(-4)	1,1340(-4)	1,1340(-4)
11	2,1487(-4)	2,1483(-4)	7,7912(-5)	7,7912(-5)
12	1,8889(-4)	1,8886(-4)	6,5506(-5)	6,5506(-5)
13	1,6801(-4)	1,6797(-4)	5,5914(-5)	5,5914(-5)
14	1,5083(-4)	1,5080(-4)	4,8312(-5)	4,8312(-5)
15	1,3648(-4)	1,3645(-4)	4,2175(-5)	4,2175(-5)
16	1,2433(-4)	1,2430(-4)	3,7144(-5)	3,7144(-5)
17	1,1392(-4)	1,1390(-4)	3,2964(-5)	3,2964(-5)
18	1,0493(-4)	1,0491(-4)	2,9452(-5)	2,9452(-5)
19	9,7093(-5)	9,7071(-5)	2,6472(-5)	2,6472(-5)
20	9,0209(-5)	9,0188(-5)	2,3920(-5)	2,3920(-5)

<sup>†</sup>Leia como  $6,4355 \times 10^{-3}$

Tabela 2 – Albedos e fatores de transmissão para o problema de 19 grupos de energia.

$i$	$A_i^*$		$B_i^*$	
	$P_{299}$	Ref. 37	$P_{299}$	Ref. 37
1	1,3055(-2) <sup>†</sup>	1,3060(-2)	2,4188(-3)	2,4188(-3)
2	2,6477(-2)	2,6476(-2)	3,9163(-4)	3,9163(-4)
3	2,0014(-2)	2,0013(-2)	2,9446(-4)	2,9446(-4)
4	2,0421(-2)	2,0420(-2)	3,0057(-4)	3,0057(-4)
5	2,1217(-2)	2,1216(-2)	3,1339(-4)	3,1339(-4)
6	2,2651(-2)	2,2650(-2)	3,3596(-4)	3,3596(-4)
7	1,6399(-2)	1,6399(-2)	2,4287(-4)	2,4287(-4)
8	1,8059(-2)	1,8059(-2)	2,6601(-4)	2,6601(-4)
9	2,0613(-2)	2,0613(-2)	2,9930(-4)	2,9930(-4)
10	2,4718(-2)	2,4717(-2)	3,4873(-4)	3,4873(-4)
11	3,1746(-2)	3,1745(-2)	4,2569(-4)	4,2569(-4)
12	4,4142(-2)	4,4141(-2)	5,5031(-4)	5,5031(-4)
13	1,8729(-2)	1,8729(-2)	3,1938(-4)	3,1938(-4)
14	1,7023(-2)	1,7023(-2)	2,8604(-4)	2,8604(-4)
15	1,2201(-2)	1,2201(-2)	1,9924(-4)	1,9924(-4)
16	3,5378(-3)	3,5378(-3)	5,9937(-5)	5,9937(-5)
17	9,0059(-4)	9,0059(-4)	1,4905(-5)	1,4905(-5)
18	6,2045(-5)	6,2046(-5)	1,0301(-6)	1,0301(-6)
19	9,1047(-6)	9,1048(-6)	1,5020(-7)	1,5020(-7)

<sup>†</sup>Leia como  $1,3055 \times 10^{-2}$

Tabela 3 – Albedos e fatores de transmissão para o problema de 16 grupos de energia.

$i$	$A_i^*$		$B_i^*$	
	$P_{299}$	Ref. 37	$P_{299}$	Ref. 37
1	6,6349(-2) <sup>†</sup>	6,6351(-2)	5,1058(-6)	5,1058(-6)
2	4,2003(-2)	4,2002(-2)	4,4781(-6)	4,4781(-6)
3	3,2484(-2)	3,2483(-2)	4,9308(-6)	4,9308(-6)
4	2,7502(-2)	2,7501(-2)	5,4649(-6)	5,4649(-6)
5	2,4382(-2)	2,4382(-2)	6,0283(-6)	6,0283(-6)
6	2,2222(-2)	2,2221(-2)	6,6050(-6)	6,6050(-6)
7	2,0624(-2)	2,0624(-2)	7,1879(-6)	7,1879(-6)
8	1,9388(-2)	1,9388(-2)	7,7730(-6)	7,7730(-6)
9	1,8399(-2)	1,8399(-2)	8,3577(-6)	8,3577(-6)
10	1,7586(-2)	1,7586(-2)	8,9399(-6)	8,9399(-6)
11	1,6904(-2)	1,6904(-2)	9,5178(-6)	9,5178(-6)
12	1,6321(-2)	1,6321(-2)	1,0090(-5)	1,0090(-5)
13	1,5816(-2)	1,5816(-2)	1,0655(-5)	1,0655(-5)
14	1,5373(-2)	1,5373(-2)	1,1212(-5)	1,1212(-5)
15	1,7893(-5)	1,7895(-5)	2,3442(-9)	2,3446(-9)
16	8,1586(-3)	8,1585(-3)	2,2968(-6)	2,2968(-6)

<sup>†</sup>Leia como  $6,6349 \times 10^{-2}$

É conveniente mencionar que, embora os resultados aqui apresentados tenham sido obtidos utilizando-se a condição de contorno de Mark, a condição de contorno de Marshak também foi utilizada para resolver os problemas analisados nesta seção. De uma forma geral, nas aproximações variando de ordem moderada a alta, isto é, com  $N$  excursionando entre 59 e 299, a condição de contorno de Mark produziu resultados levemente superiores para os fluxos escalares de grupo enquanto que a condição de contorno de Marshak propiciou resultados levemente superiores para os albedos e os fatores de transmissão de grupo.

Para finalizar, é importante citar que o formalismo apresentado nesta seção também está sendo utilizado com sucesso em outro trabalho,<sup>38</sup> onde o método  $P_N$  está sendo desenvolvido para cálculos de blindagem em reatores rápidos.

### 3 A SOLUÇÃO $P_N$ DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE MATRICIAL APLICADA AO CÁLCULO DE CÉLULA

Este capítulo se inicia com a formulação do problema do cálculo de célula que se pretende resolver neste trabalho. Seguindo, de uma forma geral, a abordagem descrita na Referência 19, é apresentada a solução da versão homogênea da equação de transporte escrita na forma matricial em geometria plana. Essa solução  $P_N$  é, então, aplicada às distintas regiões que compõem a célula e são mostradas as expressões para o cálculo dos fluxos escalares e das correntes de grupo. Através da aplicação das condições de continuidade, é apresentado o sistema de equações lineares algébricas cuja solução determina o fator de multiplicação efetivo da célula e os coeficientes da solução  $P_N$  homogênea. E, finalmente, é abordada a estratégia utilizada na parte computacional e são apresentados alguns resultados numéricos, os quais são comparados com resultados obtidos através do código ANISN<sup>39</sup> de ordenadas discretas.<sup>1</sup>

#### 3.1 Formulação do Problema

Na Figura 1 está representada a geometria da metade de uma célula plana típica de um reator térmico, composta de  $R$  regiões. A região 1, compreendida entre  $z_0 = 0$  e  $z_1$ , contém o combustível, sendo  $z_1$  a sua semi-espessura, as regiões  $r = 2, 3, \dots, R-1$ , compreendidas entre  $z_1$  e  $z_{R-1}$ , representam regiões intermediárias e a região externa  $R$  está compreendida entre  $z_{R-1}$  e  $z_R$ , sendo  $(z_R - z_{R-1})$  sua semi-espessura. Para simular um arranjo celular repetitivo de extensão infinita ao longo do eixo  $z$ , considera-se a metade da célula como mostrado na Figura 1 e impõe-se condições de contorno de reflexão em  $z = z_0 = 0$  e  $z = z_R$ .

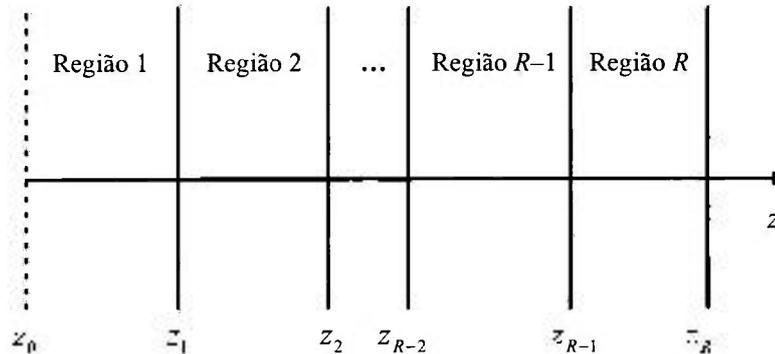


Figura 1 – Geometria de uma célula plana típica.

A equação de transporte pode ser escrita na forma matricial, para todos os *NGR* grupos de energia, numa região *r* da célula, como

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \Psi_r(z, \mu) + \mathbf{S}_r \Psi_r(z, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L P_l(\mu) \mathbf{T}_{r,l} \int_{-1}^1 P_l(\mu') \Psi_r(z, \mu') d\mu', \quad (3.1)$$

onde  $z \in (z_{r-1}, z_r)$  é a variável espacial, medida em cm e  $\mu \in [-1, 1]$  é o co-seno do ângulo polar com relação ao eixo *z*, que especifica a direção do movimento dos nêutrons. Nesta equação, o vetor  $\Psi_r(z, \mu)$ , de dimensão *NGR*, contém os fluxos angulares de grupo  $\psi_{r,1}(z, \mu), \psi_{r,2}(z, \mu), \dots, \psi_{r,NGR}(z, \mu)$ , a matriz diagonal  $\mathbf{S}_r$  contém as seções de choque macroscópicas totais de grupo  $s_{r,1}, s_{r,2}, \dots, s_{r,NGR}$  e a matriz  $\mathbf{T}_{r,l}$  denota o momento de Legendre de ordem *l* da matriz de transferência e tem  $\sigma'_{ji}(l)$ , o *l*-ésimo coeficiente da expansão (em polinômios de Legendre) da seção de choque macroscópica de transferência do grupo *i* para o grupo *j*, como elemento na posição  $(j, i)$ . No caso mais geral, incluindo fissão,  $\sigma'_{ji}(l)$  é dado por

$$\sigma'_{ji}(l) = \left( \frac{1}{k} \right) (\nu \sigma_f)_i^r \chi_{ji}^r \delta_{l,0} \delta_{r,1} + \sigma'_{s,ji}(l), \quad (3.2)$$

onde *k* é o autovalor dominante no problema de busca da criticalidade,  $\chi_{ji}^r$  é a fração de nêutrons produzidos no grupo *j* como resultado de uma fissão provocada por um nêutron do grupo *i*,  $(\nu \sigma_f)_i^r$  é o valor médio, no grupo *i*, do número médio de nêutrons emitidos

por fissão multiplicado pela seção de choque macroscópica de fissão e  $\sigma_{s,ji}^r(l)$  é o coeficiente da expansão (em polinômios de Legendre) da seção de choque de transferência por espalhamento do grupo  $i$  para o grupo  $j$ . Na Equação (3.2), o delta de Kronecker  $\delta_{l,0}$  significa que se está considerando emissão isotrópica de nêutrons na fissão, o que não é uma restrição inerente ao modelo aqui utilizado, podendo ser relaxada se assim se desejar.

Para completar a formulação do problema, é necessário especificar as condições de contorno aplicadas em cada região material. Para a região combustível,  $r = 1$ , a condição de reflexão em  $z = z_0 = 0$  pode ser escrita, na formulação matricial, como

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

onde  $\mu \geq 0$ , enquanto que, para  $r = 1, 2, \dots, R-1$ , são impostas as condições de continuidade do fluxo angular nas interfaces

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

onde  $\mu > 0$ . E, em  $z = z_R$ , utiliza-se, novamente, a condição de reflexão

$$\Psi_R(z_R, \mu) = \Psi_R(z_R, -\mu), \quad (3.5)$$

onde  $\mu \geq 0$ .

O problema que se pretende resolver neste trabalho consiste na determinação das soluções estacionárias nas diversas regiões da célula que correspondem ao estado crítico da mesma. Em outras palavras, deseja-se determinar o valor do fator de multiplicação efetivo  $k_{ef}$  na Equação (3.2), bem como os fluxos escalares e as correntes de grupo correspondentes.

Para atingir este objetivo, das Equações (3.3) e (3.5) são obtidas relações que permitem reduzir pela metade o número de coeficientes das soluções  $P_N$  matriciais aplicadas ao combustível, região 1, e a região mais externa, região  $R$ , respectivamente, como é mostrado em detalhes nas Seções 3.3 e 3.5. Utilizando-se a Equação (3.4) para  $r = 1, 2, \dots, R-1$  constrói-se, com a utilização de condições de contorno  $P_N$  aproximadas, um sistema de equações algébricas da forma

$$MT = 0, \quad (3.6)$$

cujos componentes do vetor  $T$  são os coeficientes das soluções  $P_N$  matriciais aplicadas às regiões materiais que compõem a célula, como será apresentado na Seção 3.6. Para que este sistema de equações algébricas admita solução diferente da solução trivial, é necessário que o determinante da matriz  $M$  seja nulo. Assim, utilizando-se um processo iterativo, como discutido na Seção 3.7, que permita calcular o valor de  $k_{ef}$  que anule o determinante desta matriz e obtendo-se, para esta condição, o vetor correspondente do espaço nulo da matriz  $M$ , pode-se calcular os fluxos escalares e as correntes de grupo em qualquer ponto espacial da célula.

### 3.2 A Solução $P_N$ Homogênea da Equação de Transporte Matricial

Considera-se, agora, a situação em que se deseja resolver a equação de transporte para  $NGR$  grupos de energia escrita na forma matricial conforme apresentado na Equação (3.1). Para simplificar a notação, o índice  $r$  que denota a região considerada será omitido nesta seção, sempre que a sua falta não prejudique a clareza da apresentação. No método utilizado, é introduzida<sup>19</sup> uma variável óptica  $\tau = zs_{min}$ , onde  $s_{min}$  é o valor mínimo do conjunto  $\{s_j\}$ . Esta variável representa o menor comprimento óptico dentre todos os  $NGR$  grupos de energia e possibilita o uso de unidades adimensionais. Desta forma, a Equação (3.1) pode ser reescrita como

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} \Psi(\tau, \mu) + \Sigma \Psi(\tau, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L P_l(\mu) C_l \int_{-1}^1 P_l(\mu') \Psi(\tau, \mu') d\mu', \quad (3.7)$$

para  $\tau \in (\tau_{r-1}, \tau_r)$  e  $\mu \in [-1, 1]$ . A matriz diagonal  $\Sigma$  possui elementos  $\sigma_j = s_j/s_{min}$  e as matrizes de transferência adimensionais são definidas como  $C_l = T_l/s_{min}$ .

Seguindo e generalizando trabalhos anteriores,<sup>27,33</sup> a solução  $P_N$  para a Equação (3.7) pode ser expressa por

$$\Psi(\tau, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (2n+1) P_n(\mu) \sum_{j=1}^J \left[ A_j e^{-i(\tau-r-1)\xi_j} + (-1)^n B_j e^{-i(\tau-r)\xi_j} \right] G_n(\xi_j), \quad (3.8)$$

onde  $N$  é considerado ímpar,  $P_n(\mu)$  denota o polinômio de Legendre de ordem  $n$ ,  $\{A_j\}$  e  $\{B_j\}$  são coeficientes a determinar utilizando-se as condições de contorno da região e  $\xi_j$ ,  $j = 1, 2, \dots, J = NGR(N+1)/2$  representam os autovalores do método  $P_N$ , os quais são determinados como descrito no final desta seção. O vetor  $G_n(\xi)$  obedece à relação de recorrência de três termos

$$\xi H_n G_n(\xi) = (n+1) G_{n+1}(\xi) + n G_{n-1}(\xi) \quad (3.9)$$

para  $n = 0, 1, \dots, N$ , sendo

$$H_n = (2n+1)\Sigma - C_n \quad (3.10)$$

para  $n \leq L$  e

$$H_n = (2n+1)\Sigma \quad (3.11)$$

para  $n > L$ , com o vetor  $G_{N+1}(\xi)$  obedecendo a condição de truncamento  $G_{N+1}(\xi) = \mathbf{0}$ , para  $\xi \in \{\xi_j\}$ .

Eliminando-se da Equação (3.9) os vetores  $G$  de ordem ímpar obtém-se, para  $n = 0, 2, \dots, N-1$ ,

$$X_n G_{n-2}(\xi) + Y_n G_n(\xi) + Z_n G_{n+2}(\xi) = \xi^2 G_n(\xi) \quad (3.12)$$

onde

$$X_n = n(n-1)H_n^{-1}H_{n-1}^{-1}, \quad (3.13a)$$

$$Y_n = n^2 H_n^{-1} H_{n-1}^{-1} + (n+1)^2 H_n^{-1} H_{n+1}^{-1}, \quad (3.13b)$$

$$Z_n = (n+1)(n+2)H_n^{-1}H_{n+1}^{-1}. \quad (3.13c)$$

Utilizando-se a Equação (3.12) em conjunto com a condição de truncamento, o problema de se determinar os vetores  $\mathbf{G}_n(\xi_j)$  e os autovalores  $\xi_j$  pode ser redefinido como o auto-sistema

$$A\mathbf{G}_p(\xi) = \xi^2 \mathbf{G}_p(\xi), \quad (3.14)$$

onde a matriz  $A$  é uma matriz quadrada de ordem  $J = NGR(N+1)/2$  que possui a estrutura

$$A = \begin{bmatrix} \mathbf{Y}_0 & \mathbf{Z}_0 & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{X}_2 & \mathbf{Y}_2 & \mathbf{Z}_2 & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{X}_4 & \mathbf{Y}_4 & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{Y}_{N-5} & \mathbf{Z}_{N-5} & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{X}_{N-3} & \mathbf{Y}_{N-3} & \mathbf{Z}_{N-3} \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} & \mathbf{X}_{N-1} & \mathbf{Y}_{N-1} \end{bmatrix} \quad (3.15)$$

e tem como autovalores  $\xi_j^2$ . O autovetor  $\mathbf{G}_p(\xi_j)$  correspondente possui como elementos os vetores de ordem par  $\mathbf{G}_0(\xi_j), \mathbf{G}_2(\xi_j), \dots, \mathbf{G}_{N-1}(\xi_j)$ . De uma maneira similar se poderia eliminar da Equação (3.9) os vetores  $\mathbf{G}$  de ordem par e se obter uma matriz análoga à matriz  $A$  cujo autovetor teria como elementos os vetores  $\mathbf{G}$  de ordem ímpar.<sup>19</sup> Neste trabalho, porém, optou-se por utilizar a abordagem com base na matriz  $A$  da Equação (3.15) e o autovetor  $\mathbf{G}_p(\xi_j)$  que contém os vetores  $\mathbf{G}$  de ordem par. Considerando-se que o auto-sistema dado pela Equação (3.14) tenha sido resolvido, e por conseguinte, os autovalores  $\xi_j^2$  e os vetores  $\mathbf{G}$  de ordem par tenham sido obtidos, os vetores  $\mathbf{G}$  de ordem ímpar podem ser determinados através da relação de recorrência dada pela Equação (3.9).

