

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

**Solução de Problemas Estacionários e
Transientes da Teoria da Difusão de
Nêutrons Multigrupo em Geometria
Cartesiana via Abordagens Nodais e
Exponenciais Matriciais**

por

Rodrigo Zanette

Tese submetida como requisito parcial
para a obtenção do título de
Doutor em Matemática Aplicada

Profa. Dra. Liliane Basso Barichello
Orientadora

Prof. Dr. Claudio Zen Petersen
Coorientador

Porto Alegre, abril de 2021.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Zanette, Rodrigo

Solução de Problemas Estacionários e Transientes da Teoria da Difusão de Nêutrons Multigrupo em Geometria Cartesiana via Abordagens Nodais e Exponenciais Matriciais / Rodrigo Zanette.—Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2021.

163 p.: il.

Tese (Doutorado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2021.

Orientadora: Barichello, Liliane Basso; Coorientador: Zen Petersen, Claudio

Tese: Matemática Aplicada,
teoria da difusão de nêutrons, criticalidade, cinética espacial,
abordagens nodais.

Solução de Problemas Estacionários e Transientes da Teoria da Difusão de Nêutrons Multigrupo em Geometria Cartesiana via Abordagens Nodais e Exponenciais Matriciais

por

Rodrigo Zanette

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

Doutor em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Teoria de Transporte de Partículas

Orientadora: Profa. Dra. Liliane Basso Barichello

Coorientador: Prof. Dr. Claudio Zen Petersen

Banca examinadora:

Prof. Dr. Julio Cesar Lombaldo Fernandes
PPGMAp-UFRGS

Prof. Dr. Marcelo Schramm
CEng-UFPel

Prof. Dr. Roberto David Martinez Garcia
IEAv-DCTA

Tese defendida e aprovada em
abril de 2021.

Prof. Dr. Lucas da Silva Oliveira
Coordenador

AGRADECIMENTOS

Minha enorme gratidão a todos que propiciaram o meu crescimento humano e intelectual durante todos estes anos de estudo. De modo especial, agradeço à Deus pelo dom da vida e por todas as bênçãos concedidas.

Agradeço aos meus familiares que me apoiaram e incentivaram em todos os momentos, sendo o meu porto seguro.

Agradeço à Profa. Liliane Basso Barichello e ao Prof. Claudio Zen Petersen pela oportunidade de realização deste trabalho, pela orientação e pelos ensinamentos.

Agradeço a todos os professores e colegas do Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada da UFRGS pela troca de conhecimento, pela amizade e pelo apoio.

Por fim, agradeço à Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) pelo suporte financeiro.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	ix
LISTA DE TABELAS	x
LISTA DE SIGLAS	xiii
LISTA DE SÍMBOLOS	xv
RESUMO	xviii
ABSTRACT	xx
1 INTRODUÇÃO	2
1.1 Objetivo geral	22
1.1.1 Objetivos específicos	22
2 MODELO FÍSICO-MATEMÁTICO DA TEORIA DA DIFUSÃO DE NÊUTRONS	25
2.1 Fluxo escalar de nêutrons	25
2.2 Aproximação pela lei de Fick	25
2.3 Seção de choque macroscópica	26
2.4 Fissão nuclear	26
2.5 Teoria multigrupo de energia	28
2.6 Produtos de fissão	29
2.7 Equações da cinética espacial	29
2.8 Problema da criticalidade	31
3 SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO DE NÊUTRONS ES- TACIONÁRIA	33
3.1 Formulação nodal para o problema estacionário	33
3.1.1 Proposta 1 para as aproximações das densidades de correntes	36

3.1.2	Proposta 2 para as aproximações das densidades de correntes	37
3.1.3	Proposta 3 para as aproximações das densidades de correntes	38
3.1.4	Proposta 4 para as aproximações das densidades de correntes	40
3.1.5	Proposta 5 para as aproximações das densidades de correntes	45
3.2	Método da Bissecção e da Secante	48
3.2.1	Método da Bissecção	53
3.2.2	Método da Secante	55
3.3	Método Iterativo de Fonte	59
3.4	Resultados para problemas da criticalidade	61
3.4.1	Problema Teste I	62
3.4.2	Problema Teste II	64
3.4.3	Problema Teste III	65
3.4.4	Problema Teste IV	70
3.4.5	Problema Teste V	73
3.4.6	Problema Teste VI	76
3.5	Conclusões sobre o problema da criticalidade	81
4	SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DA CINÉTICA ESPACIAL NA TEORIA DA DIFUSÃO DE NÊUTRONS	83
4.1	Formulação nodal para o problema da cinética	83
4.2	Uma solução analítica para o sistema global	93
4.3	Solução dos fluxos e dos precursores de forma desacoplada e iterativa	94
4.3.1	Formulação numérica para as equações dos fluxos	99
4.3.2	Formulação analítica para as equações dos fluxos	100
4.3.2.1	Aproximação constante para os termos fontes	101
4.3.2.2	Aproximação mista para os termos fontes	102

4.3.2.3	Aproximação quase analítica para os termos fontes	103
4.4	Exponencial matricial	106
4.4.1	Exponencial matricial por autovalores e autovetores	107
4.4.2	Exponencial matricial por aproximação de Padé	107
4.4.3	Exponencial matricial por Schur-Parlett	109
4.5	Resultados para problemas da cinética espacial	112
4.5.1	Problema Teste BSS-6	114
4.5.1.1	Comparação entre Euler Implícito Não Iterativo (EINI) e Euler Implícito Iterativo de Fonte (EIIF)	115
4.5.1.2	Análise da metodologia que utiliza a exponencial matricial via autovalores e autovetores	116
4.5.1.3	Comparação entre Euler Implícito Iterativo e exponencial matricial por Schur-Parlett	117
4.5.1.4	Comparação entre exponencial matricial via aproximação de Padé e via Schur-Parlett	119
4.5.2	Problema Teste Homogêneo Bidimensional	121
4.5.2.1	Comparação entre os resultados obtidos via sistema global e via sistemas iterativos de fonte	122
4.5.2.2	Comparação dos resultados obtidos via Euler Implícito Iterativo e via exponencial matricial	126
4.5.3	Problema Teste TWIGL	129
4.5.3.1	Perturbação instantânea	130
4.5.3.2	Perturbação em rampa	133
4.6	Conclusões sobre o problema da cinética espacial	138
5	ANÁLISE COMPARATIVA ENTRE AS TEORIAS DE TRANSPORTE E DE DIFUSÃO	140
5.1	Problema estacionário	141
5.2	Problema da cinética espacial	145