### 3.3 Aplicação da Solução $P_N$ à Região do Combustível

Durante a implementação da solução  $P_N$  observou-se o aparecimento de autovalores complexo-conjugados conforme o aumento da ordem de aproximação e do número de grupos de energia, mesmo para meios não multiplicativos. Além disso, quando existe a presença de fissão e o meio for multiplicativo, os valores de  $\xi$  que satisfazem a condição de truncamento  $G_{N+1}(\xi) = 0$  não serão todos reais ou complexo-conjugados, havendo pelo menos um par de imaginários puros. Fisicamente, este fato está relacionado à existência de modos estacionários em meios multiplicativos, os quais não podem ser representados matematicamente por exponenciais com argumentos reais. O tratamento computacional é, neste caso, diferenciado, separando-se algebricamente<sup>40</sup> as partes reais e imaginárias dos coeficientes  $\{A_{1,j}\}$  e  $\{B_{1,j}\}$ , de modo a evitar o uso de operações com números complexos no computador. Conforme será visto adiante, a razão principal da introdução deste procedimento é que, se ele não fosse adotado, haveria necessidade de se calcular o determinante da matriz dos coeficientes na Equação (3.37) em modo complexo, o que implicaria um tempo computacional muito superior.

A solução da versão homogênea da equação de transporte escrita na forma matricial para a região combustível que se estende, em termos da variável óptica  $\tau$ , de  $\tau_0 = 0$  a  $\tau_1 = z_1 s_{min}^1$ , onde  $z_1$  é a semi-espessura do combustível em cm e  $s_{min}^1$  representa o valor mínimo do conjunto de seções de choque totais do combustível, pode ser expressa, conforme a Equação (3.8), por

$$\Psi_1(\tau, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (2n+1) P_n(\mu) \sum_{j=1}^J \left[ A_{1,j} e^{-\tau/\xi_{1,j}} + (-1)^n B_{1,j} e^{-(\tau_1-\tau)/\xi_{1,j}} \right] G_{1,n}(\xi_{1,j}), \quad (3.16)$$

sendo  $J = NGR(N+1)/2$  e, para que a condição de reflexão em  $\tau = 0$ , dada na forma matricial pela Equação (3.3), seja satisfeita, determina-se uma relação entre os coeficientes  $\{A_{1,j}\}$  e  $\{B_{1,j}\}$ . Assim, a solução geral para a região combustível pode ser reescrita como

$$\Psi_1(\tau, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (2n+1) P_n(\mu) \sum_{j=1}^J A_{1,j} \left[ e^{-i(\tau_1+\tau)/\xi_{1,j}} + (-1)^n e^{-i(\tau_1-\tau)/\xi_{1,j}} \right] \mathbf{G}_{1,n}(\xi_{1,j}). \quad (3.17)$$

Considerando-se que  $J_I$  autovalores sejam imaginários puros,  $J_R$  sejam reais, com  $J_S = J_I + J_R$ , e  $2J_C$  sejam complexo-conjugados, de modo que  $J = J_S + 2J_C$ , pode-se escrever, após se efetuar um reescalonamento nos coeficientes correspondentes aos autovalores imaginários puros,

$$\Psi_1(\tau, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (2n+1) \Phi_{1,n}(\tau) P_n(\mu), \quad (3.18)$$

onde  $\Phi_{1,n}(\tau)$  representa o momento de Legendre de ordem  $n$  do vetor de fluxos angulares na posição  $\tau$  e é dado por

$$\begin{aligned} \Phi_{1,n}(\tau) = & \sum_{j=1}^{J_I} A_{1,j} \left[ e^{-i(\tau_1+\tau)/\xi_{1,j}} + (-1)^n e^{i(\tau_1-\tau)/\xi_{1,j}} \right] \mathbf{G}_{1,n}(\xi_{1,j}) \\ & + \sum_{j=J_I+1}^{J_S} A_{1,j} \left[ e^{-i(\tau_1+\tau)/\xi_{1,j}} + (-1)^n e^{-i(\tau_1-\tau)/\xi_{1,j}} \right] \mathbf{G}_{1,n}(\xi_{1,j}) \\ & + \sum_{\substack{j=J_S+1 \\ \Delta j=2}}^{J-1} \left\{ A_{1,j} \left[ e^{-i(\tau_1+\tau)/\xi_{1,j}} + (-1)^n e^{-i(\tau_1-\tau)/\xi_{1,j}} \right] \mathbf{G}_{1,n}(\xi_{1,j}) \right. \\ & \left. - A_{1,j+1} \left[ e^{-i(\tau_1+\tau)/\bar{\xi}_{1,j}} + (-1)^n e^{-i(\tau_1-\tau)/\bar{\xi}_{1,j}} \right] \mathbf{G}_{1,n}(\bar{\xi}_{1,j}) \right\}, \end{aligned} \quad (3.19)$$

onde  $\bar{\xi}_{1,j}$  representa o complexo-conjugado de  $\xi_{1,j}$  e  $\Delta j = 2$  indica que o incremento em  $j$  no terceiro somatório da Equação (3.19) deve ser tomado igual a 2. Examinando-se o primeiro somatório da Equação (3.19) e levando-se em consideração que a matriz do auto-sistema dado pela Equação (3.14) é real e os quadrados dos autovalores  $\{\xi_{1,j}\}$  também o são, para  $j = 1, 2, \dots, J_I$ , conclui-se que os vetores  $\mathbf{G}_{1,n}(\xi_{1,j})$ ,  $j = 1, 2, \dots, J_I$ , podem ser tomados como reais, para  $n$  par. Conseqüentemente, conforme a Equação (3.9),  $\mathbf{G}_{1,n}(\xi_{1,j})$ ,  $j = 1, 2, \dots, J_I$ , serão imaginários puros, para  $n$  ímpar. Efetuando-se o produto entre o termo das exponenciais e o termo  $\mathbf{G}_{1,n}(\xi_{1,j})$  no primeiro somatório da Equação (3.19), verifica-se que o resultado é real e, portanto, as constantes  $\{A_{1,j}\}$  devem ser reais

para que a solução geral se situe no campo real. Prosseguindo com o objetivo de evitar o uso de operações com números complexos no computador, o seguinte procedimento é efetuado no terceiro somatório da Equação (3.19): permite-se que as constantes  $\{A_{1,j}\}$  e o termo  $\mathbf{G}_{1,n}(\xi_{1,j})$  possuam partes reais e imaginárias,  $A_{1,j} = A_{1,j}^R + iA_{1,j}^I$  e  $\mathbf{G}_{1,n}(\xi_{1,j}) = \mathbf{G}_{1,n}^R(\xi_{1,j}) + i\mathbf{G}_{1,n}^I(\xi_{1,j})$ ; utiliza-se a propriedade  $\mathbf{G}_{1,n}(\bar{\xi}_{1,j}) = \overline{\mathbf{G}_{1,n}(\xi_{1,j})}$ ; efetua-se o produto entre as constantes, o termo das exponenciais e o termo  $\mathbf{G}_{1,n}(\xi_{1,j})$ , separa-se as partes reais e imaginárias; impõe-se, novamente, que a solução geral se situe no campo real e redefine-se as constantes  $\{A_{1,j}\}$ . Considerando-se que os autovalores imaginários puros e complexos podem ser expressos na forma  $\xi_{1,j} = \lambda_{1,j} + i\eta_{1,j}$ , com  $\lambda_{1,j} \geq 0$  e  $\eta_{1,j} > 0$ , o momento de Legendre de ordem  $n$  do vetor de fluxos angulares para a região combustível pode ser reescrito como

$$\begin{aligned}
\Phi_{1,n}(\tau) &= \sum_{j=1}^{J_I} A_{1,j} \mathbf{Z}_{1,n}^-(\tau, \xi_{1,j}) \\
&+ \sum_{j=J_I+1}^{J_S} A_{1,j} \left[ e^{-(\tau_1+\tau)/\xi_{1,j}} + (-1)^n e^{-(\tau_1-\tau)/\xi_{1,j}} \right] \mathbf{G}_{1,n}(\xi_{1,j}) \\
&+ \sum_{\substack{j=J_S+1 \\ \Delta j=2}}^{J-1} \left\{ A_{1,j} \left[ e^{-\lambda_{1,j}(\tau_1+\tau)/(\xi_{1,j}\bar{\xi}_{1,j})} \mathbf{Z}_{1,n}^-(\tau, \xi_{1,j}) + (-1)^n e^{-\lambda_{1,j}(\tau_1-\tau)/(\xi_{1,j}\bar{\xi}_{1,j})} \mathbf{Z}_{1,n}^+(\tau, \xi_{1,j}) \right] \right. \\
&\left. + A_{1,j+1} \left[ e^{-\lambda_{1,j}(\tau_1+\tau)/(\xi_{1,j}\bar{\xi}_{1,j})} \mathbf{W}_{1,n}^+(\tau, \xi_{1,j}) - (-1)^n e^{-\lambda_{1,j}(\tau_1-\tau)/(\xi_{1,j}\bar{\xi}_{1,j})} \mathbf{W}_{1,n}^-(\tau, \xi_{1,j}) \right] \right\} \quad (3.20)
\end{aligned}$$

sendo

$$\mathbf{Z}_{1,n}^{\pm}(\tau, \xi) = \cos\left[\eta\tau / (\xi\bar{\xi})\right] \mathbf{G}_{1,n}^R(\xi) \pm \text{sen}\left[\eta\tau / (\xi\bar{\xi})\right] \mathbf{G}_{1,n}^I(\xi) \quad (3.21a)$$

e

$$\mathbf{W}_{1,n}^{\pm}(\tau, \xi) = \text{sen}\left[\eta\tau / (\xi\bar{\xi})\right] \mathbf{G}_{1,n}^R(\xi) \pm \cos\left[\eta\tau / (\xi\bar{\xi})\right] \mathbf{G}_{1,n}^I(\xi). \quad (3.21b)$$

Uma vez que as constantes  $\{A_{1,j}\}$  sejam determinadas como discutido na Seção 3.6, os fluxos escalares e as correntes de grupo podem ser obtidos através de

$$\Phi_{1,0}(\tau) = \int_{-1}^1 \Psi_1(\tau, \mu) d\mu \quad (3.22a)$$

e

$$\Phi_{1,1}(\tau) = \int_{-1}^1 \Psi_1(\tau, \mu) \mu d\mu, \quad (3.22b)$$

respectivamente. Assim, de acordo com a Equação (3.20) para  $n = 0$  e  $n = 1$ :

$$\begin{aligned} \Phi_{1,0}(\tau) &= \sum_{j=1}^{J_I} A_{1,j} \mathbf{Z}_{1,0}^-(\tau, \xi_{1,j}) \\ &+ \sum_{j=J_I+1}^{J_S} A_{1,j} \left[ e^{-(\tau_1+\tau)/\xi_{1,j}} + e^{-(\tau_1-\tau)/\xi_{1,j}} \right] \mathbf{G}_{1,0}(\xi_{1,j}) \\ &+ \sum_{\substack{j=J_S+1 \\ \Delta j=2}}^{J-1} \left\{ A_{1,j} \left[ e^{-\lambda_{1,j}(\tau_1+\tau)/(\xi_{1,j}\bar{\xi}_{1,j})} \mathbf{Z}_{1,0}^-(\tau, \xi_{1,j}) + e^{-\lambda_{1,j}(\tau_1-\tau)/(\xi_{1,j}\bar{\xi}_{1,j})} \mathbf{Z}_{1,0}^+(\tau, \xi_{1,j}) \right] \right. \\ &\left. + A_{1,j+1} \left[ e^{-\lambda_{1,j}(\tau_1+\tau)/(\xi_{1,j}\bar{\xi}_{1,j})} \mathbf{W}_{1,0}^+(\tau, \xi_{1,j}) - e^{-\lambda_{1,j}(\tau_1-\tau)/(\xi_{1,j}\bar{\xi}_{1,j})} \mathbf{W}_{1,0}^-(\tau, \xi_{1,j}) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.23a)$$

e

$$\begin{aligned} \Phi_{1,1}(\tau) &= \sum_{j=1}^{J_I} A_{1,j} \mathbf{Z}_{1,1}^-(\tau, \xi_{1,j}) \\ &+ \sum_{j=J_I+1}^{J_S} A_{1,j} \left[ e^{-(\tau_1+\tau)/\xi_{1,j}} - e^{-(\tau_1-\tau)/\xi_{1,j}} \right] \mathbf{G}_{1,1}(\xi_{1,j}) \\ &+ \sum_{\substack{j=J_S+1 \\ \Delta j=2}}^{J-1} \left\{ A_{1,j} \left[ e^{-\lambda_{1,j}(\tau_1+\tau)/(\xi_{1,j}\bar{\xi}_{1,j})} \mathbf{Z}_{1,1}^-(\tau, \xi_{1,j}) - e^{-\lambda_{1,j}(\tau_1-\tau)/(\xi_{1,j}\bar{\xi}_{1,j})} \mathbf{Z}_{1,1}^+(\tau, \xi_{1,j}) \right] \right. \\ &\left. + A_{1,j+1} \left[ e^{-\lambda_{1,j}(\tau_1+\tau)/(\xi_{1,j}\bar{\xi}_{1,j})} \mathbf{W}_{1,1}^+(\tau, \xi_{1,j}) + e^{-\lambda_{1,j}(\tau_1-\tau)/(\xi_{1,j}\bar{\xi}_{1,j})} \mathbf{W}_{1,1}^-(\tau, \xi_{1,j}) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.23b)$$

### 3.4 Aplicação da Solução $P_N$ às Regiões Intermediárias

Considera-se, agora, a situação em que se deseja aplicar a solução  $P_N$  a uma das regiões intermediárias. A solução da versão homogênea da equação de transporte escrita na forma matricial para uma região intermediária que se estende, em termos da

variável óptica  $\tau$ , de  $\tau_{r-1} = \sum_{i=1}^{r-1} (z_i - z_{i-1}) s_{min}^i$  a  $\tau_r = \sum_{i=1}^r (z_i - z_{i-1}) s_{min}^i$ , onde  $(z_i - z_{i-1})$  é a

espessura da região  $i$  em cm e  $s_{min}^i$  representa o valor mínimo do conjunto de seções de choque totais da região  $i$ , pode ser expressa, conforme a Equação (3.8), por

$$\Psi_r(\tau, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (2n+1) P_n(\mu) \sum_{j=1}^J \left[ A_{r,j} e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\xi_{r,j}} + (-1)^n B_{r,j} e^{-(\tau_r-\tau)/\xi_{r,j}} \right] \mathbf{G}_{r,n}(\xi_{r,j}). \quad (3.24)$$

Considerando-se que  $J_R$  autovalores sejam reais e  $2J_C$  sejam complexo-conjugados, de modo que  $J = J_R + 2J_C$ , pode-se escrever

$$\Psi_r(\tau, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (2n+1) \Phi_{r,n}(\tau) P_n(\mu), \quad (3.25)$$

onde  $\Phi_{r,n}(\tau)$  representa o momento de Legendre de ordem  $n$  do vetor de fluxos angulares na posição  $\tau$  e é dado por

$$\begin{aligned} \Phi_{r,n}(\tau) = & \sum_{j=1}^{J_R} \left[ A_{r,j} e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\xi_{r,j}} + (-1)^n B_{r,j} e^{-(\tau_r-\tau)/\xi_{r,j}} \right] \mathbf{G}_{r,n}(\xi_{r,j}) \\ & + \sum_{\substack{j=J_R+1 \\ \Delta j=2}}^{J-1} \left\{ \left[ A_{r,j} e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\xi_{r,j}} + (-1)^n B_{r,j} e^{-(\tau_r-\tau)/\xi_{r,j}} \right] \mathbf{G}_{r,n}(\xi_{r,j}) \right. \\ & \left. + \left[ A_{r,j+1} e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\bar{\xi}_{r,j}} + (-1)^n B_{r,j+1} e^{-(\tau_r-\tau)/\bar{\xi}_{r,j}} \right] \mathbf{G}_{r,n}(\bar{\xi}_{r,j}) \right\}. \end{aligned} \quad (3.26)$$

Aplicando-se no segundo somatório da Equação (3.26), que envolve os autovalores complexo-conjugados para a região  $r$ , um procedimento similar ao efetuado para os autovalores complexo-conjugados no combustível, novamente com o objetivo de evitar o uso de operações com números complexos no computador, e considerando-se que os autovalores complexos nesta região podem ser expressos na forma  $\xi_{r,j} = \lambda_{r,j} + i\eta_{r,j}$ , com  $\lambda_{r,j}$  e  $\eta_{r,j} > 0$ , o momento de Legendre de ordem  $n$  do vetor de fluxos angulares na região  $r$  pode ser reescrito como

$$\Phi_{r,n}(\tau) = \sum_{j=1}^{J_R} \left[ A_{r,j} e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\xi_{r,j}} + (-1)^n B_{r,j} e^{-(\tau_r-\tau)/\xi_{r,j}} \right] \mathbf{G}_{r,n}(\xi_{r,j})$$

$$\begin{aligned}
& + \sum_{\substack{j=J_R+1 \\ \Delta j=2}}^{J-1} \left\{ e^{-\lambda_{r,j}(\tau-\tau_{r-1})/(\xi_{r,j}\bar{\xi}_{r,j})} \left[ A_{r,j} \mathbf{Z}_{r,n}^-(\tau-\tau_{r-1}, \xi_{r,j}) + A_{r,j+1} \mathbf{W}_{r,n}^+(\tau-\tau_{r-1}, \xi_{r,j}) \right] \right. \\
& \left. + (-1)^n e^{-\lambda_{r,j}(\tau_r-\tau)/(\xi_{r,j}\bar{\xi}_{r,j})} \left[ B_{r,j} \mathbf{Z}_{r,n}^-(\tau_r-\tau, \xi_{r,j}) + B_{r,j+1} \mathbf{W}_{r,n}^+(\tau_r-\tau, \xi_{r,j}) \right] \right\}, \quad (3.27)
\end{aligned}$$

onde as funções  $\mathbf{Z}_{r,n}^-(\tau, \xi)$  e  $\mathbf{W}_{r,n}^+(\tau, \xi)$  são definidas de uma maneira similar às Equações (3.21).

Uma vez que as constantes  $\{A_{r,j}\}$  e  $\{B_{r,j}\}$  sejam determinadas como discutido na Seção 3.6, os fluxos escalares e as correntes de grupo podem ser obtidos utilizando-se equações similares às Equações (3.22). Assim, de acordo com a Equação (3.27) para  $n = 0$  e  $n = 1$ :

$$\begin{aligned}
\Phi_{r,0}(\tau) &= \sum_{j=1}^{J_R} \left[ A_{r,j} e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\xi_{r,j}} + B_{r,j} e^{-(\tau_r-\tau)/\xi_{r,j}} \right] \mathbf{G}_{r,0}(\xi_{r,j}) \\
& + \sum_{\substack{j=J_R+1 \\ \Delta j=2}}^{J-1} \left\{ e^{-\lambda_{r,j}(\tau-\tau_{r-1})/(\xi_{r,j}\bar{\xi}_{r,j})} \left[ A_{r,j} \mathbf{Z}_{r,0}^-(\tau-\tau_{r-1}, \xi_{r,j}) + A_{r,j+1} \mathbf{W}_{r,0}^+(\tau-\tau_{r-1}, \xi_{r,j}) \right] \right. \\
& \left. + e^{-\lambda_{r,j}(\tau_r-\tau)/(\xi_{r,j}\bar{\xi}_{r,j})} \left[ B_{r,j} \mathbf{Z}_{r,0}^-(\tau_r-\tau, \xi_{r,j}) + B_{r,j+1} \mathbf{W}_{r,0}^+(\tau_r-\tau, \xi_{r,j}) \right] \right\} \quad (3.28a)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\Phi_{r,1}(\tau) &= \sum_{j=1}^{J_R} \left[ A_{r,j} e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\xi_{r,j}} - B_{r,j} e^{-(\tau_r-\tau)/\xi_{r,j}} \right] \mathbf{G}_{r,1}(\xi_{r,j}) \\
& + \sum_{\substack{j=J_R+1 \\ \Delta j=2}}^{J-1} \left\{ e^{-\lambda_{r,j}(\tau-\tau_{r-1})/(\xi_{r,j}\bar{\xi}_{r,j})} \left[ A_{r,j} \mathbf{Z}_{r,1}^-(\tau-\tau_{r-1}, \xi_{r,j}) + A_{r,j+1} \mathbf{W}_{r,1}^+(\tau-\tau_{r-1}, \xi_{r,j}) \right] \right. \\
& \left. - e^{-\lambda_{r,j}(\tau_r-\tau)/(\xi_{r,j}\bar{\xi}_{r,j})} \left[ B_{r,j} \mathbf{Z}_{r,1}^-(\tau_r-\tau, \xi_{r,j}) + B_{r,j+1} \mathbf{W}_{r,1}^+(\tau_r-\tau, \xi_{r,j}) \right] \right\}. \quad (3.28b)
\end{aligned}$$

### 3.5 Aplicação da Solução $P_N$ à Região Externa

Considera-se, agora, a situação em que se deseja aplicar a solução  $P_N$  à região externa. A solução da versão homogênea da equação de transporte escrita na forma matricial para a região externa que se estende, em termos da variável óptica  $\tau$ , de

$\tau_{R-1} = \sum_{i=1}^{R-1} (z_i - z_{i-1}) s_{min}^i$  a  $\tau_R = \sum_{i=1}^R (z_i - z_{i-1}) s_{min}^i$  pode ser expressa, conforme a Equação (3.8), por

$$\begin{aligned} \Psi_R(\tau, \mu) &= \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (2n+1) P_n(\mu) \\ &\times \sum_{j=1}^J \left[ A_{R,j} e^{-(\tau-\tau_{R-1})/\xi_{R,j}} + (-1)^n B_{R,j} e^{-(\tau_R-\tau)/\xi_{R,j}} \right] \mathbf{G}_{R,n}(\xi_{R,j}), \end{aligned} \quad (3.29)$$

e, para que a condição de reflexão em  $\tau_R$ , dada na forma matricial pela Equação (3.5), seja satisfeita, determina-se uma relação entre os coeficientes  $\{A_{R,j}\}$  e  $\{B_{R,j}\}$ . Assim, a solução geral para a região  $R$  pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \Psi_R(\tau, \mu) &= \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (2n+1) P_n(\mu) \\ &\times \sum_{j=1}^J A_{R,j} \left[ e^{-(\tau-\tau_{R-1})/\xi_{R,j}} + (-1)^n e^{-(2\tau_R-\tau_{R-1}-\tau)/\xi_{R,j}} \right] \mathbf{G}_{R,n}(\xi_{R,j}). \end{aligned} \quad (3.30)$$

Considerando-se que  $J_R$  autovalores sejam reais e  $2J_C$  sejam complexo-conjugados, de modo que  $J = J_R + 2J_C$ , pode-se escrever

$$\Psi_R(\tau, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{n=0}^N (2n+1) \Phi_{R,n}(\tau) P_n(\mu) \quad (3.31)$$

onde  $\Phi_{R,n}(\tau)$  representa o momento de Legendre de ordem  $n$  do vetor de fluxos angulares na posição  $\tau$  e é expresso por

$$\begin{aligned} \Phi_{R,n}(\tau) &= \sum_{j=1}^{J_R} A_{R,j} \left[ e^{-(\tau-\tau_{R-1})/\xi_{R,j}} + (-1)^n e^{-(2\tau_R-\tau_{R-1}-\tau)/\xi_{R,j}} \right] \mathbf{G}_{R,n}(\xi_{R,j}) \\ &+ \sum_{\substack{j=J_R+1 \\ \Delta j=2}}^{J-1} \left\{ A_{R,j} \left[ e^{-(\tau-\tau_{R-1})/\xi_{R,j}} + (-1)^n e^{-(2\tau_R-\tau_{R-1}-\tau)/\xi_{R,j}} \right] \mathbf{G}_{R,n}(\xi_{R,j}) \right. \\ &\left. + A_{R,j+1} \left[ e^{-(\tau-\tau_{R-1})/\bar{\xi}_{R,j}} + (-1)^n e^{-(2\tau_R-\tau_{R-1}-\tau)/\bar{\xi}_{R,j}} \right] \mathbf{G}_{R,n}(\bar{\xi}_{R,j}) \right\}. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Aplicando-se no segundo somatório da Equação (3.32), que envolve os autovalores complexo-conjugados para a região externa, um procedimento similar ao efetuado para os autovalores complexo-conjugados no combustível, com o objetivo de evitar o uso de operações com números complexos no computador, e considerando-se que os autovalores complexos na região externa podem ser expressos na forma  $\xi_{R,j} = \lambda_{R,j} + i\eta_{R,j}$ , com  $\lambda_{R,j}$  e  $\eta_{R,j} > 0$ , o momento de Legendre de ordem  $n$  do vetor de fluxos angulares na região  $R$  pode ser escrito como

$$\begin{aligned} \Phi_{R,n}(\tau) = & \sum_{j=1}^{J_R} A_{R,j} \left[ e^{-(\tau-\tau_{R-1})/\xi_{R,j}} + (-1)^n e^{-(2\tau_R-\tau_{R-1}-\tau)/\xi_{R,j}} \right] \mathbf{G}_{R,n}(\xi_{R,j}) \\ & + \sum_{\substack{j=J_R+1 \\ \Delta j=2}}^{J-1} \left\{ e^{-\lambda_{R,j}(\tau-\tau_{R-1})/(\xi_{R,j}\bar{\xi}_{R,j})} \left[ A_{R,j} \mathbf{Z}_{R,n}^-(\tau-\tau_{R-1}, \xi_{R,j}) + A_{R,j+1} \mathbf{W}_{R,n}^+(\tau-\tau_{R-1}, \xi_{R,j}) \right] \right. \\ & \left. + (-1)^n e^{-\lambda_{R,j}(2\tau_R-\tau_{R-1}-\tau)/(\xi_{R,j}\bar{\xi}_{R,j})} \left[ A_{R,j} \mathbf{Z}_{R,n}^-(2\tau_R-\tau_{R-1}-\tau, \xi_{R,j}) \right. \right. \\ & \left. \left. + A_{R,j+1} \mathbf{W}_{R,n}^+(2\tau_R-\tau_{R-1}-\tau, \xi_{R,j}) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (3.33)$$

onde as funções  $\mathbf{Z}_{R,n}^-(\tau, \xi)$  e  $\mathbf{W}_{R,n}^+(\tau, \xi)$  são definidas de uma maneira similar às Equações (3.21).

Uma vez que as constantes  $\{A_{R,j}\}$  sejam determinadas como discutido na Seção 3.6, os fluxos escalares e as correntes de grupo podem ser obtidos utilizando-se equações similares às Equações (3.22). Desta forma, de acordo com a Equação (3.33) para  $n = 0$  e  $n = 1$ :

$$\begin{aligned} \Phi_{R,0}(\tau) = & \sum_{j=1}^{J_R} A_{R,j} \left[ e^{-(\tau-\tau_{R-1})/\xi_{R,j}} + e^{-(2\tau_R-\tau_{R-1}-\tau)/\xi_{R,j}} \right] \mathbf{G}_{R,0}(\xi_{R,j}) \\ & + \sum_{\substack{j=J_R+1 \\ \Delta j=2}}^{J-1} \left\{ e^{-\lambda_{R,j}(\tau-\tau_{R-1})/(\xi_{R,j}\bar{\xi}_{R,j})} \left[ A_{R,j} \mathbf{Z}_{R,0}^-(\tau-\tau_{R-1}, \xi_{R,j}) + A_{R,j+1} \mathbf{W}_{R,0}^+(\tau-\tau_{R-1}, \xi_{R,j}) \right] \right. \\ & \left. + e^{-\lambda_{R,j}(2\tau_R-\tau_{R-1}-\tau)/(\xi_{R,j}\bar{\xi}_{R,j})} \left[ A_{R,j} \mathbf{Z}_{R,0}^-(2\tau_R-\tau_{R-1}-\tau, \xi_{R,j}) \right. \right. \\ & \left. \left. + A_{R,j+1} \mathbf{W}_{R,0}^+(2\tau_R-\tau_{R-1}-\tau, \xi_{R,j}) \right] \right\} \end{aligned} \quad (3.34a)$$

e

$$\begin{aligned}
\Phi_{R,1}(\tau) &= \sum_{j=1}^{J_R} A_{R,j} \left[ e^{-(\tau-\tau_{R-1})/\xi_{R,j}} - e^{-(2\tau_R-\tau_{R-1}-\tau)/\xi_{R,j}} \right] \mathbf{G}_{R,1}(\xi_{R,j}) \\
&+ \sum_{\substack{j=J_R+1 \\ \Delta j=2}}^{J-1} \left\{ e^{-\lambda_{R,j}(\tau-\tau_{R-1})/(\xi_{R,j}\bar{\xi}_{R,j})} \left[ A_{R,j} \mathbf{Z}_{R,1}^-(\tau-\tau_{R-1}, \xi_{R,j}) + A_{R,j+1} \mathbf{W}_{R,1}^+(\tau-\tau_{R-1}, \xi_{R,j}) \right] \right. \\
&\quad - e^{-\lambda_{R,j}(2\tau_R-\tau_{R-1}-\tau)/(\xi_{R,j}\bar{\xi}_{R,j})} \left[ A_{R,j} \mathbf{Z}_{R,1}^-(2\tau_R-\tau_{R-1}-\tau, \xi_{R,j}) \right. \\
&\quad \left. \left. + A_{R,j+1} \mathbf{W}_{R,1}^+(2\tau_R-\tau_{R-1}-\tau, \xi_{R,j}) \right] \right\}. \tag{3.34b}
\end{aligned}$$

### 3.6 Aplicação das Condições de Continuidade

Através da aplicação das condições de continuidade nas interfaces entre as regiões, é obtido um sistema de equações lineares algébricas cuja solução determina o fator de multiplicação efetivo da célula e os coeficientes das soluções  $P_N$  nas regiões. Assim, aplicando-se a condição de continuidade nas fronteiras  $\tau_r, r=1,2,\dots,R-1$ , na aproximação de Mark, a Equação (3.4) pode ser reescrita como

$$\Psi_r(\tau_r, \pm\mu_i) = \Psi_{r+1}(\tau_r, \pm\mu_i), \tag{3.35}$$

onde  $\{\mu_i\}$  representam os  $(N+1)/2$  zeros positivos de  $P_{N+1}(\mu)$ . Ao invés de se utilizar diretamente as Equações (3.35) para a formação do sistema linear, optou-se por utilizar as seguintes combinações lineares dessas equações:

$$\Psi_r(\tau_r, \mu_i) + \Psi_r(\tau_r, -\mu_i) = \Psi_{r+1}(\tau_r, \mu_i) + \Psi_{r+1}(\tau_r, -\mu_i), \tag{3.36a}$$

e

$$\Psi_r(\tau_r, -\mu_i) - \Psi_r(\tau_r, \mu_i) = \Psi_{r+1}(\tau_r, -\mu_i) - \Psi_{r+1}(\tau_r, \mu_i). \tag{3.36b}$$

Aplicando-se as Equações (3.36), em conjunto com as Equações (3.18), (3.20), (3.25), (3.27), (3.31) e (3.33), para  $r=1,2,\dots,R-1$ , utilizando-se a propriedade  $P_n(-\mu_i) = (-1)^n P_n(\mu_i)$  e invertendo-se os somatórios em  $n$  e  $j$  obtém-se o sistema linear

$$\begin{bmatrix} C & -U_2 & -V_2 & 0 & 0 & 0 & \dots & \dots & 0 \\ D & R_2 & -S_2 & 0 & 0 & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & V_2 & U_2 & -U_3 & -V_3 & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ 0 & S_2 & -R_2 & -R_3 & S_3 & 0 & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & V_{R-2} & U_{R-2} & -U_{R-1} & -V_{R-1} & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & S_{R-2} & -R_{R-2} & -R_{R-1} & S_{R-1} & 0 \\ \vdots & \ddots & \ddots & 0 & 0 & 0 & V_{R-1} & U_{R-1} & -E \\ 0 & \dots & \dots & 0 & 0 & 0 & S_{R-1} & -R_{R-1} & -F \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A_1 \\ A_2 \\ B_2 \\ A_3 \\ B_3 \\ \vdots \\ A_{R-1} \\ B_{R-1} \\ A_R \end{bmatrix} = 0, \quad (3.37)$$

onde as matrizes  $C$ ,  $D$ ,  $U_r$ ,  $V_r$ ,  $R_r$ ,  $S_r$ ,  $r = 2, 3, \dots, R-1$ ,  $E$  e  $F$ , de dimensão  $J \times J$ , são definidas por

$$C = \begin{bmatrix} C_{1,1} & C_{1,2} & \dots & C_{1,J} \\ C_{2,1} & C_{2,2} & \dots & C_{2,J} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ C_{K,1} & C_{K,2} & \dots & C_{K,J} \end{bmatrix}, \quad (3.38)$$

$$D = \begin{bmatrix} D_{1,1} & D_{1,2} & \dots & D_{1,J} \\ D_{2,1} & D_{2,2} & \dots & D_{2,J} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ D_{K,1} & D_{K,2} & \dots & D_{K,J} \end{bmatrix}, \quad (3.39)$$

$$U_r = \begin{bmatrix} U_{1,1}^r & U_{1,2}^r & \dots & U_{1,J}^r \\ U_{2,1}^r & U_{2,2}^r & \dots & U_{2,J}^r \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ U_{K,1}^r & U_{K,2}^r & \dots & U_{K,J}^r \end{bmatrix}, \quad (3.40)$$

$$V_r = \begin{bmatrix} V_{1,1}^r & V_{1,2}^r & \dots & V_{1,J}^r \\ V_{2,1}^r & V_{2,2}^r & \dots & V_{2,J}^r \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ V_{K,1}^r & V_{K,2}^r & \dots & V_{K,J}^r \end{bmatrix}, \quad (3.41)$$

$$R_r = \begin{bmatrix} R_{1,1}^r & R_{1,2}^r & \dots & R_{1,J}^r \\ R_{2,1}^r & R_{2,2}^r & \dots & R_{2,J}^r \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ R_{K,1}^r & R_{K,2}^r & \dots & R_{K,J}^r \end{bmatrix}, \quad (3.42)$$

$$\mathbf{S}_r = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_{1,1}^r & \mathbf{S}_{1,2}^r & \cdots & \mathbf{S}_{1,J}^r \\ \mathbf{S}_{2,1}^r & \mathbf{S}_{2,2}^r & \cdots & \mathbf{S}_{2,J}^r \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{S}_{K,1}^r & \mathbf{S}_{K,2}^r & \cdots & \mathbf{S}_{K,J}^r \end{bmatrix}, \quad (3.43)$$

$$\mathbf{E} = \begin{bmatrix} \mathbf{E}_{1,1} & \mathbf{E}_{1,2} & \cdots & \mathbf{E}_{1,J} \\ \mathbf{E}_{2,1} & \mathbf{E}_{2,2} & \cdots & \mathbf{E}_{2,J} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{E}_{K,1} & \mathbf{E}_{K,2} & \cdots & \mathbf{E}_{K,J} \end{bmatrix}, \quad (3.44)$$