5.3	Conclusões sobre a comparação entre transporte e difusão . .	148
6	CONCLUSÕES	149
	Referências Bibliográficas	152

LISTA DE FIGURAS

2.1	Esquema da fissão nuclear.	27
2.2	Esquema multigrupo de energia.	28
3.1	Esquema representando as aproximações de cada interface.	47
3.2	Geometria do Problema Teste I.	62
3.3	Geometria do Problema Teste II.	64
3.4	Geometria do Problema Teste III.	65
3.5	Ilustração dos fluxos médios de nêutrons dos grupos rápido e térmico do Problema Teste III.	69
3.6	Geometria do Problema Teste IV.	70
3.7	Geometria do Problema Teste V.	74
3.8	Ilustração dos fluxos médios de nêutrons do grupo rápido do Problema Teste V.	76
3.9	Geometria do Problema Teste VI.	77
3.10	Ilustração dos fluxos do Problema Teste VI.	81
5.1	Geometria do Problema Teste 16-A1.	140
5.2	Fluxos escalares de nêutrons rápidos do Problema Teste 16-A1.	143
5.3	Fluxos escalares de nêutrons térmicos do Problema Teste 16-A1.	144
5.4	Erro dos fluxos escalares de nêutrons rápidos do Problema Teste 16-A1.	144
5.5	Erro dos fluxos escalares de nêutrons térmicos do Problema Teste 16-A1.	144
5.6	Fluxos escalares de nêutrons rápidos da perturbação do Problema Teste 16-A1.	146
5.7	Fluxos escalares de nêutrons térmicos da perturbação do Problema Teste 16-A1.	146

LISTA DE TABELAS

3.1	Quantidade de diagonais de blocos da matriz \mathbf{M}	48
3.2	Parâmetros nucleares para Problema Teste I.	62
3.3	Resultados do K para o Problema Teste I.	63
3.4	Parâmetros nucleares para Problema Teste II.	64
3.5	Resultados do K para o Problema Teste II.	65
3.6	Parâmetros nucleares para Problema Teste III.	66
3.7	Resultados do K para o Problema Teste III.	66
3.8	Frações de potência por região do Problema Teste III.	68
3.9	Fluxos médios de nêutrons dos grupos rápido e térmico do Problema Teste III.	69
3.10	Parâmetros nucleares para o Problema Teste IV.	71
3.11	Resultados do K para o Problema Teste IV.	71
3.12	Fluxos médios de nêutrons do grupo 1 do Problema Teste IV nos nodos $y \in [45,50]$	72
3.13	Fluxos médios de nêutrons do grupo 2 do Problema Teste IV nos nodos $y \in [45,50]$	73
3.14	Parâmetros nucleares para o Problema Teste V.	74
3.15	Dimensões das malhas (cm) para o Problema Teste V.	74
3.16	Resultados do K apresentados por Hébert (2008)[44].	75
3.17	Resultados do K para o Problema Teste V.	75
3.18	Parâmetros nucleares para o Problema Teste VI.	77
3.19	Dimensões das malhas (cm) para o Problema Teste VI.	78
3.20	Resultados do K para a comparação do Problema Teste VI.	78
3.21	Resultados do K para o Problema Teste VI.	78
3.22	Fluxos médios de nêutrons do grupo 1 do Problema Teste VI nos nodos $y \in [0,2]$	79

3.23	Fluxos médios de nêutrons do grupo 2 do Problema Teste VI nos nodos $y \in [0,2]$	80
4.1	Parâmetros nucleares para o Problema Teste BSS-6.	114
4.2	Potências do Problema Teste BSS-6 quando usamos $\Delta x = 2\text{cm}$ e as propostas sem e com iteração de fonte.	116
4.3	Potências do Problema Teste BSS-6 quando usamos a proposta AAFC-2.	117
4.4	Potências do Problema Teste BSS-6 quando usamos as propostas Euler Implícito Iterativo e Schur-Parlett.	118
4.5	Potências do Problema Teste BSS-6 quando utilizamos exponenciais matricial via Schur-Parlett e via aproximação de Padé.	120
4.6	Parâmetros nucleares para o Problema Teste Homogêneo Bidimensional.	121
4.7	Fluxos térmicos do Problema Teste Homogêneo Bidimensional quando usamos os sistemas globais e os sistemas iterativos resolvidos via exponenciais matriciais.	123
4.8	Fluxos térmicos do Problema Teste Homogêneo Bidimensional quando usamos os sistemas globais e os sistemas iterativos resolvidos via Euler Implícito.	125
4.9	Fluxos térmicos do Problema Teste Homogêneo Bidimensional para $\Delta x = \Delta y = 20\text{cm}$	127
4.10	Fluxos térmicos do Problema Teste Homogêneo Bidimensional para $\Delta x = \Delta y = 10\text{cm}$	128
4.11	Parâmetros nucleares para o Problema Teste TWIGL.	129
4.12	Potências do Problema Teste TWIGL com uma perturbação instantânea e domínio dividido em 100 nodos.	131
4.13	Potências do Problema Teste TWIGL com uma perturbação instantânea e domínio dividido em 400 nodos.	132
4.14	Potências do Problema Teste TWIGL com uma perturbação em rampa e domínio dividido em 100 nodos.	135
4.15	Potências do Problema Teste TWIGL com uma perturbação em rampa e domínio dividido em 400 nodos.	136