$$\mathbf{F} = \begin{bmatrix} \mathbf{F}_{1,1} & \mathbf{F}_{1,2} & \cdots & \mathbf{F}_{1,J} \\ \mathbf{F}_{2,1} & \mathbf{F}_{2,2} & \cdots & \mathbf{F}_{2,J} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{F}_{K,1} & \mathbf{F}_{K,2} & \cdots & \mathbf{F}_{K,J} \end{bmatrix}, \quad (3.45)$$

sendo  $K = (N + 1)/2$ , e os componentes destas matrizes são vetores de dimensão  $NGR$  expressos, respectivamente, através de

$$\mathbf{C}_{i,j} = \begin{cases} \cos(\tau_1 / \eta_{1,j}) \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-1} (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{1,n}^R(\xi_{1,j}), & j = 1, 2, \dots, J_I. \\ (1 + e^{-2\tau_1/\xi_{1,j}}) \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-1} (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{1,n}(\xi_{1,j}), & j = J_I + 1, J_I + 2, \dots, J_I + J_R. \\ \cos[\eta_{1,j} \tau_1 / (\xi_{1,j} \bar{\xi}_{1,j})] \left[ 1 + e^{-2\lambda_{1,j} \tau_1 / (\xi_{1,j} \bar{\xi}_{1,j})} \right] \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-1} (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{1,n}^R(\xi_{1,j}) \\ + \text{sen}[\eta_{1,j} \tau_1 / (\xi_{1,j} \bar{\xi}_{1,j})] \left[ 1 - e^{-2\lambda_{1,j} \tau_1 / (\xi_{1,j} \bar{\xi}_{1,j})} \right] \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-1} (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{1,n}^I(\xi_{1,j}), & j = J_I + J_R + 1, J_I + J_R + 3, \dots, J_I + J_R + 2J_C - 1. \\ \cos[\eta_{1,j} \tau_1 / (\xi_{1,j} \bar{\xi}_{1,j})] \left[ 1 + e^{-2\lambda_{1,j} \tau_1 / (\xi_{1,j} \bar{\xi}_{1,j})} \right] \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-1} (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{1,n}^I(\xi_{1,j}) \\ - \text{sen}[\eta_{1,j} \tau_1 / (\xi_{1,j} \bar{\xi}_{1,j})] \left[ 1 - e^{-2\lambda_{1,j} \tau_1 / (\xi_{1,j} \bar{\xi}_{1,j})} \right] \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-1} (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{1,n}^R(\xi_{1,j}), & j = J_I + J_R + 2, J_I + J_R + 4, \dots, J_I + J_R + 2J_C. \end{cases} \quad (3.46)$$

$$\begin{aligned}
D_{i,j} = & \left\{ \begin{aligned}
& \text{sen}(\tau_1 / \eta_{1,j}) \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^N (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{1,n}^I(\xi_{1,j}), j = 1, 2, \dots, J_I. \\
& (1 - e^{-2\tau_1/\xi_{1,j}}) \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^N (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{1,n}(\xi_{1,j}), j = J_I + 1, J_I + 2, \dots, J_I + J_R. \\
& \cos[\eta_{1,j} \tau_1 / (\xi_{1,j} \bar{\xi}_{1,j})] \left[ 1 - e^{-2\lambda_{1,j} \tau_1 / (\xi_{1,j} \bar{\xi}_{1,j})} \right] \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^N (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{1,n}^R(\xi_{1,j}) \\
& + \text{sen}[\eta_{1,j} \tau_1 / (\xi_{1,j} \bar{\xi}_{1,j})] \left[ 1 + e^{-2\lambda_{1,j} \tau_1 / (\xi_{1,j} \bar{\xi}_{1,j})} \right] \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^N (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{1,n}^I(\xi_{1,j}), \\
& \quad j = J_I + J_R + 1, J_I + J_R + 3, \dots, J_I + J_R + 2J_C - 1. \\
& \cos[\eta_{1,j} \tau_1 / (\xi_{1,j} \bar{\xi}_{1,j})] \left[ 1 - e^{-2\lambda_{1,j} \tau_1 / (\xi_{1,j} \bar{\xi}_{1,j})} \right] \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^N (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{1,n}^I(\xi_{1,j}) \\
& - \text{sen}[\eta_{1,j} \tau_1 / (\xi_{1,j} \bar{\xi}_{1,j})] \left[ 1 + e^{-2\lambda_{1,j} \tau_1 / (\xi_{1,j} \bar{\xi}_{1,j})} \right] \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^N (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{1,n}^R(\xi_{1,j}), \\
& \quad j = J_I + J_R + 2, J_I + J_R + 4, \dots, J_I + J_R + 2J_C.
\end{aligned} \right. \quad (3.47)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
U_{i,j}^r = & \left\{ \begin{aligned}
& \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-1} (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{r,n}(\xi_{r,j}), j = 1, 2, \dots, J_R. \\
& \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-1} (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{r,n}^R(\xi_{r,j}), j = J_R + 1, J_R + 3, \dots, J_R + 2J_C - 1. \\
& \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-1} (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{r,n}^I(\xi_{r,j}), j = J_R + 2, J_R + 4, \dots, J_R + 2J_C.
\end{aligned} \right. \quad (3.48)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
V_{i,j}^r = & \left\{ \begin{aligned} & e^{-\left(\tau_r - \tau_{r-1}\right) / \xi_{r,j}} \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-1} (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{r,n}(\xi_{r,j}), j = 1, 2, \dots, J_R. \\ & e^{-\lambda_{r,j}(\tau_r - \tau_{r-1}) / (\xi_{r,j} \bar{\xi}_{r,j})} \\ & \times \left[ \cos \left[ \eta_{r,j}(\tau_r - \tau_{r-1}) / (\xi_{r,j} \bar{\xi}_{r,j}) \right] \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-1} (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{r,n}^R(\xi_{r,j}) \right. \\ & \left. - \operatorname{sen} \left[ \eta_{r,j}(\tau_r - \tau_{r-1}) / (\xi_{r,j} \bar{\xi}_{r,j}) \right] \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-1} (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{r,n}^I(\xi_{r,j}) \right], \\ & j = J_R + 1, J_R + 3, \dots, J_R + 2J_C - 1. \end{aligned} \right. \quad (3.49) \\
& \left\{ \begin{aligned} & e^{-\lambda_{r,j}(\tau_r - \tau_{r-1}) / (\xi_{r,j} \bar{\xi}_{r,j})} \\ & \times \left[ \operatorname{sen} \left[ \eta_{r,j}(\tau_r - \tau_{r-1}) / (\xi_{r,j} \bar{\xi}_{r,j}) \right] \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-1} (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{r,n}^R(\xi_{r,j}) \right. \\ & \left. + \cos \left[ \eta_{r,j}(\tau_r - \tau_{r-1}) / (\xi_{r,j} \bar{\xi}_{r,j}) \right] \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-1} (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{r,n}^I(\xi_{r,j}) \right], \\ & j = J_R + 2, J_R + 4, \dots, J_R + 2J_C. \end{aligned} \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
R_{i,j}^r = & \left\{ \begin{aligned} & \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^N (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{r,n}(\xi_{r,j}), j = 1, 2, \dots, J_R. \\ & \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^N (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{r,n}^R(\xi_{r,j}), j = J_R + 1, J_R + 3, \dots, J_R + 2J_C - 1. \\ & \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^N (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{r,n}^I(\xi_{r,j}), j = J_R + 2, J_R + 4, \dots, J_R + 2J_C. \end{aligned} \right. \quad (3.50)
\end{aligned}$$

$$\mathbf{S}_{i,j}^r = \left\{ \begin{array}{l} e^{-\frac{(\tau_r - \tau_{r-1})}{\xi_{r,j}}} \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^N (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{r,n}(\xi_{r,j}), \quad j = 1, 2, \dots, J_R. \\ \\ e^{-\lambda_{r,j}(\tau_r - \tau_{r-1}) / (\xi_{r,j} \bar{\xi}_{r,j})} \\ \times \left[ \cos \left[ \eta_{r,j}(\tau_r - \tau_{r-1}) / (\xi_{r,j} \bar{\xi}_{r,j}) \right] \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^N (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{r,n}^R(\xi_{r,j}) \right. \\ \left. - \text{sen} \left[ \eta_{r,j}(\tau_r - \tau_{r-1}) / (\xi_{r,j} \bar{\xi}_{r,j}) \right] \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^N (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{r,n}^I(\xi_{r,j}) \right], \\ \\ j = J_R + 1, J_R + 3, \dots, J_R + 2J_C - 1. \\ \\ e^{-\lambda_{r,j}(\tau_r - \tau_{r-1}) / (\xi_{r,j} \bar{\xi}_{r,j})} \\ \times \left[ \text{sen} \left[ \eta_{r,j}(\tau_r - \tau_{r-1}) / (\xi_{r,j} \bar{\xi}_{r,j}) \right] \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^N (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{r,n}^R(\xi_{r,j}) \right. \\ \left. + \cos \left[ \eta_{r,j}(\tau_r - \tau_{r-1}) / (\xi_{r,j} \bar{\xi}_{r,j}) \right] \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^N (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{r,n}^I(\xi_{r,j}) \right], \\ \\ j = J_R + 2, J_R + 4, \dots, J_R + 2J_C. \end{array} \right. \quad (3.51)$$

$$\mathbf{E}_{i,j} = \left\{ \begin{array}{l} \left[ 1 + e^{-2(\tau_R - \tau_{R-1})/\xi_{R,j}} \right] \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-1} (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{R,n}(\xi_{R,j}), j = 1, 2, \dots, J_R. \\ \\ \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-1} (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{R,n}^R(\xi_{R,j}) + e^{-2\lambda_{r,j}(\tau_R - \tau_{R-1})/(\xi_{R,j} \bar{\xi}_{R,j})} \\ \times \left[ \cos \left[ 2\eta_{R,j}(\tau_R - \tau_{R-1}) / (\xi_{R,j} \bar{\xi}_{R,j}) \right] \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-1} (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{R,n}^R(\xi_{R,j}) \right. \\ \left. - \operatorname{sen} \left[ 2\eta_{R,j}(\tau_R - \tau_{R-1}) / (\xi_{R,j} \bar{\xi}_{R,j}) \right] \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-1} (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{R,n}^I(\xi_{R,j}) \right], \\ \\ j = J_R + 1, J_R + 3, \dots, J_R + 2J_C - 1. \\ \\ \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-1} (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{R,n}^I(\xi_{R,j}) + e^{-2\lambda_{r,j}(\tau_R - \tau_{R-1})/(\xi_{R,j} \bar{\xi}_{R,j})} \\ \times \left[ \operatorname{sen} \left[ 2\eta_{R,j}(\tau_R - \tau_{R-1}) / (\xi_{R,j} \bar{\xi}_{R,j}) \right] \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-1} (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{R,n}^R(\xi_{R,j}) \right. \\ \left. + \cos \left[ 2\eta_{R,j}(\tau_R - \tau_{R-1}) / (\xi_{R,j} \bar{\xi}_{R,j}) \right] \sum_{\substack{n=0 \\ n \text{ par}}}^{N-1} (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{R,n}^I(\xi_{R,j}) \right] \\ \\ j = J_R + 2, J_R + 4, \dots, J_R + 2J_C. \end{array} \right. \quad (3.52)$$

e

$$\begin{aligned}
\mathbf{F}_{i,j} = & \left[ \begin{aligned}
& \left[ 1 - e^{-2(\tau_R - \tau_{R-1})/\xi_{R,j}} \right] \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^N (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{R,n}(\xi_{R,j}), j = 1, 2, \dots, J_R. \\
& - \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^N (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{R,n}^R(\xi_{R,j}) + e^{-2\lambda_{r,j}(\tau_R - \tau_{R-1})/(\xi_{R,j} \bar{\xi}_{R,j})} \\
& \times \left[ \cos \left[ 2\eta_{R,j}(\tau_R - \tau_{R-1})/(\xi_{R,j} \bar{\xi}_{R,j}) \right] \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^N (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{R,n}^R(\xi_{R,j}) \right. \\
& \left. - \operatorname{sen} \left[ 2\eta_{R,j}(\tau_R - \tau_{R-1})/(\xi_{R,j} \bar{\xi}_{R,j}) \right] \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^N (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{R,n}^I(\xi_{R,j}) \right], \\
& j = J_R + 1, J_R + 3, \dots, J_R + 2J_C - 1.
\end{aligned} \right. \tag{3.53} \\
& \left[ \begin{aligned}
& - \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^N (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{R,n}^I(\xi_{R,j}) + e^{-2\lambda_{r,j}(\tau_R - \tau_{R-1})/(\xi_{R,j} \bar{\xi}_{R,j})} \\
& \times \left[ \operatorname{sen} \left[ 2\eta_{R,j}(\tau_R - \tau_{R-1})/(\xi_{R,j} \bar{\xi}_{R,j}) \right] \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^N (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{R,n}^R(\xi_{R,j}) \right. \\
& \left. + \cos \left[ 2\eta_{R,j}(\tau_R - \tau_{R-1})/(\xi_{R,j} \bar{\xi}_{R,j}) \right] \sum_{\substack{n=1 \\ n \text{ impar}}}^N (2n+1) P_n(\mu_i) \mathbf{G}_{R,n}^I(\xi_{R,j}) \right] \\
& j = J_R + 2, J_R + 4, \dots, J_R + 2J_C.
\end{aligned} \right]
\end{aligned}$$

Finalmente, na Equação (3.37), os vetores  $\mathbf{A}_r$ ,  $r = 1, 2, \dots, R$  e  $\mathbf{B}_r$ ,  $r = 2, 3, \dots, R-1$ , de dimensão  $J$ , são definidos por

$$\mathbf{A}_r = \begin{bmatrix} A_{r,1} \\ A_{r,2} \\ \vdots \\ A_{r,J} \end{bmatrix} \tag{3.54}$$

e

$$B_r = \begin{bmatrix} B_{r,1} \\ B_{r,2} \\ \vdots \\ B_{r,J} \end{bmatrix}. \quad (3.55)$$

Nesta seção, as condições de continuidade nas interfaces das regiões foram aplicadas considerando-se a aproximação de Mark. Para se obter as equações correspondentes na aproximação de Marshak, basta substituir  $P_n(\mu_i)$  por  $S_{i-1,n}$ , dado pela Equação (2.22), nas Equações (3.46) a (3.53).

### 3.7 Implementação Computacional

Nesta seção é apresentada a estratégia utilizada na parte computacional para determinar o fator de multiplicação efetivo bem como os fluxos escalares e as correntes de grupo nas distintas regiões que compõem a célula.

Inicialmente, é necessário obter uma estimativa para o fator de multiplicação efetivo da célula. Foram consideradas duas maneiras de se obter essa estimativa. Na primeira, tomou-se o autovalor dominante da solução do seguinte auto-sistema, originado quando se considera a equação de transporte para um meio infinito correspondente à célula homogeneizada:

$$(\mathbf{S} - \mathbf{T}_s)^{-1} \mathbf{T}_f \Psi = k \Psi, \quad (3.56)$$

onde a matriz diagonal  $\mathbf{S}$  contém as seções de choque macroscópicas totais de grupo, a matriz  $\mathbf{T}_s$  possui como elementos  $\sigma_{s,ji}(0)$  e a matriz  $\mathbf{T}_f$  possui como elementos  $(\nu\sigma_f)_i \chi_{ji}$ . Na segunda, buscou-se a mudança no sinal do determinante da matriz dos coeficientes, incrementando o valor de  $k$  de 0,001, desde  $k = 1$  até o valor de  $k$  em que o combustível deixa de ser um meio multiplicador, considerando-se uma ordem baixa de aproximação. Nos problemas estudados neste capítulo, foi adotado o segundo procedimento para se obter uma estimativa de  $k_{ef}$  na menor ordem de aproximação utilizada ( $P_3$ ). Nas aproximações de ordem superior, utilizou-se, como primeira

estimativa, o valor de  $k_{ef}$  obtido no cálculo realizado utilizando-se a aproximação de ordem imediatamente inferior.

Com a estimativa para o fator de multiplicação da célula ( $k_0$ ) e uma porcentagem de variação para este fator, especificada pelo usuário (neste trabalho utilizou-se 0,5%), são obtidos dois valores para o fator de multiplicação: um considerando a variação como positiva e outro como negativa, isto é  $k_1 = k_0 + \Delta k$  e  $k_2 = k_0 - \Delta k$ . Para um desses valores do fator de multiplicação, resolve-se o auto-sistema expresso pela Equação (3.14), com a seqüência de sub-rotinas BALANC, ELMHES, ELTRAN, HQR2, BALBAK pertencente ao pacote de sub-rotinas EISPACK,<sup>35</sup> para todas as regiões que compõem a célula, obtendo-se, assim, os correspondentes autovalores e vetores  $\mathbf{G}$  de ordem par. De posse destes vetores, os de ordem ímpar são calculados através da Equação (3.9). Com estas informações e mais as dimensões da célula pode-se construir a matriz dos coeficientes, dada pela Equação (3.37). A seguir, calcula-se o valor do determinante da matriz dos coeficientes, utilizando-se as sub-rotinas DGEFA e DGEDI pertencentes ao pacote de sub-rotinas LINPACK.<sup>36</sup>

Para o outro valor do fator de multiplicação repete-se o mesmo procedimento, sendo que somente para a região do combustível os autovalores e os vetores  $\mathbf{G}$  necessitam ser recalculados. Caso os dois valores do determinante, calculados como mencionado anteriormente, apresentem o mesmo sinal, a porcentagem de variação do fator de multiplicação é duplicada. Repete-se este procedimento até que para dois valores do fator de multiplicação os sinais dos respectivos determinantes sejam opostos, o que indica que entre estes valores do fator de multiplicação existe um, o fator de multiplicação efetivo, que anula o determinante da matriz dos coeficientes.

Com os dois valores assim determinados procede-se à busca de  $k_{ef}$  pelo método da bissecção. Assim, a próxima estimativa para o fator de multiplicação é obtida utilizando-se uma média aritmética simples entre os dois valores obtidos anteriormente. Com esta nova estimativa para o fator de multiplicação, os autovalores e os vetores  $\mathbf{G}$  para a região do combustível são recalculados, uma nova matriz dos coeficientes é construída e um novo valor para o determinante desta matriz é obtido. Para se atualizar

novamente o fator de multiplicação, através da média aritmética simples, descarta-se o valor do fator de multiplicação cujo determinante possui o mesmo sinal do determinante recém calculado. Prossegue-se o processo iterativo até que dois valores consecutivos do fator de multiplicação estejam dentro de uma precisão previamente estabelecida. O fator de multiplicação assim determinado é o fator de multiplicação efetivo da célula.

É importante ressaltar que, no processo de busca de  $k_{ef}$ , os autovalores do método  $P_N$  e os vetores  $\mathbf{G}$  precisam ser recalculados para a região do combustível, a cada nova estimativa do fator de multiplicação. Por consistência, neste processo verificou-se a necessidade de ordenar os autovalores do método  $P_N$  (escolheu-se a ordenação crescente em módulo). Além disso, na seqüência de sub-rotinas utilizada nos cálculos, os autovetores obtidos estão normalizados arbitrariamente e, para que se obtenham resultados consistentes, é necessário que os autovetores sejam normalizados de maneira coerente em todas as iterações. Desta forma, para um determinado autovalor, o autovetor correspondente é normalizado utilizando-se a norma euclidiana e também é preservado o sinal do componente que apresenta o maior módulo, no primeiro cálculo realizado.

Com referência aos fluxos escalares e correntes de grupo, como a sub-rotina DGEDI do pacote LINPACK, utilizada para se calcular o determinante da matriz dos coeficientes, fornece também um vetor do espaço nulo desta matriz, os coeficientes das soluções  $P_N$  nas regiões foram obtidos tomando-se os respectivos componentes deste vetor, conforme definido na Equação (3.37). De posse destes coeficientes os fluxos escalares e as correntes de grupo podem ser obtidos em qualquer ponto espacial de qualquer região através das Equações (3.23), (3.28) e (3.34). Como critério de normalização, foi adotado o fluxo escalar unitário no centro da célula, para o primeiro grupo de energia.

### 3.8 Resultados Numéricos

São apresentados, nesta seção, resultados numéricos para dois problemas-teste: no primeiro é analisada uma célula de combustível de um reator produtor de radioisótopos,<sup>41</sup> composta por três regiões e, no segundo, é analisada um célula de combustível composta por quatro regiões, onde além do combustível, do encamisamento e da região moderadora/refrigerante é acrescentada uma região extra, introduzida com o objetivo de simular a presença de outros materiais presentes no reator.

No primeiro problema-teste foi analisada uma célula de combustível de um reator produtor de radioisótopos, composta por três regiões, combustível ( $U_3Si_2+Al$ ), encamisamento ( $Al$ ) e moderador/refrigerante ( $H_2O$ ), com as seguintes dimensões:  $z_1 = 0,050$  cm,  $z_2 = 0,088$  cm e  $z_3 = 0,253$  cm. Na Tabela 4 estão relacionados, por região, os materiais que compõem esta célula, as respectivas concentrações atômicas e os números de identificação dos materiais na biblioteca de dados nucleares multigrupo WIMKAL-88.<sup>42</sup> Neste ponto é conveniente tecer algumas considerações sobre esta biblioteca de dados nucleares.

As constantes de grupo de interesse para os problemas analisados nesta seção, que são as seções de choque totais, o produto do número médio de nêutrons emitido por fissão pela seção de choque de fissão, a integral do espectro de fissão em cada grupo e as matrizes de transferência, para os materiais que compõem as células, foram obtidas da biblioteca de dados nucleares multigrupo WIMKAL-88. Esta biblioteca foi gerada com o sistema NJOY,<sup>43</sup> utilizando principalmente os dados nucleares básicos provenientes das bibliotecas ENDF/B-IV<sup>44</sup> e V,<sup>45</sup> obedecendo a estrutura de 69 grupos de energia utilizada no código WIMSD/4<sup>46</sup> e utilizando como função de ponderação uma combinação das funções Maxwelliana,  $1/E$  e espectro de fissão. Com a escolha desta estrutura de grupos, formada por 14 grupos rápidos (compreendidos entre  $1,000E+07eV$  e  $9,118E+03eV$ ), 13 ressonantes ( $9,118E+03eV$  e  $4,000E+00eV$ ) e 42 térmicos ( $4,000E+00eV$  e  $1,000E-05eV$ ), e a forma da função de ponderação, pretende-se enfatizar a importância das faixas térmica e epitérmica de energia.

Tabela 4 – Composição das regiões para os problemas-teste estudados.

Material	Concentração atômica (átomos/barn.cm)	Identificador na WIMKAL-88	Região
$^{235}\text{U}$	$2,44751 \times 10^{-3}$	92235	combustível
$^{238}\text{U}$	$9,72708 \times 10^{-3}$	92238	combustível
Si	$8,11638 \times 10^{-3}$	14000	combustível
Al	$3,47916 \times 10^{-2}$	13027	combustível
$^{10}\text{B}$	$2,11594 \times 10^{-7}$	10	combustível
Al	$6,02439 \times 10^{-2}$	13027	encamisamento
H	$6,68589 \times 10^{-2}$	1011	moderador/refrigerante
O	$3,34299 \times 10^{-2}$	8016	moderador/refrigerante
H	$1,71226 \times 10^{-2}$	1011	extra
O	$8,56140 \times 10^{-3}$	8016	extra
Al	$4,48154 \times 10^{-2}$	13027	extra

A biblioteca WIMKAL-88 contém dados de reações com nêutrons para 132 materiais e é distribuída pela Seção de Dados Nucleares da Agência Internacional de Energia Atômica. Nesta biblioteca são fornecidos somente os componentes isotrópicos ( $l = 0$ ) das matrizes de transferência, exceto para os materiais Hidrogênio, Deutério, Carbono e Oxigênio, que possuem o componente linearmente anisotrópico ( $l = 1$ ). A seção de choque microscópica total não é fornecida diretamente e foi calculada através da soma da seção de choque microscópica de absorção com a seção de choque microscópica de espalhamento que, por sua vez, foi obtida do componente isotrópico da matriz de transferência. No que concerne ainda ao componente linearmente anisotrópico, este foi multiplicado por 3 para levar em consideração o fator  $(2l + 1)$  incluído na definição das matrizes de transferência neste trabalho. As seções de choque macroscópicas e as matrizes de transferência, para cada região da célula, foram obtidas através da soma dos produtos dos dados microscópicos pelas respectivas densidades atômicas.

Nos primeiros cálculos realizados, utilizando esta biblioteca de dados nucleares, foi detectada a presença de três situações muito próximas à degenerescência, analisada em detalhes na Seção 2.5. A primeira dessas situações envolvia os grupos de energia 16, 17, 18 e 19, a segunda os grupos 20 e 21 e a terceira os grupos 24 e 25. Para solucionar este problema optou-se por condensar os grupos que apresentavam esta particularidade, reduzindo-se, assim, para 64 o número de grupos da biblioteca de dados nucleares utilizada nos cálculos. Para condensar a biblioteca de dados nucleares de 69 para 64 grupos de energia foi usada como função de ponderação o autovetor  $\Psi$  correspondente ao autovalor dominante da solução do auto-sistema expresso pela Equação (3.56), para a célula de três regiões homogeneizada. O autovalor dominante e a função de ponderação utilizada são fornecidos no Apêndice 1. Para investigar a influência desta condensação, foram calculados os valores de  $k_{ef}$  para o primeiro problema-teste a 69 e 64 grupos através do código ANISN, utilizando-se a aproximação  $S_4$ , e foram obtidos, respectivamente, os valores 1,2378 e 1,2376.

Assim, para o primeiro problema-teste, foram calculados com o método  $P_N$  e com o método  $S_N$ , como implementado no código ANISN,<sup>39</sup> utilizando-se a biblioteca de dados nucleares a 64 grupos de energia, o fator de multiplicação efetivo, os fluxos escalares e as correntes de grupo. No que diz respeito aos métodos, no  $P_N$  foi utilizado como critério de convergência o valor de  $1,0000 \times 10^{-5}$  para encerrar o processo de busca de  $k_{ef}$  e, no código ANISN, o valor de  $1,0000 \times 10^{-4}$ . Ainda neste código foram empregados conjuntos de quadraturas completamente simétricos, que satisfazem as condições de momento par<sup>39</sup> para geometria plana. No Apêndice 2 é apresentado um exemplo de dados de entrada para este código.

Na Tabela 5 são apresentados os valores de  $k_{ef}$  para diversas ordens de aproximação. Os valores obtidos são comparados com o valor 1,2614, que foi calculado utilizando a aproximação  $P_{47}$ . Observa-se que os desvios nos resultados dos dois métodos são bastante próximos, apesar dos desvios apresentados pelo método  $P_N$  serem sempre inferiores aos do método  $S_N$ , e que a concordância entre os resultados para  $N = 31$  indica que estes já possuem um nível de precisão satisfatório.

Tabela 5 – Fator de multiplicação efetivo para o problema de três regiões.

$N$	$P_N$	$\frac{P_{47} - P_N}{P_{47}} \times 100\%$	$S_{N+1}$	$\frac{P_{47} - S_{N+1}}{P_{47}} \times 100\%$
3	1,2381	1,85	1,2376	1,89
7	1,2476	1,09	1,2444	1,35
15	1,2570	0,35	1,2518	0,76
31	1,2608	0,05	1,2605	0,07

Nas Figuras 2 a 4 são apresentados e comparados os gráficos dos fluxos escalares em função da posição para o grupo 1, que é o grupo mais rápido e está compreendido entre 1,000E+07eV e 6,066E+06eV, para o grupo 22, último grupo ressonante, que está compreendido entre 9,877eV e 4,000eV, e para o grupo 59, trigésimo sétimo grupo térmico, que está compreendido entre 0,030eV e 0,025eV. As razões para a escolha destes grupos de energia são as seguintes: o grupo 1 foi escolhido por ser o grupo mais rápido, como mencionado anteriormente; o grupo 22 por conter a ressonância do  $^{238}\text{U}$  localizada em 6,67eV e o grupo 59 por conter a energia térmica de 0,0253eV.

Nas Tabelas 6 são apresentadas os valores das correntes de grupo nas interfaces internas da célula. Tanto os fluxos escalares quanto as correntes foram calculados utilizando-se a aproximação  $N = 31$ . Nos métodos utilizados, as normalizações para os fluxos escalares e as corrente são diferentes. Assim, para que se pudesse realizar estas comparações, impôs-se que, para o primeiro grupo de energia, os fluxos escalares calculados através dos dois métodos coincidissem no primeiro ponto espacial comum.

Nas Tabelas 7 são apresentados, para todos os 64 grupos de energia, os fluxos escalares e nas Tabelas 8 as correntes de grupo calculados com o método  $P_N$ , para  $N = 47$ , nas interfaces das regiões. É importante mencionar que, em virtude da condição de reflexão em  $z_0 = 0$  e  $z_3 = 0,253$  cm, as correntes nestas posições para todos os grupos de energia são nulas.

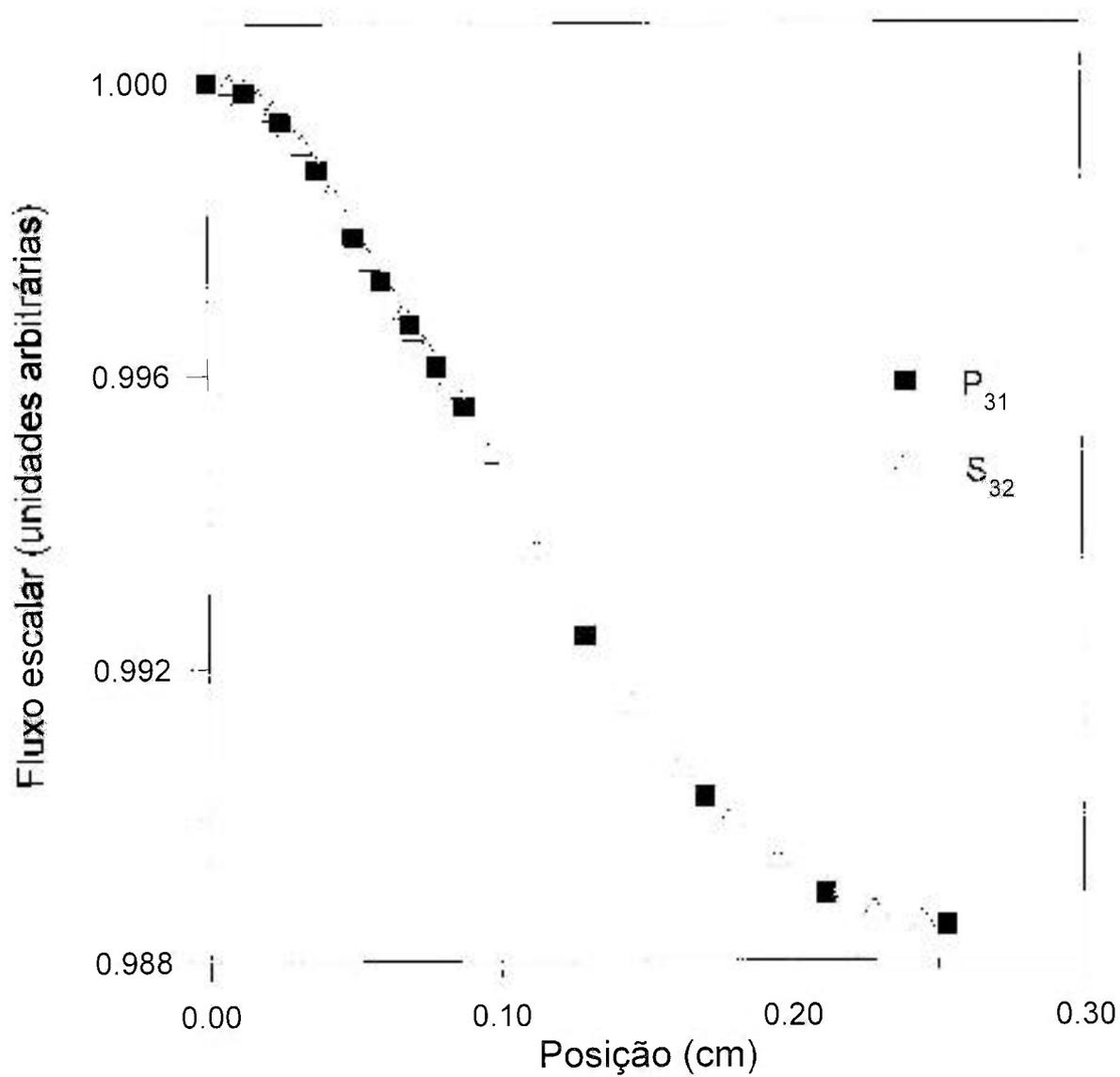


Figura 2 – Fluxo escalar no grupo 1 em função da posição.

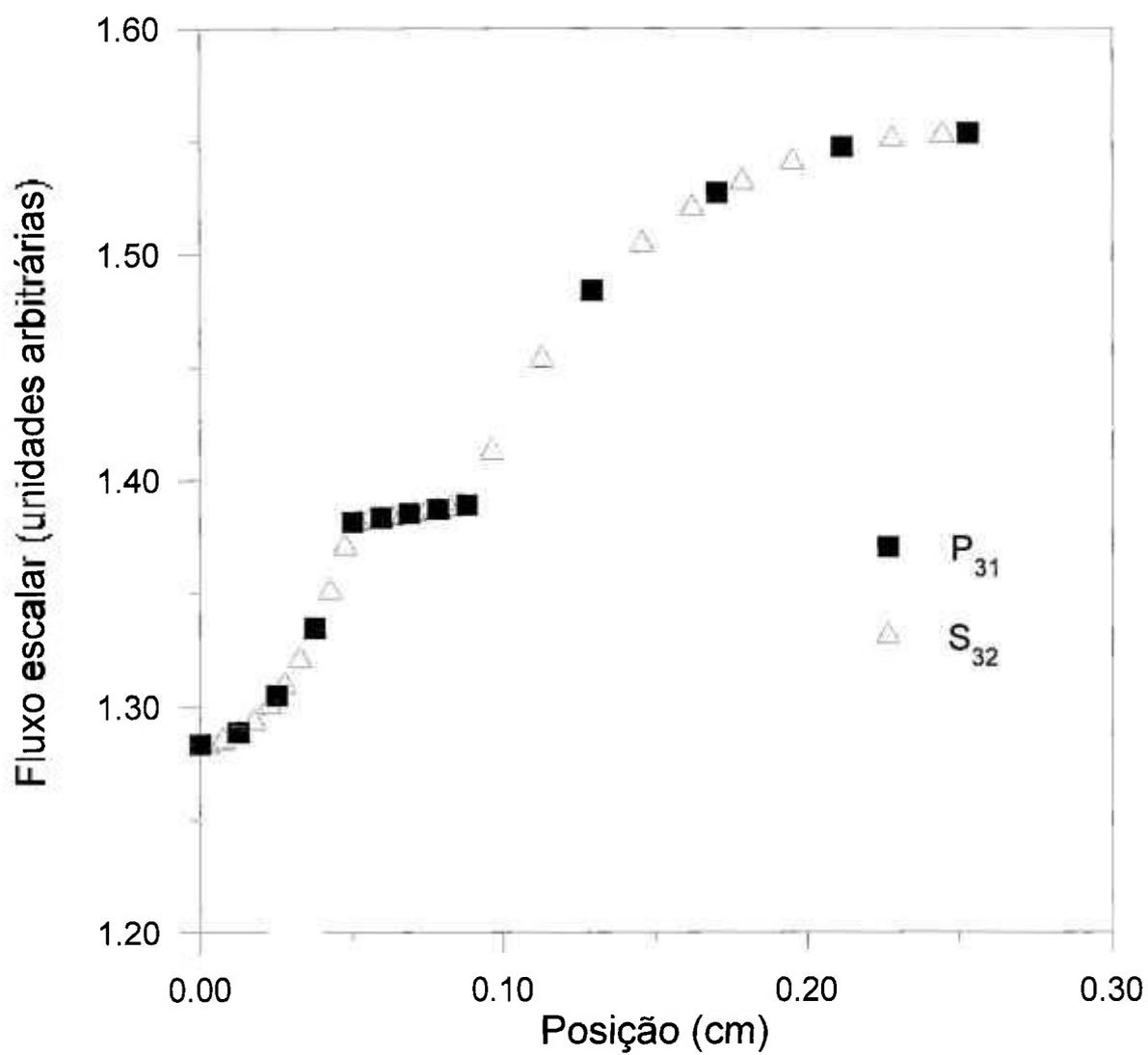


Figura 3 – Fluxo escalar no grupo 22 em função da posição.