5.1	Domínio do Problema Teste 16-A1.	140
5.2	Parâmetros do Problema Teste 16-A1.	141
5.3	Resultados para o autovalor dominante K para o Problema Teste 16-A1 via difusão.	142
5.4	Parâmetros para cinética do Problema Teste 16-A1.	145
5.5	Comparação dos fluxos escalares do Problema Teste 16-A1 no tempo 0,01s.	147

LISTA DE SIGLAS

<i>AAFC-n</i>	Autovalor/Autovetor e Fontes Constantes com n valores de fluxos médios na aproximação das densidades de correntes nas interfaces
<i>APFC-n</i>	Aproximação de Padé e Fontes Constantes com n valores de fluxos médios na aproximação das densidades de correntes nas interfaces
<i>APFM-n</i>	Aproximação de Padé e Fontes Mistas com n valores de fluxos médios na aproximação das densidades de correntes nas interfaces
<i>APFQA-n</i>	Aproximação de Padé e Fontes Quase Analítica com n valores de fluxos médios na aproximação das densidades de correntes nas interfaces
<i>ECE</i>	Equação da Cinética Espacial
<i>ECE's</i>	Equações da Cinética Espacial
<i>ECP</i>	Equação da Cinética Pontual
<i>ECP's</i>	Equações da Cinética Pontual
<i>EDO</i>	Equação Diferencial Ordinária
<i>EDO's</i>	Equações Diferenciais Ordinárias
<i>EDP</i>	Equação Diferencial Parcial
<i>EDP's</i>	Equações Diferenciais Parciais
<i>EIIF-n</i>	Euler Implícito e Iterativo de Fonte com n valores de fluxos médios na aproximação das densidades de correntes nas interfaces
<i>EINI-n</i>	Euler Implícito Não Iterativo com n valores de fluxos médios na aproximação das densidades de correntes nas interfaces

<i>EISG-n</i>	Euler Implícito no Sistema Global com n valores de fluxos médios na aproximação das densidades de correntes nas interfaces
<i>GITT</i>	<i>Generalized Integral Transform Technique</i>
<i>LSODE</i>	<i>Livermore Solver for Ordinary Differential Equations</i>
<i>MCN</i>	Método de Colocação Nodal
<i>MDF</i>	Método de Diferenças Finitas
<i>MDFMG</i>	Método de Diferenças Finitas de Malha Grossa
<i>MNA</i>	Método Nodal Analítico
<i>SPFC-n</i>	Schur-Parlett e Fontes Constantes com n valores de fluxos médios na aproximação das densidades de correntes nas interfaces
<i>SPFM-n</i>	Schur-Parlett e Fontes Mistas com n valores de fluxos médios na aproximação das densidades de correntes nas interfaces
<i>SPFQA-n</i>	Schur-Parlett e Fontes Quase Analítica com n valores de fluxos médios na aproximação das densidades de correntes nas interfaces
<i>SPSG-n</i>	Schur-Parlett no Sistema Global com n valores de fluxos médios na aproximação das densidades de correntes nas interfaces

LISTA DE SÍMBOLOS

$C_p(\vec{u}, t)$	Concentração de precursores de nêutrons atrasados do grupo p na posição \vec{u} no tempo t , [cm^{-3}].
$\bar{C}_p^{(i,j)}(t)$	Concentração média de precursores de nêutrons atrasados do grupo p no nodo (i,j) no tempo t , [cm^{-3}].
$D(\vec{u}, t)$	Coefficiente de difusão na posição \vec{u} no tempo t , [cm].
$D_g^{(i,j)}$	Coefficiente de difusão do grupo g no nodo (i,j) , [cm].
E	Quantidade de energia que em média é gerada por fissão, [MeV].
g	Grupo de energia, no qual $g = 1, \dots, G$.
G	Número de grupos de energia.
$\mathbf{J}(\vec{u}, t)$	Densidade de corrente de nêutrons na posição \vec{u} no tempo t , [$\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$].
$\bar{J}_{gx}^{(i,j)}$	Densidade de corrente de nêutrons média na direção x do grupo g no nodo (i,j) , [$\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$].
$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}$	Densidade de corrente de nêutrons média na direção y do grupo g no nodo (i,j) , [$\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$].
K	Fator de multiplicação efetivo.
$n(\vec{u}, t)$	Densidade de nêutrons na posição \vec{u} no tempo t , [cm^{-3}].
p	Grupo de precursor, no qual $p = 1, \dots, P$.
P	Número de grupos de precursores.
\mathbb{P}	Potência, [W].
(i,j)	Nodo arbitrário.

N	Número de nodos.
$S_g^{ext}(\vec{u}, t)$	Fonte externa de nêutrons do grupo g na posição \vec{u} no tempo t , [$\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$].
t	Tempo, [s].
\vec{u}	Vetor posição (com componentes x , y e z).
v_g	Velocidade escalar característica do grupo g , [cm s^{-1}].
β	Fração de nêutrons atrasados.
β_p	Fração de nêutrons atrasados do grupo p dos precursores.
ϵ	Constante arbitrária que define o critério de parada.
λ_p	Constante de decaimento dos precursores de nêutrons atrasados do grupo p , [s^{-1}].
ν_g	Número médio de nêutrons liberados por fissão ocorrida no grupo g .
σ	Seção de choque microscópica, [cm^2].
Σ	Seção de choque macroscópica, [cm^{-1}].
$\Sigma_a(\vec{u}, E, t)$	Seção de choque macroscópica de absorção na posição \vec{u} na energia E e no tempo t , [cm^{-1}].
$\Sigma_{ag}(\vec{u}, t)$	Seção de choque macroscópica de absorção do grupo g na posição \vec{u} no tempo t , [cm^{-1}].
$\Sigma_{fg}(\vec{u}, t)$	Seção de choque macroscópica de fissão do grupo g na posição \vec{u} no tempo t , [cm^{-1}].
$\Sigma_{fg}^{(i,j)}$	Seção de choque macroscópica de fissão do grupo g no nodo (i, j) , [cm^{-1}].