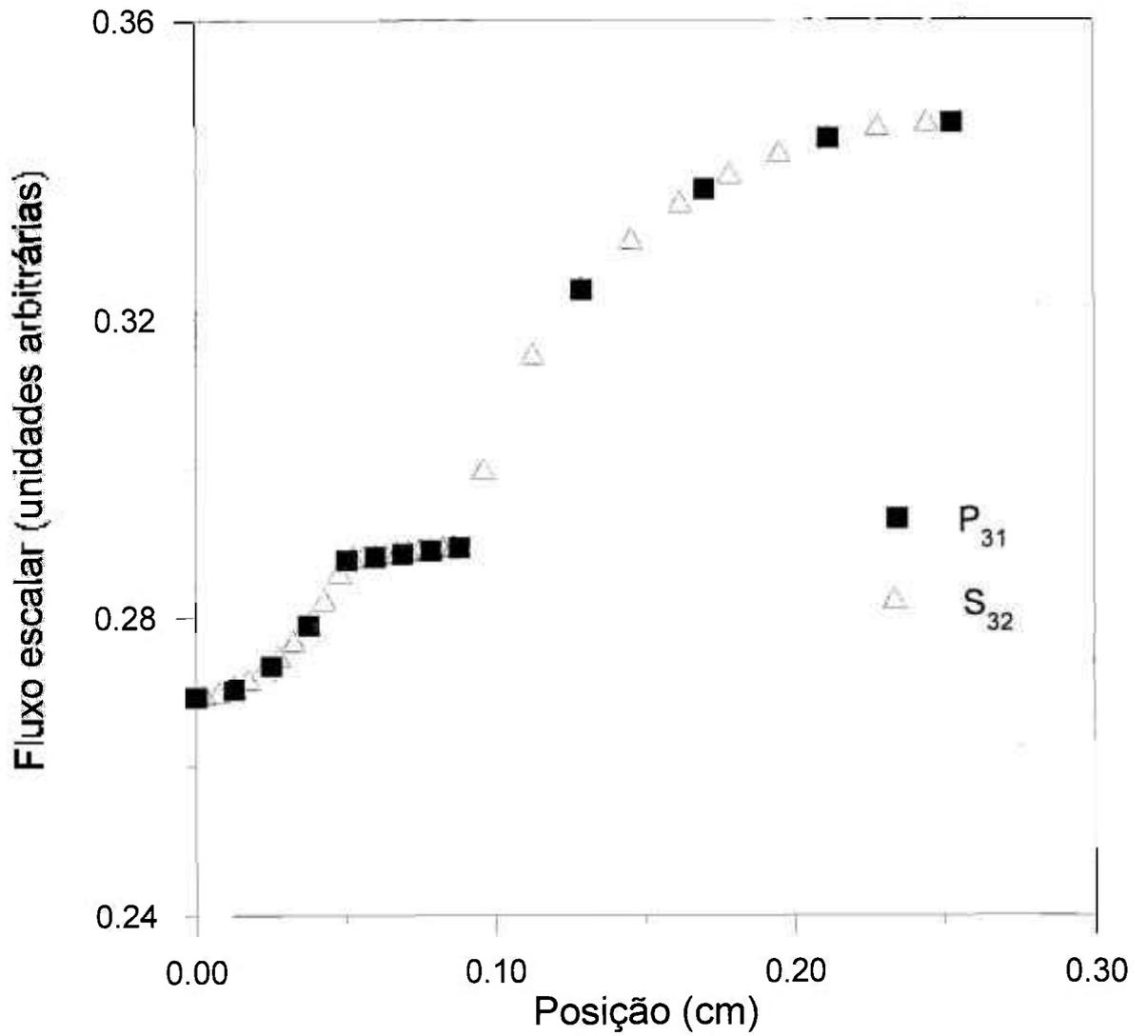


Figura 4 – Fluxo escalar no grupo 59 em função da posição.

Tabela 6a – Correntes de grupo em  $z_1$  e  $z_2$  para os grupos rápidos e ressonantes.

Grupo	$z_1$		$z_2$	
	$P_{31}$	$S_{32}$	$P_{31}$	$S_{32}$
1	1,716(-2) <sup>†</sup>	1,716(-2)	1,479(-2)	1,479(-2)
2	7,919(-2)	7,921(-2)	7,198(-2)	7,197(-2)
3	1,536(-1)	1,536(-1)	1,455(-1)	1,455(-1)
4	1,774(-1)	1,774(-1)	1,766(-1)	1,766(-1)
5	1,473(-1)	1,473(-1)	1,503(-1)	1,503(-1)
6	9,962(-2)	9,961(-2)	1,032(-1)	1,032(-1)
7	6,037(-2)	6,037(-2)	6,362(-2)	6,363(-2)
8	3,038(-2)	3,039(-2)	3,295(-2)	3,295(-2)
9	1,807(-2)	1,807(-2)	1,928(-2)	1,928(-2)
10	8,637(-3)	8,635(-3)	1,118(-2)	1,118(-2)
11	1,746(-3)	1,746(-3)	1,028(-4)	1,030(-4)
12	2,963(-3)	2,964(-3)	5,921(-3)	5,921(-3)
13	-5,193(-4)	-5,193(-4)	-6,791(-4)	-6,791(-4)
14	-1,224(-3)	-1,224(-3)	-1,371(-3)	-1,371(-3)
15	-2,742(-3)	-2,742(-3)	-4,322(-3)	-4,322(-3)
16	-9,909(-3)	-9,969(-3)	-8,448(-3)	-8,512(-3)
17	-3,155(-2)	-3,152(-2)	-3,154(-2)	-3,150(-2)
18	-2,629(-2)	-2,627(-2)	-2,626(-2)	-2,624(-2)
19	-2,447(-2)	-2,446(-2)	-2,444(-2)	-2,444(-2)
20	-1,278(-1)	-1,278(-1)	-1,277(-1)	-1,277(-1)
21	-1,176(-2)	-1,176(-2)	-1,187(-2)	-1,187(-2)
22	-1,042(-1)	-1,042(-1)	-1,040(-1)	-1,040(-1)

<sup>†</sup>Leia como  $1,716 \times 10^{-2}$

Tabela 6b – Correntes de grupo em  $z_1$  e  $z_2$  para os primeiros 21 grupos térmicos.

Grupo	$z_1$		$z_2$	
	$P_{31}$	$S_{32}$	$P_{31}$	$S_{32}$
23	-2,279(-3) <sup>†</sup>	-2,279(-3)	-2,401(-3)	-2,401(-3)
24	-1,978(-3)	-1,977(-3)	-2,013(-3)	-2,013(-3)
25	-1,047(-3)	-1,047(-3)	-1,077(-3)	-1,077(-3)
26	-2,358(-3)	-2,357(-3)	-2,404(-3)	-2,403(-3)
27	-1,078(-3)	-1,078(-3)	-1,103(-3)	-1,102(-3)
28	-2,062(-3)	-2,062(-3)	-2,071(-3)	-2,071(-3)
29	-7,398(-4)	-7,396(-4)	-7,355(-4)	-7,355(-4)
30	-7,445(-4)	-7,444(-4)	-7,424(-4)	-7,422(-4)
31	-6,996(-4)	-6,995(-4)	-6,991(-4)	-6,990(-4)
32	-6,281(-4)	-6,280(-4)	-6,300(-4)	-6,300(-4)
33	-5,500(-4)	-5,499(-4)	-5,529(-4)	-5,528(-4)
34	-4,947(-4)	-4,947(-4)	-4,994(-4)	-4,993(-4)
35	-4,660(-4)	-4,660(-4)	-4,700(-4)	-4,700(-4)
36	-4,281(-4)	-4,280(-4)	-4,333(-4)	-4,333(-4)
37	-7,329(-4)	-7,328(-4)	-7,432(-4)	-7,431(-4)
38	-1,109(-3)	-1,109(-3)	-1,127(-3)	-1,127(-3)
39	-1,559(-3)	-1,558(-3)	-1,580(-3)	-1,580(-3)
40	-3,875(-3)	-3,875(-3)	-3,919(-3)	-3,920(-3)
41	-5,079(-3)	-5,078(-3)	-5,134(-3)	-5,134(-3)
42	-6,552(-3)	-6,551(-3)	-6,596(-3)	-6,595(-3)
43	-5,432(-3)	-5,431(-3)	-5,454(-3)	-5,453(-3)

<sup>†</sup>Leia como  $-2,279 \times 10^{-3}$

Tabela 6c – Correntes de grupo em  $z_1$  e  $z_2$  para os últimos 21 grupos térmicos.

Grupo	$z_1$		$z_2$	
	$P_{31}$	$S_{32}$	$P_{31}$	$S_{32}$
44	-4,489(-3) <sup>†</sup>	-4,489(-3)	-4,499(-3)	-4,499(-3)
45	-3,582(-3)	-3,582(-3)	-3,592(-3)	-3,592(-3)
46	-4,051(-3)	-4,051(-3)	-4,063(-3)	-4,064(-3)
47	-6,770(-3)	-6,770(-3)	-6,797(-3)	-6,797(-3)
48	-7,535(-3)	-7,535(-3)	-7,573(-3)	-7,573(-3)
49	-1,220(-2)	-1,220(-2)	-1,227(-2)	-1,227(-2)
50	-1,810(-2)	-1,810(-2)	-1,821(-2)	-1,822(-2)
51	-3,356(-2)	-3,356(-2)	-3,379(-2)	-3,379(-2)
52	-2,856(-2)	-2,856(-2)	-2,875(-2)	-2,875(-2)
53	-2,622(-2)	-2,621(-2)	-2,638(-2)	-2,638(-2)
54	-2,275(-2)	-2,274(-2)	-2,289(-2)	-2,288(-2)
55	-2,389(-2)	-2,387(-2)	-2,402(-2)	-2,401(-2)
56	-2,765(-2)	-2,765(-2)	-2,781(-2)	-2,780(-2)
57	-2,729(-2)	-2,729(-2)	-2,744(-2)	-2,743(-2)
58	-2,119(-2)	-2,119(-2)	-2,131(-2)	-2,130(-2)
59	-2,240(-2)	-2,239(-2)	-2,253(-2)	-2,252(-2)
60	-2,306(-2)	-2,306(-2)	-2,319(-2)	-2,319(-2)
61	-2,300(-2)	-2,300(-2)	-2,313(-2)	-2,312(-2)
62	-2,169(-2)	-2,169(-2)	-2,181(-2)	-2,180(-2)
63	-1,811(-2)	-1,811(-2)	-1,821(-2)	-1,821(-2)
64	-9,591(-3)	-9,592(-3)	-9,642(-3)	-9,641(-3)

<sup>†</sup>Leia como  $-4,489 \times 10^{-3}$

Tabela 7a – Fluxos escalares nas interfaces para os grupos rápidos e ressonantes, obtidos com a aproximação  $P_{47}$ .

Grupo	$z_0$	$z_1$	$z_2$	$z_3$
1	1,000(+0) <sup>†</sup>	9,969(-1)	9,935(-1)	9,832(-1)
2	4,081(+0)	4,065(+0)	4,048(+0)	3,978(+0)
3	8,468(+0)	8,434(+0)	8,395(+0)	8,234(+0)
4	9,054(+0)	9,010(+0)	8,955(+0)	8,719(+0)
5	8,108(+0)	8,070(+0)	8,021(+0)	7,763(+0)
6	7,031(+0)	7,000(+0)	6,957(+0)	6,779(+0)
7	5,108(+0)	5,087(+0)	5,060(+0)	4,933(+0)
8	4,085(+0)	4,073(+0)	4,058(+0)	3,995(+0)
9	3,235(+0)	3,227(+0)	3,215(+0)	3,179(+0)
10	2,689(+0)	2,685(+0)	2,678(+0)	2,658(+0)
11	2,277(+0)	2,276(+0)	2,276(+0)	2,276(+0)
12	2,115(+0)	2,114(+0)	2,110(+0)	2,099(+0)
13	1,940(+0)	1,940(+0)	1,940(+0)	1,942(+0)
14	1,849(+0)	1,849(+0)	1,849(+0)	1,853(+0)
15	1,772(+0)	1,773(+0)	1,774(+0)	1,785(+0)
16	6,237(+0)	6,241(+0)	6,243(+0)	6,264(+0)
17	5,832(+0)	5,850(+0)	5,854(+0)	5,929(+0)
18	1,993(+0)	2,012(+0)	2,015(+0)	2,069(+0)
19	1,233(+0)	1,251(+0)	1,254(+0)	1,303(+0)
20	2,221(+0)	2,346(+0)	2,356(+0)	2,551(+0)
21	1,095(+0)	1,101(+0)	1,103(+0)	1,129(+0)
22	1,279(+0)	1,378(+0)	1,386(+0)	1,548(+0)

<sup>†</sup>Leia como  $1,000 \times 10^0$

Tabela 7b – Fluxos escalares nas interfaces para os primeiros 21 grupos térmicos, obtidos com a aproximação  $P_{47}$ .

Grupo	$z_0$	$z_1$	$z_2$	$z_3$
23	3,773(-1) <sup>†</sup>	3,781(-1)	3,785(-1)	3,834(-1)
24	4,776(-1)	4,782(-1)	4,786(-1)	4,826(-1)
25	4,367(-1)	4,370(-1)	4,372(-1)	4,394(-1)
26	6,963(-1)	6,971(-1)	6,975(-1)	7,033(-1)
27	3,002(-1)	3,006(-1)	3,007(-1)	3,035(-1)
28	2,482(-1)	2,492(-1)	2,495(-1)	2,546(-1)
29	4,569(-2)	4,613(-2)	4,623(-2)	4,792(-2)
30	4,505(-2)	4,548(-2)	4,559(-2)	4,730(-2)
31	4,651(-2)	4,691(-2)	4,701(-2)	4,865(-2)
32	4,822(-2)	4,856(-2)	4,865(-2)	5,016(-2)
33	4,784(-2)	4,811(-2)	4,820(-2)	4,954(-2)
34	4,828(-2)	4,853(-2)	4,860(-2)	4,983(-2)
35	4,917(-2)	4,939(-2)	4,946(-2)	5,063(-2)
36	4,733(-2)	4,753(-2)	4,760(-2)	4,868(-2)
37	8,730(-2)	8,764(-2)	8,776(-2)	8,962(-2)
38	1,418(-1)	1,423(-1)	1,424(-1)	1,453(-1)
39	1,793(-1)	1,800(-1)	1,802(-1)	1,842(-1)
40	4,638(-1)	4,655(-1)	4,662(-1)	4,762(-1)
41	4,756(-1)	4,781(-1)	4,789(-1)	4,919(-1)
42	4,694(-1)	4,730(-1)	4,740(-1)	4,902(-1)
43	2,721(-1)	2,754(-1)	2,762(-1)	2,890(-1)

<sup>†</sup>Leia como  $3,773 \times 10^{-1}$

Tabela 7c – Fluxos escalares nas interfaces para os últimos 21 grupos térmicos, obtidos com a aproximação  $P_{47}$ .

Grupo	$z_0$	$z_1$	$z_2$	$z_3$
44	1,767(-1) <sup>†</sup>	1,797(-1)	1,803(-1)	1,905(-1)
45	1,263(-1)	1,288(-1)	1,292(-1)	1,373(-1)
46	1,357(-1)	1,386(-1)	1,391(-1)	1,481(-1)
47	2,269(-1)	2,317(-1)	2,325(-1)	2,477(-1)
48	2,666(-1)	2,718(-1)	2,727(-1)	2,901(-1)
49	4,480(-1)	4,563(-1)	4,579(-1)	4,867(-1)
50	6,287(-1)	6,412(-1)	6,434(-1)	6,872(-1)
51	9,724(-1)	9,965(-1)	1,000(+0)	1,083(+0)
52	7,058(-1)	7,271(-1)	7,302(-1)	8,005(-1)
53	5,711(-1)	5,912(-1)	5,939(-1)	6,585(-1)
54	4,481(-1)	4,658(-1)	4,681(-1)	5,243(-1)
55	4,292(-1)	4,481(-1)	4,504(-1)	5,095(-1)
56	4,501(-1)	4,723(-1)	4,749(-1)	5,435(-1)
57	3,992(-1)	4,214(-1)	4,239(-1)	4,921(-1)
58	2,808(-1)	2,982(-1)	3,000(-1)	3,534(-1)
59	2,691(-1)	2,877(-1)	2,896(-1)	3,463(-1)
60	2,468(-1)	2,662(-1)	2,681(-1)	3,267(-1)
61	2,138(-1)	2,334(-1)	2,352(-1)	2,941(-1)
62	1,671(-1)	1,860(-1)	1,876(-1)	2,432(-1)
63	1,060(-1)	1,224(-1)	1,236(-1)	1,697(-1)
64	3,245(-2)	4,222(-2)	4,285(-2)	6,659(-2)

<sup>†</sup>Leia como  $1,767 \times 10^{-1}$

Tabela 8a – Correntes de grupo nas posições  $z_1$  e  $z_2$  para os grupos rápidos e ressonantes, obtidas com a aproximação  $P_{47}$ .

Grupo	$z_1$	$z_2$
1	1,709(-2) <sup>†</sup>	1,473(-2)
2	7,888(-2)	7,167(-2)
3	1,530(-1)	1,449(-1)
4	1,768(-1)	1,759(-1)
5	1,468(-1)	1,498(-1)
6	9,936(-2)	1,030(-1)
7	6,024(-2)	6,350(-2)
8	3,033(-2)	3,290(-2)
9	1,804(-2)	1,925(-2)
10	8,620(-3)	1,116(-2)
11	1,745(-3)	1,077(-4)
12	2,954(-3)	5,902(-3)
13	-5,166(-4)	-6,766(-4)
14	-1,219(-3)	-1,367(-3)
15	-2,730(-3)	-4,305(-3)
16	-9,873(-3)	-8,418(-3)
17	-3,142(-2)	-3,140(-2)
18	-2,617(-2)	-2,614(-2)
19	-2,435(-2)	-2,432(-2)
20	-1,273(-1)	-1,271(-1)
21	-1,170(-2)	-1,181(-2)
22	-1,037(-1)	-1,036(-1)

<sup>†</sup>Leia como  $1,709 \times 10^{-2}$

Tabela 8b – Correntes de grupo nas posições  $z_1$  e  $z_2$  para os primeiros 21 grupos térmicos, obtidas com a aproximação  $P_{47}$ .