$\Sigma_{sg'g}(\vec{u}, t)$	Seção de choque macroscópica de espalhamento do grupo g' para o grupo g na posição \vec{u} no tempo t , [cm^{-1}].
$\Sigma_{sg'g}^{(i,j)}$	Seção de choque macroscópica de espalhamento do grupo g' para o grupo g no nodo (i,j) , [cm^{-1}].
$\Sigma_{Rg}(\vec{u}, t)$	Seção de choque macroscópica de remoção do grupo g na posição \vec{u} no tempo t , [cm^{-1}].
$\Sigma_{Rg}^{(i,j)}$	Seção de choque macroscópica de remoção do grupo g no nodo (i,j) , [cm^{-1}].
Σ_{tg}	Seção de choque macroscópica total do grupo g , [cm^{-1}].
$\phi(\vec{u}, E, t)$	Fluxo escalar de nêutrons na posição \vec{u} na energia E e no tempo t , [$\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$].
$\phi_g(\vec{u}, t)$	Fluxo escalar de nêutrons do grupo g na posição \vec{u} no tempo t , [$\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$].
$\bar{\phi}_g^{(i,j)}(t)$	Fluxo escalar médio de nêutrons do grupo g no nodo (i,j) no tempo t , [$\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$].
$\bar{\phi}_g^{(i,j)}$	Fluxo escalar médio de nêutrons do grupo g no nodo (i,j) , [$\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$].
$\bar{\phi}_{gx}^{(i,j)}$	Fluxo escalar de nêutrons médio na direção x do grupo g no nodo (i,j) , [$\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$].
$\bar{\phi}_{gy}^{(i,j)}$	Fluxo escalar de nêutrons médio na direção y do grupo g no nodo (i,j) , [$\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$].
χ_g	Fração do espectro integrado de fissão do grupo g .
χ_g^p	Fração do espectro integrado de fissão dos nêutrons prontos do grupo g .
χ_g^d	Fração do espectro integrado de fissão dos nêutrons atrasados do grupo g .

RESUMO

Neste trabalho são apresentadas metodologias de solução para o problema estacionário e transiente da teoria da difusão de nêutrons multigrupo em geometria cartesiana em uma e duas dimensões. Em ambos os problemas, o domínio espacial é dividido em subintervalos (nodos) com propriedades constantes (meio homogêneo). Uma integração nodal é aplicada no modelo da difusão, obtendo variáveis médias em cada nodo: fluxos, concentrações de precursores e densidades de correntes. Essas densidades de correntes são aproximadas por cinco propostas, em função dos fluxos médios. No caso estacionário, esses procedimentos resultam em um problema algébrico de autovalor, para o qual são propostos três métodos de solução: Bisseção, Secante e Iterativo de Fonte. Como os métodos da Bisseção e da Secante fornecem apenas os autovalores, uma metodologia adicional é apresentada para a determinação dos respectivos autovetores. Para a solução do problema da cinética, é aplicada a mesma formulação nodal e aproximações das densidades de correntes, obtendo dois sistemas diferenciais na variável temporal, um para os fluxos e outro para os precursores, acoplados pelos termos fontes. Cada um desses dois sistemas é resolvido de forma desacoplada e iterativa, onde os termos fontes são atualizados a cada iteração. Para o sistema de equações diferenciais dos precursores, são desenvolvidas soluções analíticas e, para o sistema de equações diferenciais dos fluxos, são propostas tanto soluções numéricas como analíticas. Na proposta analítica para os fluxos, são apresentadas diferentes abordagens para a atualização do termo de fonte. Essas soluções analíticas dos fluxos estão associadas ao cálculo das exponenciais matriciais, para as quais são propostas três metodologias de solução: a primeira é a clássica, que decompõe a matriz em seus autovalores e seus autovetores correspondentes, a segunda é através das aproximações de Padé e a terceira é a partir da decomposição de Schur e do algoritmo de Parlett. Os resultados numéricos obtidos com as metodologias propostas são comparados a resultados presentes na literatura, mostrando satisfatória concordância. Foi observado, a partir da análise dos

resultados, que as aproximações mais convenientes para as densidades de correntes foram aquelas que utilizam as médias dos coeficientes de difusão; que o método da Secante para a determinação da criticalidade e a metodologia desacoplada e iterativa para os problemas da cinética apresentaram um excelente desempenho. Além disso, a solução analítica dos sistemas diferenciais dos fluxos se mostrou precisa, porém, em geral, demanda um maior custo computacional.