Grupo	$z_1$	$z_2$
23	-2,270(-3) <sup>†</sup>	-2,392(-3)
24	-1,971(-3)	-2,007(-3)
25	-1,044(-3)	-1,075(-3)
26	-2,350(-3)	-2,396(-3)
27	-1,075(-3)	-1,101(-3)
28	-2,053(-3)	-2,063(-3)
29	-7,356(-4)	-7,324(-4)
30	-7,403(-4)	-7,394(-4)
31	-6,959(-4)	-6,965(-4)
32	-6,249(-4)	-6,280(-4)
33	-5,472(-4)	-5,512(-4)
34	-4,924(-4)	-4,981(-4)
35	-4,639(-4)	-4,687(-4)
36	-4,262(-4)	-4,323(-4)
37	-7,297(-4)	-7,407(-4)
38	-1,105(-3)	-1,124(-3)
39	-1,552(-3)	-1,573(-3)
40	-3,859(-3)	-3,903(-3)
41	-5,056(-3)	-5,111(-3)
42	-6,520(-3)	-6,566(-3)
43	-5,404(-3)	-5,424(-3)

<sup>†</sup>Leia como  $-2,270 \times 10^{-3}$

Tabela 8c – Correntes de grupo nas posições  $z_1$  e  $z_2$  para os últimos 21 grupos térmicos, obtidas com a aproximação  $P_{47}$ .

Grupo	$z_1$	$z_2$
44	-4,465(-3) <sup>†</sup>	-4,476(-3)
45	-3,563(-3)	-3,573(-3)
46	-4,030(-3)	-4,041(-3)
47	-6,736(-3)	-6,766(-3)
48	-7,498(-3)	-7,533(-3)
49	-1,214(-2)	-1,221(-2)
50	-1,802(-2)	-1,815(-2)
51	-3,343(-2)	-3,367(-2)
52	-2,846(-2)	-2,866(-2)
53	-2,614(-2)	-2,631(-2)
54	-2,269(-2)	-2,283(-2)
55	-2,382(-2)	-2,395(-2)
56	-2,760(-2)	-2,776(-2)
57	-2,724(-2)	-2,739(-2)
58	-2,116(-2)	-2,128(-2)
59	-2,237(-2)	-2,250(-2)
60	-2,303(-2)	-2,315(-2)
61	-2,299(-2)	-2,311(-2)
62	-2,167(-2)	-2,179(-2)
63	-1,811(-2)	-1,821(-2)
64	-9,610(-3)	-9,665(-3)

<sup>†</sup>Leia como  $-4,465 \times 10^{-3}$

Como segundo problema-teste, foi analisada uma célula de combustível formada por quatro regiões, quais sejam, combustível ( $U_3Si_2+Al$ ), encamisamento (Al), moderador/ refrigerante ( $H_2O$ ) e uma região extra (74,39 v/o Al + 25,61 v/o  $H_2O$ ), com as seguintes dimensões:  $z_1 = 0,050$  cm,  $z_2 = 0,088$  cm,  $z_3 = 0,213$  cm e  $z_4 = 0,253$  cm. Na Tabela 4 estão relacionados, por região, os materiais que compõem esta célula, as respectivas concentrações atômicas e os números de identificação dos materiais na biblioteca WIMKAL-88.

Foram calculados, novamente, com o método  $P_N$  e com o método  $S_N$ , como implementado no código ANISN, o fator de multiplicação efetivo, os fluxos escalares e as correntes de grupo. Na Tabela 9 são apresentados os valores de  $k_{ef}$  para diversas ordens de aproximação e estes valores são comparados com o valor 1,1891, que foi calculado com a aproximação  $P_{31}$  (a aproximação  $S_{32}$  forneceu o valor 1,1889). Observa-se que a introdução da região extra provocou uma queda no valor de  $k_{ef}$  da ordem de 5,7%. Em virtude da semelhança com os resultados alcançados no primeiro problema-teste, como pode ser observado através das Figuras 5 a 7, onde são comparados, para os dois problemas-teste analisados, os resultados da aproximação  $P_{31}$  para os fluxos escalares em função da posição nos grupos de energia de números 1, 22 e 59, resultados detalhados para os fluxos escalares e as correntes de grupo não são apresentados.

Tabela 9 – Fator de multiplicação efetivo para o problema de quatro regiões.

$N$	$P_N$	$\frac{P_{31} - P_N}{P_{31}} \times 100\%$	$S_{N+1}$	$\frac{P_{31} - S_{N+1}}{P_{31}} \times 100\%$
3	1,1660	1,94	1,1653	2,00
7	1,1747	1,21	1,1717	1,46
15	1,1857	0,29	1,1791	0,84

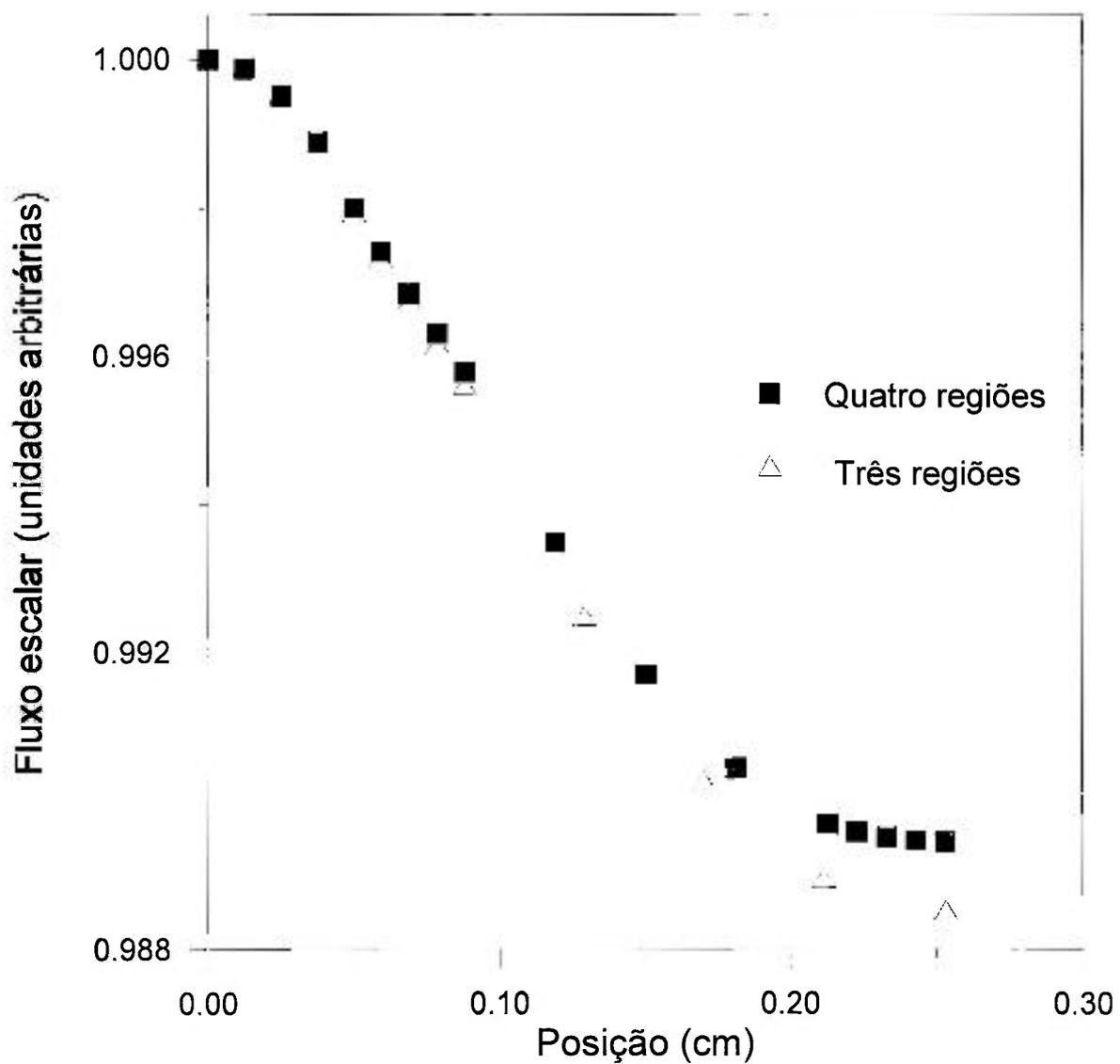


Figura 5 – Fluxo escalar no grupo 1 para os dois problemas-teste, obtido com a aproximação  $P_{31}$ .

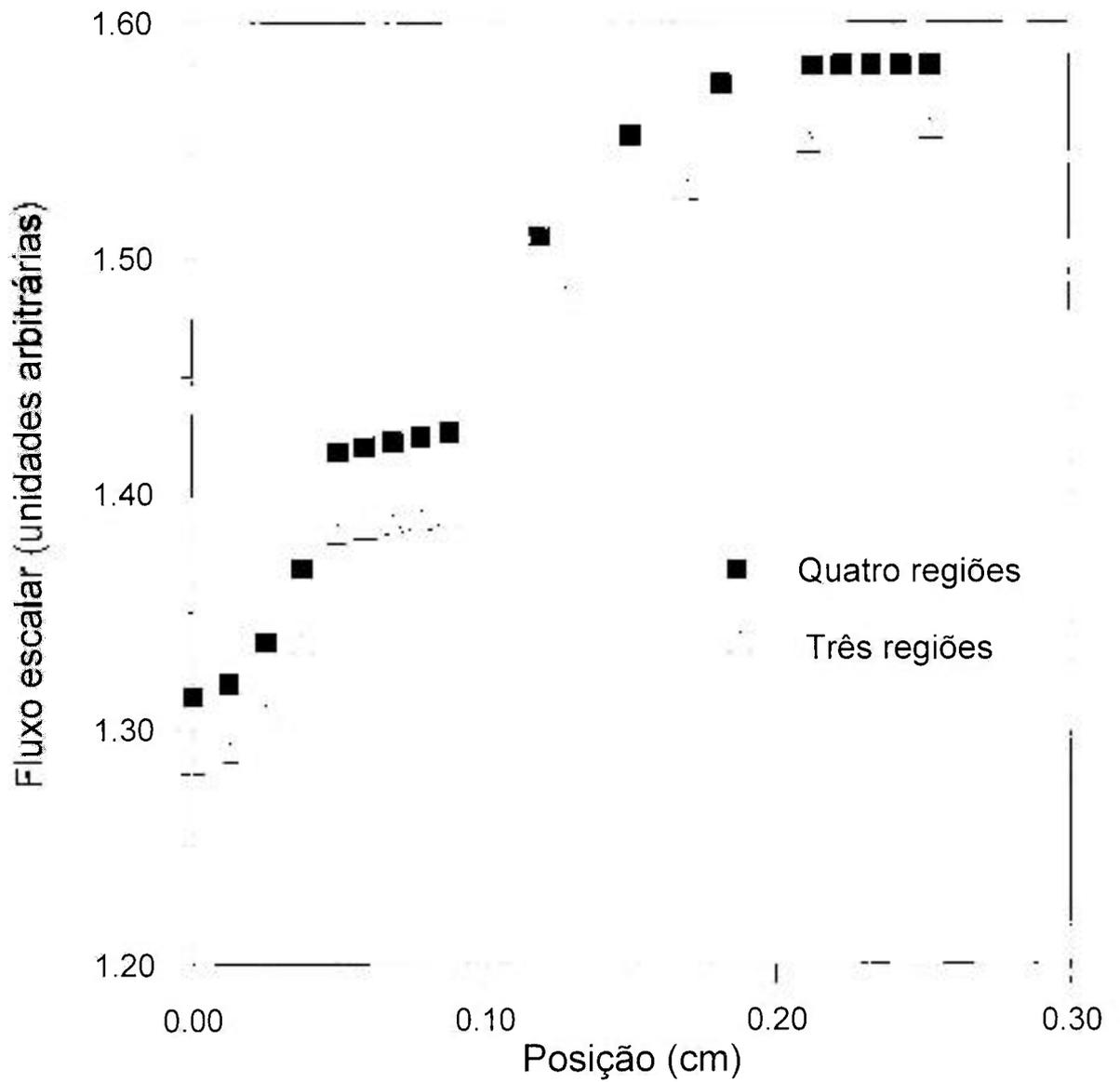


Figura 6 – Fluxo escalar no grupo 22 para os dois problemas-teste, obtido com a aproximação  $P_{31}$ .

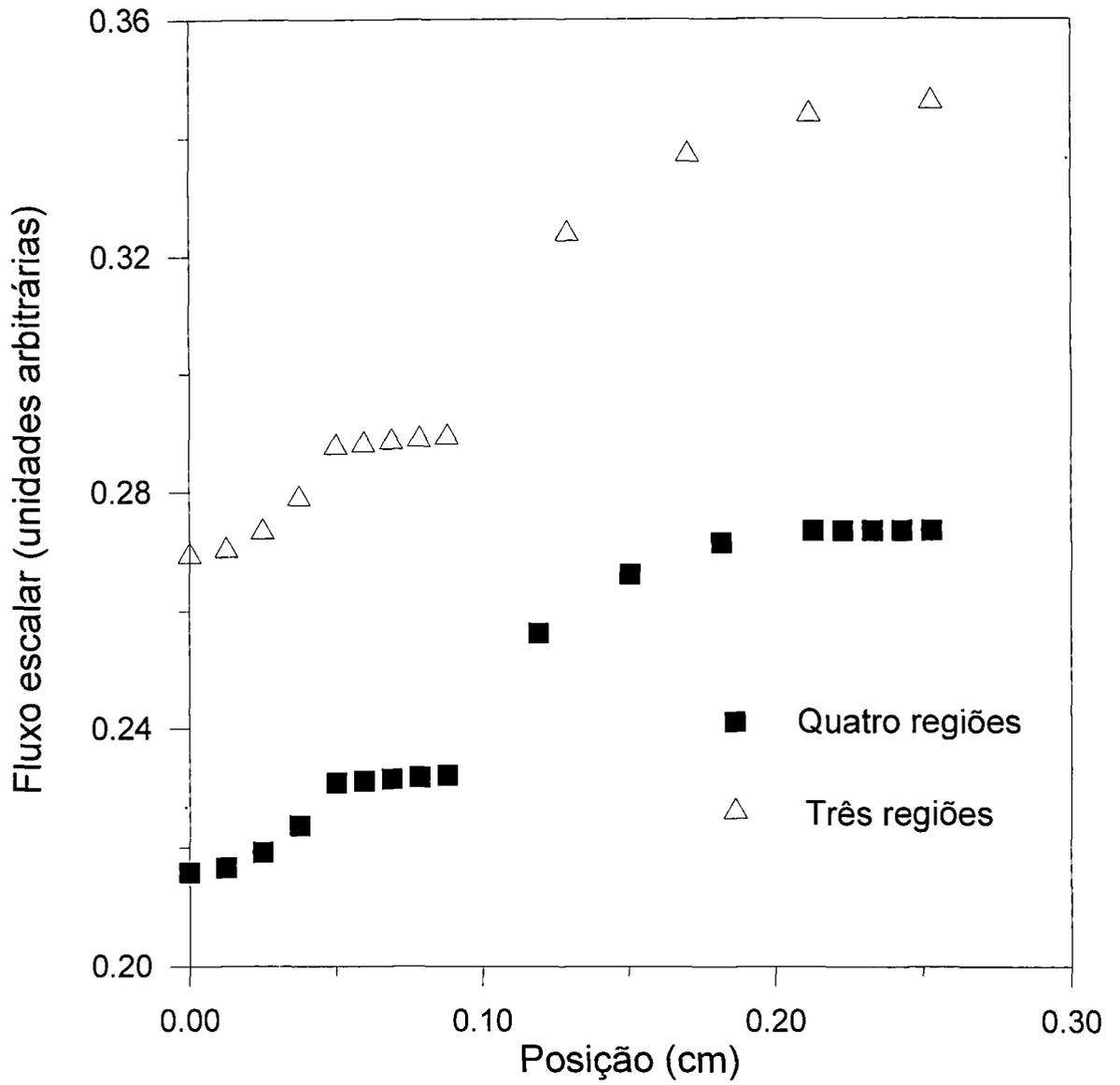


Figura 7 – Fluxo escalar no grupo 59 para os dois problemas-teste, obtido com a aproximação  $P_{31}$ .

Para encerrar este capítulo, faz-se necessário um comentário sobre os tempos de computação gastos quando um ou outro método é utilizado na solução dos problemas estudados. O tempo total utilizado pelo código ANISN num microcomputador Pentium com frequência de relógio igual 100 MHz e 64 Mbytes de memória RAM foi de uma a três ordens de grandeza inferior ao utilizado pelo método  $P_N$ , para  $N$  variando de 3 a 15, devido à simplificação introduzida pela discretização espacial no método  $S_N$ . Desta forma, conclui-se que o método  $P_N$  deve ser encarado somente como uma ferramenta de validação para este tipo de problema.

## 4 CONCLUSÕES E RECOMENDAÇÕES

Neste capítulo são apresentadas as conclusões do presente trabalho e as recomendações para trabalhos futuros.

No que concerne à originalidade do trabalho, pode-se mencionar a solução particular da equação de transporte aplicada à faixa de energia de moderação e a introdução de uma nova classe de polinômios, denominada polinômios generalizados de Chandrasekhar, como discutido na Seção 2.2. Quanto à aplicação da solução  $P_N$  da equação de transporte ao cálculo de célula, discutida no Capítulo 3, esta se apresenta como um método de cálculo alternativo ao método das potências,<sup>1</sup> comumente utilizado em códigos que efetuam cálculo de célula.