ABSTRACT

In this work, methodologies for the solution of one and two dimensional steady-state and transient multigroup neutron diffusion equations in Cartesian geometry are presented. In both problems, the spatial domain is divided into subintervals (nodes) with constant properties (homogeneous media). A nodal integration is applied to the diffusion model and average variables at each node are obtained: fluxes, precursor concentrations and current densities. The current densities are expressed in terms of the average fluxes through five different schemes. In the stationary case, these procedures result in an algebraic eigenvalue problem, to which three solution methods are proposed: Bisection, Secant and Source Iteration. As the Bisection and Secant methods provide only eigenvalues, an additional methodology to determine the respective eigenvectors is presented. To solve the kinetics problem, the same nodal formulation and approximations of current densities are applied, resulting in two differential systems in the temporal variable: one for the fluxes and another for the precursors. The systems are coupled by the source terms. Each of these two systems is resolved in an uncoupled and iterative form, where the source terms are updated in each iteration. For the system of differential equations related to the precursors, analytical solutions are developed and, for the system of differential equations related to the fluxes, both numerical and analytical solutions are proposed. In the analytical proposal for the fluxes, different approaches for updating the source term are presented. These analytical solutions for fluxes are associated with the calculation of matrix exponentials, for which three solution methodologies are proposed: the first is the classic, which decomposes the matrix into its eigenvalues and their corresponding eigenvectors, the second is through Padé approximations and the third is from Schur's decomposition and Parlett's algorithm. The numerical results obtained by the proposed methodologies are compared to the results found in the literature. In these comparisons it was observed an excellent performance of the approximations of the current densities that use the averages of

the diffusion coefficients, the Secant method for the determination of the criticality and the decoupled and iterative methodology for the kinetics problems. In addition, the analytical solution of the differential systems for the fluxes proved to be accurate, however, in general, it demands a higher computational cost.

1 INTRODUÇÃO

As usinas nucleares são importantes fontes geradoras de energia elétrica, que devem ser bem projetadas para serem rentáveis e seguras. Se faz necessário um amplo conhecimento de todo o processo de produção de energia para otimizar estes dois aspectos. Uma possibilidade para que as usinas sejam projetados com segurança e eficiência é construir instalações experimentais para cada projeto e realizar uma infinidade de experimentos, a fim de responder essas questões. No entanto, essa opção é absurdamente cara, de valor duvidoso e praticamente impossível [85]. Uma forma muito mais viável para determinar as questões de segurança e eficiência é o desenvolvimento de modelos teóricos, que sejam capazes de prever o comportamento das usinas. Semelhante a outros projetos de engenharia, estes modelos teóricos podem contribuir tanto na otimização da estrutura física das usinas, como na eficiência do processo operacional.

As atuais usinas nucleares produzem energia elétrica a partir de fontes térmicas, que são geradas pelo calor liberado nas fissões nucleares [33]. Nas usinas, este processo de fissão ocorre dentro dos reatores nucleares, onde estão presentes o material combustível (por exemplo, urânio), material refrigerante (por exemplo, água), material de controle (por exemplo, boro), entre outros. A fissão nuclear é o processo de divisão do núcleo de um átomo pesado (em geral o urânio) em pelo menos dois núcleos menores (fragmentos de fissão). Além destes núcleos menores, na fissão são emitidos raios gama, raios beta, neutrinos e novos nêutrons, seja no instante da fissão ou algum tempo depois, quando os fragmentos de fissão sofrem decaimento radioativo [55]. Esses novos nêutrons geram novas fissões, estabelecendo assim uma reação em cadeia, que é controlada por materiais absorvedores de nêutrons (boro). Portanto, prever o comportamento das usinas nucleares está diretamente relacionado a prever o comportamento da população de nêutrons presentes nos reatores.

O modelo que melhor descreve o comportamento da população de nêutrons em um reator nuclear é a equação de transporte de nêutrons [31]. Ela é uma versão linear da equação desenvolvida por Boltzmann para a teoria cinética dos gases [31]. A equação de transporte de nêutrons consiste em uma equação íntegro-diferencial com sete variáveis independentes: três variáveis espaciais, duas variáveis direcionais, uma variável energética e uma variável temporal. Entretanto, devido à dificuldade de se trabalhar com sua forma completa, vários outros modelos são construídos a partir de aproximações da equação de transporte de nêutrons [31, 55, 83].

Um desses modelos é a equação da difusão de nêutrons, que utiliza a aproximação da Lei de Fick [31, 83, 87]. Esta lei tem sua origem na química e é utilizada para descrever os fenômenos da difusão em líquidos e gases. Ela expressa a difusão da concentração de um soluto em um solvente estático das regiões de maior concentração para as regiões de menor concentração, no sentido oposto ao seu gradiente [55]. A difusividade da densidade de corrente de nêutrons é semelhante a do soluto, mas, infelizmente, o tratamento do transporte de nêutrons como processo da difusão tem validade limitada. A razão desta limitação é que na maioria dos processos da difusão as partículas difusas são caracterizadas por colisões muito frequentes que dão origem a trajetórias em zigue-zague muito irregulares [31, 55]. Entretanto, no caso dos nêutrons, a probabilidade de colisões nêutron-núcleo é bastante pequena, fazendo com que os nêutrons em geral percorram distâncias relativamente grandes entre as interações. Embora a teoria da difusão de nêutrons tenha validade limitada, ela é, contudo, amplamente utilizada por fornecer resultados satisfatórios para cálculos globais em física de reatores [31, 87]. Algumas correções são inseridas na teoria da difusão baseadas na teoria de transporte para obter resultados mais precisos, como, por exemplo, considerar as seções de choque constantes em regiões com propriedades materiais diferentes [87].

A teoria da difusão de nêutrons pode ser utilizada para investigar uma série de problemas relativos aos reatores nucleares, como, por exemplo, a criticali-

dade (estado estacionário) e a evolução temporal da população de nêutrons (cinética). O estudo da criticalidade é focado na análise da configuração física do reator, ou seja, a configuração do núcleo do reator onde estão presentes os elementos combustíveis, barras de controle, materiais moderadores, entre outros. A criticalidade estabelece a razão entre o número de nêutrons gerados em sucessivas reações de fissão e pode ser modelada pela equação da difusão de nêutrons estacionária. Nessa equação é inserido um parâmetro que estabelece o balanço entre as perdas e ganhos de nêutrons. Ficando assim definido um problema de autovalor, no qual o autovalor dominante é o que determina a criticalidade do reator.

A evolução temporal da população de nêutrons é modelada pelas equações da cinética, que descrevem essa população tanto nos momentos de ligar ou desligar o reator, como nas mudanças do nível de potência de um reator em funcionamento [31]. As equações da cinética são formadas por dois conjuntos de equações que são acoplados: um deles descreve os nêutrons emitidos pela fissão do material combustível, e o outro descreve os nêutrons emitidos através do decaimento dos produtos de fissão. Do ponto de vista matemático, essas equações são rígidas, pois possuem parâmetros com uma grande diferença em ordem de magnitude [87]. Isso ocorre pelo fato físico de que as constantes de decaimento dos precursores são muito menores que as constantes de tempo características da desaceleração dos nêutrons ou do processo de difusão dos nêutrons [80]. Mesmo representando menos de 1% da população de nêutrons de um reator, esses precursores são muito importantes, pois retardam a resposta do reator a uma perturbação do estado crítico, facilitando o controle do reator [87].

As equações da cinética na teoria da difusão de nêutrons se dividem em dois tipos: Equação da Cinética Pontual (ECP) e Equação da Cinética Espacial (ECE).

As ECP's são equações que dependem apenas da variável temporal, embora o nome seja um pouco inadequado, já que o modelo realmente não trata

o reator como um ponto, mas apenas assume que a forma do fluxo espacial não muda com o tempo [31]. O objetivo de resolver essa equação é analisar a variação temporal da amplitude do fluxo, além de uma previsão em tempo quase real da potência do reator [74]. A validade das ECP's está restrita à suposição de uma forma espacial constante, ou seja, que não varie com o tempo. Esta suposição é razoável para transientes causados por mudanças uniformes nas propriedades do reator ou para reatores com pequenas dimensões, mas é ruim para núcleos de reatores com dimensões muito grandes em que as variações temporais são causadas por alterações nas propriedades nucleares do reator [87, 95].

A ECE na teoria da difusão de nêutrons é a melhor aproximação para descrever a evolução da população de nêutrons em um reator nuclear, possibilitando uma avaliação mais precisa ao comparar com a ECP [95]. A maior vantagem se encontra em problemas representativos de núcleo com dimensão significativa, em que há variação local das seções de choque, mudando assim a forma do fluxo. Ao longo dos anos, um grande esforço foi dedicado para desenvolver métodos capazes solucionar as ECE's na teoria da difusão de nêutrons aliando precisão com rapidez aos resultados. A seguir, destacamos alguns métodos na sua ordem cronológica, juntamente com uma breve descrição de cada um deles.

Um dos primeiros métodos utilizados para resolver o problema da cinética espacial foi o Método de Diferenças Finitas (MDF). Com relação a esse método destacamos os trabalhos apresentados pelo grupo de pesquisa do professor Hansen (problema unidimensional [42, 43] e bidimensional [80]). Nestes trabalhos, o MDF é aplicado nas variáveis espaciais, discretizando as funções contínuas dos fluxos e dos precursores e aproximando o termo de fuga (derivada no espaço) das equações dos fluxos. Com a discretização espacial, é obtido um sistema de equações diferenciais ordinárias (EDO's) homogêneo de primeira ordem na variável tempo. Antes de resolver este sistema, os autores propõem uma transformação exponencial para reduzir o erro de truncamento do procedimento de integração no tempo. Esta trans-

formação consiste em supor que a variável original (vetor dos fluxos e precursores) pode ser escrita como uma função exponencial vezes uma nova variável com menor dependência do tempo. Por fim, nas equações com o melhoramento da transformação exponencial a referência [80] propõe aplicar os métodos de direções alternadas implícitos ou explícitos. Já as referências [42, 43] integram a equação resultante em pequenos intervalos de tempo produzindo um esquema implícito em todos os termos, exceto os que contêm a fissão e o espalhamento.

Alguns anos depois Buckner e Stewart (1976) [16] também usaram o artifício da transformação exponencial (transformação de frequência) em um domínio temporal subdividido em intervalos de tempos discretos. O objetivo desta transformação é desenvolver equações que tenham uma menor dependência do tempo em comparação as equações originais. No problema transformado foi aplicado o MDF para trás na variável temporal em ambas equações (fluxos e precursores). Desse modo, as novas equações dependem apenas das variáveis espaciais, nas quais foi aplicado o método dos volumes finitos. Associado a cada um dos elementos de volume, há um ponto de malha, centrado no volume. As equações diferenciais resultantes foram resolvidas iterativamente usando uma técnica sucessiva de relaxação de linha, técnica de inversão de blocos para a iteração interna e uma técnica de reequilíbrio de malha grossa com sobre-relaxação da fonte de fissão para a iteração externa.

No final da década de 70 foram desenvolvidas soluções para os problemas da difusão utilizando os métodos nodais com uma abordagem analítica (Método Nodal Analítico - MNA). Uma destas foi apresentada por Smith (1979) [85] que soluciona problemas multidimensionais com dois grupos de energia. O MNA consiste em discretizar o domínio espacial em nodos homogêneos (parâmetros constantes em cada nodo) e, a partir de integrações transversais, obter um conjunto de equações unidimensionais para cada variável espacial. Juntamente com a aproximação polinomial das correntes nos contornos de cada nodo (única aproximação do MNA),

as equações unidimensionais podem ser resolvidas analiticamente. Essas soluções analíticas são acopladas através da imposição das condições de contorno e de continuidade nas interfaces, assim obtendo um sistema acoplado de EDO's de primeira ordem no tempo. Para essas equações diferenciais, Smith [85] propôs o método Theta, que após um estudo de sensibilidade, concluiu que a melhor escolha para θ é $\theta = 1,0$ (Euler Implícito) para os termos dos fluxos e $\theta = 0,5$ (Crank-Nicolson) para os termos dos precursores.