Alguns aspectos importantes do trabalho realizado merecem ser comentados. O primeiro deles é que no processo de obtenção de uma estimativa inicial para o fator de multiplicação efetivo da célula, descrito em detalhes na Seção 3.7, pelas duas maneiras consideradas, tanto na solução do auto-sistema expresso pela Equação (3.56) quanto no processo de varredura, foi observada a presença de um único autovalor maior que a unidade. A literatura<sup>1</sup> menciona a possibilidade de existência de mais que um autovalor maior que a unidade, porém, nos casos-exemplo estudados neste trabalho, isto não foi observado. No caso da ocorrência de mais que um autovalor maior que a unidade, o maior deles é que tem significado físico, pois corresponde à condição de criticalidade com menor quantidade de material físsil.

O segundo aspecto importante é que, apesar de serem fornecidos na Referência 47 uma série de problemas-padrão, utilizados e recomendados para a validação de códigos que realizam o cálculo de célula, não se julgou adequado adotar estes problemas na Seção 3.8. A razão para isto é que, como nesta referência não são fornecidas as constantes de grupo, se fossem efetuadas comparações entre os resultados

que seriam obtidos e os da Referência 47, estas não seriam conclusivas, visto que sempre pairaria a dúvida sobre a qualidade das constantes de grupo utilizadas.

Outro aspecto importante é que, sob o ponto de vista do processamento de dados nucleares, se forem disponibilizadas bibliotecas de constantes de grupo em uma estrutura de grupos fina (maior ou igual a 40 grupos) e se for utilizado o procedimento descrito no Capítulo 3, as constantes de grupo desta biblioteca poderão ser condensadas por região, para serem utilizadas em códigos que realizam cálculos em poucos grupos de energia (2 a 6 grupos) com um maior detalhamento geométrico, utilizando-se as integrais das Equações (3.23), (3.28) e (3.34) sobre a espessura da região. Outro ponto importante que merece uma investigação posterior é a utilização direta do autovetor  $\Psi$ , correspondente ao autovalor dominante da solução do auto-sistema expresso pela Equação (3.56) para a célula homogeneizada, como função de ponderação para condensar as constantes de uma estrutura de grupos fina para uma a poucos grupos de energia para serem, então, utilizadas em códigos que realizam o cálculo de todo o núcleo do reator.

Ainda outro ponto que pode ser investigado posteriormente é o erro causado pela discretização espacial utilizada no método das ordenadas discretas e implementada no código ANISN. Essa análise teria como base a equivalência<sup>48</sup> que ocorre entre o método  $P_N$ , quando são aplicadas as condições de contorno de Mark, e o método  $S_N$ , quando são utilizados os conjuntos de quadraturas de Gauss-Legendre.<sup>1</sup>

Os resultados apresentados na seção anterior confirmam que o método  $S_N$ , como implementado no código ANISN, produz resultados bastante confiáveis quando aplicado ao cálculo de células e deve ser utilizado em cálculos rotineiros, enquanto que o método  $P_N$  deve ser utilizado, somente, como uma ferramenta de validação. Outro detalhe observado nestes resultados é a ordem da aproximação que se precisa utilizar para obter resultados com uma certa qualidade: enquanto que num cálculo de um “assembly” a ordem da aproximação não excede a cinco,<sup>18</sup> no cálculo de célula este valor deve ser maior que trinta.

Para finalizar, como os resultados apresentados na Seção 3.8 foram obtidos através da utilização de matrizes de transferência que possuíam somente o componente linearmente anisotrópico, é importante que novos cálculos sejam efetuados considerando-se expansões em polinômios de Legendre de ordens superiores, com o objetivo de se verificar a influência destes componentes nos resultados finais, visto que, há trabalhos na literatura, por exemplo a Referência 49, que indicam que o espalhamento até terceira ordem pode ter efeitos importantes no cálculo celular em geometria plana.

## APÊNDICE 1

### **Função de Ponderação para Condensação da Biblioteca a 69 Grupos**

Como autovalor dominante da solução do auto-sistema expresso pela Equação (3.56) para a célula de três regiões homogeneizada foi encontrado o valor  $k_{\text{hom}} = 1,2333$  e a função de ponderação utilizada para condensar a biblioteca de dados nucleares multigrupo de 69 para 64 grupos de energia é reproduzida na Tabela 10, apresentada a seguir.

Tabela 10 – Função de ponderação a 69 grupos de energia.

Grupo	Valor da função	Grupo	Valor da função	Grupo	Valor da função
1	1,1009(+0) <sup>†</sup>	24	1,3960(+0)	47	4,8809(-1)
2	4,3931(+0)	25	1,1493(+0)	48	2,8629(-1)
3	8,9733(+0)	26	1,1558(+0)	49	1,8777(-1)
4	9,3825(+0)	27	1,4809(+0)	50	1,3486(-1)
5	8,3051(+0)	28	3,8459(-1)	51	1,4517(-1)
6	7,2090(+0)	29	4,8461(-1)	52	2,4241(-1)
7	5,2310(+0)	30	4,4158(-1)	53	2,8319(-1)
8	4,2199(+0)	31	7,0620(-1)	54	4,7191(-1)
9	3,3549(+0)	32	3,0476(-1)	55	6,5453(-1)
10	2,7941(+0)	33	2,5480(-1)	56	9,9831(-1)
11	2,3997(+0)	34	4,7681(-2)	57	7,1555(-1)
12	2,2025(+0)	35	4,7064(-2)	58	5,7547(-1)
13	2,0406(+0)	36	4,8453(-2)	59	4,5019(-1)
14	1,9471(+0)	37	5,0033(-2)	60	4,3058(-1)
15	1,8784(+0)	38	4,9473(-2)	61	4,5135(-1)
16	1,6817(+0)	39	4,9806(-2)	62	4,0120(-1)
17	1,6507(+0)	40	5,0628(-2)	63	2,8303(-1)
18	1,6320(+0)	41	4,8694(-2)	64	2,7238(-1)
19	1,6130(+0)	42	8,9676(-2)	65	2,5181(-1)
20	3,1659(+0)	43	1,4542(-1)	66	2,2077(-1)
21	3,0435(+0)	44	1,8428(-1)	67	1,7671(-1)
22	2,1552(+0)	45	4,7631(-1)	68	1,1767(-1)
23	1,3497(+0)	46	4,9109(-1)	69	4,2456(-2)

<sup>†</sup>Leia como  $1,1009 \times 10^0$

## APÊNDICE 2

### Dados de Entrada para o Código ANISN

A seguir são apresentados, de uma forma esquematizada, os dados de entrada utilizados no código ANISN para resolver o problema do cálculo de célula, considerando-se três regiões, dez intervalos espaciais por região e ordem de aproximação igual a quatro ( $S_4$ ). Para se obter os outros resultados, um único parâmetro foi variado, qual seja, a ordem de aproximação e, conseqüentemente, os conjuntos de quadraturas, fornecidos nos cartões 6\*\* e 7\*\*.

15\$\$		1		0		1
		4		1		1
		1		3		30
		1		64		3
		45		108		6
		0		6		6
	5R	0		30		0
		0		0		0
		50	5R	0		1
		0				
16**	2R	0.00000E+00		1.00000E-04	4R	0.00000E+00
		1.00000E+00		0.00000E+00		5.00000E-01
		2.00000E-04	3R	0.00000E+00		
	T					
13\$\$		1001		1002		1003
		1004		1005		1006

	T						
2**	10R	1.00000E+00	20R	0.00000E+00			
	T						
1**		2.59500E-02		1.13900E-01		2.13800E-01	
		2.30000E-01		1.76800E-01		1.11100E-01	
		6.33000E-02		3.30700E-02		1.65100E-02	
		8.09400E-03		3.91300E-03		1.87400E-03	
		8.93100E-04		4.23900E-04		2.01000E-04	
		8.87200E-05		4.50800E-05		2.29000E-05	
		1.16300E-05		2.67000E-06	49R	0.00000E+00	
4**	9I	0.000	9I	0.050	9I	0.088	
		0.253					
5**	64R	1.00000E+00					
6**		0.00000E+00		1.66667E-01	2R	3.33333E-01	
		1.66667E-01					
7**		-9.36742E-01		-8.68890E-01		-3.50021E-01	
		3.50021E-01		8.68890E-01			
8\$\$	10R	1	10R	2	10R	3	
9\$\$		1		3		5	
19\$\$	3R	1					
10\$\$		1		2		3	
		4		5		6	
11\$\$	6R	0					
12**	6R	1.00000E+00					
	T		T				

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1 – BELL, G.; GLASSTONE S. *Nuclear reactor theory*. New York: Van Nostrand Reinhold Company, 1970.
- 2 – JEANS, J. H. The equations of radiative transfer of energy. *Mon. Not. Roy. Astron. Soc.*, v. 78, p. 28–36, 1917.
- 3 – MARSHAK, R. E. Note on the spherical harmonics method as applied to the Milne problem for a sphere. *Phys. Rev.*, v. 71, p. 443–446, 1947.
- 4 – MARK, J. C. *The spherical harmonics method I*. Ottawa, Canada: National Research Council of Canada, Atomic Energy Project, Report MT92, 1944.
- 5 – MARK, J. C. *The spherical harmonics method II*. Ottawa, Canada: National Research Council of Canada, Atomic Energy Project, Report MT97, 1945.
- 6 – DAVISON, B. *Neutron transport theory*. London: Oxford University Press, 1957.
- 7 – KOFINK, W. Complete spherical harmonics solution of the Boltzmann equation for neutron transport in homogeneous media with cylindrical geometry. *Nucl. Sci. Eng.*, v.6, p. 475–486, 1959.
- 8 – POMRANING, G. C. An improved free-surface boundary condition for the  $P_3$  approximation. *Nucl. Sci. Eng.*, v.18, p. 528–530, 1964.
- 9 – POMRANING, G. C. Variational boundary conditions for the spherical harmonics approximation to the neutron transport equation. *Ann. Phys.*, v.27, p. 193–215, 1964.
- 10 – FEDERIGHI, F. D. Vacuum boundary conditions for the spherical harmonics method. *Nukleonik*, v.6, p. 277–285, 1964.
- 11 – GELBARD, E. M. In: GREESPAN, H.; KELBER, C. N.; OKRENT, D. (Eds.) *Computing methods in reactor physics*. New York: Gordon and Breach, 1968.

- 12 – NESHAAT, K; SIEWERT, C. E; ISHIGURO, Y. An improved  $P_L$  solution to the reflected critical-reactor problem in slab geometry. *Nucl. Sci. Eng.*, v.62, p. 330–332, 1977.
- 13 – ARONSON, R. Subcritical problems in spherical geometry. *Nucl. Sci. Eng.*, v.86, p. 136–149, 1984.
- 14 – ARONSON, R. Critical problems for bare and reflected slabs and spheres. *Nucl. Sci. Eng.*, v.86, p. 150–156, 1984.
- 15 – LEE, C. E; DIAS, M. P. Analytical solutions to the moment transport equations — I: one group, one region slab and sphere criticality. *Ann. Nucl. Energy*, v.11, p. 515–530, 1984.
- 16 – LARSEN, E. W; POMRANING, G. C. The  $P_N$  theory as an asymptotic limit of transport theory in planar geometry — I: analysis. *Nucl. Sci. Eng.*, v.109, p. 49–75, 1991.
- 17 – RULKO, R. P; LARSEN, E. W; POMRANING, G. C. The  $P_N$  theory as an asymptotic limit of transport theory in planar geometry — II: numerical results. *Nucl. Sci. Eng.*, v.109, p. 76–85, 1991.
- 18 – 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. *Ann. Nucl. Energy*, v.12, p. 613–632, 1985.
- 19 – SIEWERT, C. E. A spherical-harmonics method for multi-group or non-gray radiation transport. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, v.49, p. 95–106, 1993.
- 20 – 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.
- 21 – GARCIA, R. D. M.; SIEWERT, C. E. The  $F_N$  method for multigroup transport theory with upscattering. *Nucl. Sci. Eng.*, v.130, p. 194–212, 1998.

- 22 – FLETCHER, J. K. The solution of the multigroup neutron transport equation using spherical harmonics. *Nucl. Sci. Eng.*, v.84, p. 33–46, 1983.
- 23 – FLETCHER, J. K. A solution of the multigroup transport equation using spherical harmonics. *Transp. Theory Stat. Phys.*, v.15, p. 157–179, 1986.
- 24 – KOBAYASHI, K. Spherical harmonics method for a two-dimensional multigroup transport equation using a semi-discrete ordinates equation: part I. *Nucl. Sci. Eng.*, v.92, p. 397–406, 1986.
- 25 – KOBAYASHI, K. Spherical harmonics method for a two-dimensional multigroup transport equation using a semi-discrete ordinates equation: part II. *Nucl. Sci. Eng.*, v.92, p. 407–420, 1986.
- 26 – GARCIA, R. D. M.; SIEWERT, C. E. Multigroup transport theory with anisotropic scattering. *J. Comput. Phys.*, v. 46, p. 237–270, 1982.
- 27 – BENASSI, M.; GARCIA, R. D. M.; KARP, A. H.; SIEWERT, C. E. A high-order spherical harmonics solution to the standard problem in radiative transfer. *Astrophys. J.*, v. 280, p. 853–864, 1984.
- 28 – GARCIA, R. D. M.; SIEWERT, C. E.; THOMAS Jr., J. R. The classical spherical-harmonics method in transport theory. *Trans. Am. Nucl. Soc.*, v. 71, p. 220–222, 1994.
- 29 – CHANDRASEKHAR, S. *Radiative transfer*. London: Oxford University Press, 1950.
- 30 – GARCIA, R. D. M.; SIEWERT, C. E. On computing the Chandrasekhar polynomials in high order and high degree. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, v. 43, p. 201–205, 1990.
- 31 – CALDEIRA, A. D.; DIAS, A. F.; GARCIA, R. D. M. Desenvolvimento do método  $P_N$  para estudo da moderação de nêutrons em geometria plana. *XI Encontro Nacional de Física de Reatores e Termoidráulica*, Poços de Caldas, Minas Gerais, 18–22 Agosto 1997.

- 32 – CALDEIRA, A. D.; DIAS, A. F.; GARCIA, R. D. M. A  $P_N$  solution to the multigroup slowing-down problem — I: basic formulation. *Nucl. Sci. Eng.*, v.130, p. 60–69, 1998.
- 33 – BENASSI, M.; COTTA, R. M.; SIEWERT, C. E. The  $P_N$  method for radiative transfer problems with reflective boundary conditions. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, v.30, p. 547–553, 1983.
- 34 – CALDEIRA, A. D.; DIAS, A. F.; GARCIA, R. D. M. A  $P_N$  solution to the multigroup slowing-down problem — II: the degenerate case. *Nucl. Sci. Eng.*, v.130, p. 70–78, 1998.
- 35 – SMITH, B. T.; BOYLE, J. M.; DONGARRA, J. J.; GARBOW, B. S.; IKEBE, Y.; KLEMA, V. C.; MOLER, C. B. *Matrix eigensystem routines – EISPACK guide*. Springer-Verlag, Berlin, 1976.
- 36 – DONGARRA, J. J.; BUNCH, J. R.; MOLER, C. B.; STEWART, G. W. *LINPACK user's guide*. SIAM, Philadelphia, 1979.
- 37 – GARCIA, R. D. M.; SIEWERT, C. E. Multigroup transport theory — II: numerical results. *Nucl. Sci. Eng.*, v.78, p. 315–323, 1981.
- 38 – DIAS, A. F. Tese de Doutorado em Desenvolvimento, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, São Paulo, 1999.
- 39 – ENGLE Jr., W. W. *A users manual for ANISN, a one dimensional discrete ordinates transport code with anisotropic scattering*. Report K-1693, Oak Ridge National Laboratory, Oak Ridge, Tennessee, 1967.
- 40 – GARCIA, R. D. M.; SIEWERT, C. E. A generalized spherical harmonics solution for radiative transfer models that include polarization effects. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Transfer*, v. 36, p. 401–423, 1986.
- 41 – BATISTA, J. L.; RENKE, C. A. C. Nova concepção do núcleo do reator produtor de radioisótopos utilizando o combustível  $U_3Si_2 - Al$ . *V Congresso Geral de Energia Nuclear*, Rio de Janeiro, 28 Agosto–2 Setembro 1994.

- 42 – KIM, J.-D. *WIMKAL-88, the 1988 version of the WIMS-KAERI library*. Report IAEA-NDS-98, IAEA Nuclear Data Section, Viena, 1990.
- 43 – MacFARLANE, R. E.; MUIR, D. W.; BOICOURT, R. M. *The NJOY nuclear data processing system, volume I: user's manual*, Report LA-9303-M, ENDF-324. Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico, 1982.
- 44 – GARBER, D.; DUNFORD, C.; PEARLSTEIN, S. (Eds.) *ENDF-102 data formats and procedures for the evaluated nuclear data file*. BNL-NCS 50496, National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory, New York, 1975.
- 45 – KINSEY, R. (Ed.) *ENDF-102 data formats and procedures for the evaluated nuclear data file, ENDF/B-V*. BNL-NCS 50496, National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory, New York, 1983.
- 46 – ROTH, M. J.; MACDOUGALL, J. D.; KEMSHELL, P. B. *The preparation of input data for WIMS*. Report AEEW-R538, Atomic Energy Establishment, Winfrith, Dorchester, Dorset, England, 1967.
- 47 – KERR, W.; KING, J. S.; LEE, J. C.; MARTIN, W. R.; WEHE, D. K. *The Ford nuclear reactor demonstration project for the evaluation and analysis of low enrichment fuel – final report*. Report ANL/RERTR/TM-17, Argonne National Laboratory, Argonne, Illinois, 1991.
- 48 – BARICHELLO, L. B.; SIEWERT, C. E. On the equivalence between the discrete ordinates and the spherical harmonics methods in radiative transfer. *Nucl. Sci. Eng.*, v.130, p. 79–84, 1998.
- 49 – MENDELSON, M. R. The effect of anisotropic scattering in plane-geometry transport theory and Monte Carlo calculations. *Nucl. Sci. Eng.*, v.28, p. 127–132, 1967.