Em 1980, Lawrence e Dorning [56] apresentaram um método baseado na integração espacial da equação da difusão sobre direções transversais a exemplo da ref. [85]. Nas equações unidimensionais em cada direção foram usadas as funções de Green para gerar um conjunto acoplado de equações integrais definidas sobre cada nodo. Essas equações integrais representam uma solução exata (local) para o conjunto acoplado de equações diferenciais unidimensionais obtidas pela integração espacial sobre direções transversais. As equações integrais foram aproximadas usando um procedimento residual ponderado aplicado dentro de cada nodo (fluxos e concentrações expandidos em polinômios quadráticos). As equações matriciais resultantes, quando resolvidas em conjunto com a forma linear da equação do balanço nodal, forneceram as relações adicionais necessárias entre as correntes parciais da interface e o fluxo no nodo.

No início da década de 90, Aviles, Sutton e Kelly (1991) [11] apresentaram uma adaptação do método Kaps-Rentrop [52] proposto por Sánchez [81] para a cinética pontual unidimensional. O conjunto de equações (fluxos e precursores) foi discretizado usando o MDF, na qual obtiveram um sistema de EDO's de primeira ordem homogêneo na variável tempo. O método Kaps-Rentrop foi desenvolvido a partir do método implícito generalizado de Runge-Kutta de quarta ordem, na qual foi incorporada uma solução de terceira ordem para chegar a uma estimativa do erro de truncamento. A maior contribuição de Aviles, Sutton e Kelly foi a adaptação do método Kaps-Rentrop para matrizes esparsas. Desta forma, a eficiência do

método Runge-Kutta foi aprimorada pela técnica de fatoração (decomposição LU) de blocos que explora a estrutura esparsa do sistema matricial resultante da forma discretizada.

Alguns anos depois, Verdú et al. (1995) [92] desenvolveram um método para o problema da cinética baseado no Método de Colocação Nodal (MCN) apresentado por Hébert [45] para problemas estacionários. Por este motivo é natural que o método de colocação nodal seja aplicado na variável espacial. Diferentemente do MNA que resolveu as equações unidimensionais integradas transversais, o MCN resolveu diretamente a equação da difusão multidimensional original. O MCN é baseado em expansões polinomiais de Legendre da solução em cada nodo e na imposição de condições de continuidade adequadas para os fluxos e correntes. Quando as expansões são substituídas nas equações da cinética, as novas variáveis são os coeficientes das expansões de Legendre. Após aplicar o MCN o problema se reduziu a um conjunto de equações de primeira ordem no tempo para os fluxos e para os precursores. A equação dos precursores foi integrada analiticamente para cada intervalo de tempo. Já para a equação dos fluxos, os autores propuseram uma transformação exponencial (transformação de frequência), em cada intervalo de tempo, para depois aplicar o método de Euler Implícito. Alguns anos mais tarde, esta metodologia foi reelaborada em dois métodos de segundo grau para resolver os sistemas lineares com mais celeridade [15]. Para acelerar a convergência dos métodos de segundo grau, foi proposto um método de projeção. Este método extrai soluções aproximadas de um espaço bidimensional, minimizando a norma dois do resíduo.

Em 1995, Nagaya e Kobayashi [68] utilizaram a ideia apresentada alguns anos antes [54] de que a solução das ECE's pode ser obtida usando as ECP's na teoria dos reatores acoplados, denominadas por equações da cinética multipontos. Estes multipontos foram obtidos a partir de uma formulação nodal. A novidade apresentada pelos autores é a aplicação do método quase-estático, em que o fluxo de nêutrons é fatorado em uma função amplitude de variação rápida que é obtida

resolvendo-se as ECP's em um curto intervalo de tempo e uma função de forma de variação lenta dependente do tempo, obtida através da resolução da equação da difusão estacionária com um grande intervalo de tempo. Para a resolução do problema estacionário os autores propuseram o MDF implícito.

Dois anos mais tarde, Inanc (1997) [50] propôs que os fluxos de nêutrons e os precursores fossem expandidos em polinômios de Legendre, na qual os coeficientes das expansões sejam incógnitas dependentes do tempo. Desta forma, as equações cinéticas foram reduzidas a um sistema de equações diferenciais no tempo, em que foi aplicado um processo de minimização do erro (resíduos) em cada nodo. Este processo (mínimos quadrados) resultou em um sistema acoplado de equações diferenciais de primeira ordem, que juntamente com as condições iniciais pôde ser integrado para determinar os valores dos coeficientes no intervalo de tempo determinado. O conjunto de equações diferenciais foi resolvido empregando o Solucionador Livermore de EDO's LSODE [48], que combina os recursos dos pacotes GEAR (lida com matriz jacobiana completa) e GEARB (lida com matriz jacobiana de banda).

Miró et al. (2002) [64] propuseram a aplicação de um método de colocação nodal inspirado nas referências [45, 92], que assume uma expansão truncada dos polinômios de Legendre. Esse método permite discretizar a parte espacial das equações, aproximando as equações iniciais por um conjunto de EDO's no tempo, cujos componentes são os coeficientes correspondentes das expansões para cada nodo, a cada etapa do tempo. Para a integração temporal do sistema resultante de equações diferenciais, foi suposto que a solução para a nova equação dos fluxo transiente seja expressa como uma combinação linear das autofunções dominantes de um problema auxiliar estacionário. Assim, foi obtido um novo sistema de equações diferenciais bem menor e homogêneo. Para resolver o sistema foi usado um método implícito de passo variável [49], devido à rigidez das equações diferenciais.

Em 2005, Lima [63] propôs uma discretização no espaço das ECE's pelo Método de Diferenças Finitas de Malha Grossa (MDFMG), que difere da metodolo-

gia clássica de diferenças finitas pelos acréscimo dos fatores de correção. O MDFMG está em conexão com o método de expansão nodal, uma vez que utiliza os fluxos médios e correntes médias nas faces dos nodos provindos das integrações transversais próprias dos métodos nodais. Após aplicar a discretização no espaço, Lima obteve um sistema de EDO's de primeira ordem no tempo tanto para a equação dos fluxos como para os precursores. Nestas equações o autor aplicou o método modal com base na teoria dos pseudo-harmônicos. A formulação modal e pseudo-harmônica consistiu em expandir os fluxos e as concentração de precursores em funções peso e autofunções associadas ao operador da fuga e remoção da equação da difusão estacionária. Esta formulação tornou o sistema de EDO's de primeira ordem mais simples. Para as equações diferenciais das concentrações de precursores foi proposta uma solução analítica, a partir de uma linearização o termo fonte. Com o objetivo de reduzir a dimensão e a rigidez do sistema, esta solução foi substituída no termo fonte das equações diferenciais dos fluxos. Por fim, essas equações dos fluxos de nêutrons foram resolvidas por meio do método de Crank-Nicolson ($\theta = 0,5$).

Em 2007, Aboanber e Hamada [2] resolveram as ECE's multidimensional utilizando uma discretização espacial pelo MDF. Nas equações resultantes foi aplicado o método Kaps-Rentrop [52] na variável tempo, que utiliza Runge-Kutta generalizado. No método de Runge-Kutta generalizado, os autores propuseram novos coeficientes de condições e investigaram as propriedades de estabilidade para este novo conjunto de coeficientes.

Em 2008, Corno et al. [26] apresentaram uma solução analítica para problemas da cinética espacial unidimensionais monoenergéticos em meio não homogêneo. Esse trabalho foi uma revisitação do seu trabalho de 1976 [25]. A proposta do trabalho de 2008 foi aplicar a transformada de Laplace na variável temporal, para obter um sistema de equações estacionárias no espaço transformado. Isto é devido à presença da variável de transformação complexa que permanece no sistema. Esse procedimento transforma a equação diferencial dos precursores em uma equação al-

g brica, que foi substituída na equação dos fluxos. As novas equações dos fluxos são EDO's de segunda ordem, que juntamente com as condições de contorno transformadas possuem soluções analíticas. Para a transformada inversa de Laplace, os autores utilizaram o teorema do resíduo, vista a ausência de uma fonte externa dependente do tempo, e caso houvesse, eles indicaram o uso do teorema da convolução nos termos dependentes do tempo.

Ceolin et al. (2009) [24] apresentaram uma proposta de solução analítica para a ECE unidimensional em geometria cartesiana aplicando a Técnica da Transformada Integral Generalizada (na língua inglesa GITT) na variável espacial e no sistema de EDO's resultantes no tempo a transformada de Laplace. A ideia principal da GITT é escrever o operador diferencial parcial como a soma de um operador autoadjunto associado ao problema de Sturm-Liouville auxiliar e um operador associado aos termos restantes. A solução do problema de Sturm-Liouville nos fornece uma base de autofunções ortogonais que permite escrever a solução como uma expansão em série em termos de autofunções. Nesse mesmo contexto, Petersen et al. (2011) [73] resolveram um problema tridimensional em meio homogêneo fazendo o uso da GITT no espaço e da decomposição recursiva de Adomian no tempo. Eles aplicaram a GITT na direção z , assim o problema original recaiu em um bidimensional similar ao já resolvido pelos autores [74]. O problema auxiliar na dimensão z fornece as autofunções e autovalores do operador diferencial de segunda ordem. A diferença do problema bidimensional transformado do problema bidimensional já resolvido pelos autores é a composição da diagonal da matriz do sistema matricial de EDO's na variável tempo. Que agora contém os autovalores do problema na dimensão z . Assim, foi dividida a matriz em uma soma de uma matriz diagonal mais a matriz contendo os termos restantes e reformularam o problema transformado em uma forma que pode ser resolvida com formalismo da decomposição recursiva de Adomian [4].

Quintero-Leyva (2010) [79] apresentou uma proposta de solução para o problema da cinética espacial baseado em algumas ideias desenvolvidas por ele para o problema da cinética pontual [78]. A primeira ideia é integrar as equações diferenciais das concentrações de precursores, escrevendo as concentrações como equações integrais no tempo, para depois substituir o resultado nas equações dos fluxos. Assim, obteve as equações íntegro-diferenciais para os fluxos, que foram integradas em cada nodo (formulação nodal). A segunda ideia foi usar uma aproximação polinomial progressiva na dependência temporal, na qual obteve um sistema de equações algébricas para determinar os coeficientes da expansão polinomial.

Lima, Silva e Alvim (2011) [62] desenvolveram uma metodologia para resolver o problema da cinética espacial unidimensional baseado em outros dois trabalhos [61, 92]. Os autores iniciaram o trabalho propondo uma discretização espacial das ECE's pelo MDF no esquema centrado na malha. Recaindo em um sistema matricial de EDO's de primeira ordem no tempo, tanto para fluxos como para os precursores. Esse novo sistema foi resolvido de forma semelhante ao apresentado por Verdú et al. (1995) [92], na qual as equações dos precursores foram resolvidas de forma analítica e as equações dos fluxos através do método de Euler Implícito, para cada passo de tempo. Usando os dois procedimentos chegaram a um sistema de equações lineares, que é reescrito em uma forma apropriada para aplicar a expansão em pseudo-harmônicos [61].

Nahla, Al-Malki e Rokaya (2012) [69] propuseram a aplicação do MDF nas equações da cinética, na qual obtiveram um sistema de EDO's não homogêneas no tempo (fluxos e precursores acoplados). Nessa discretização, as matrizes envolvidas foram consideradas constantes para pequenos intervalos de tempo. A solução geral da equação diferencial matricial contém uma função exponencial da matriz do coeficiente, que para determiná-la, os autores apresentaram duas técnicas numéricas. A primeira determinou a função exponencial da matriz através de uma série de potências, na qual os pesos são calculados a partir de um sistema linear que contém

os autovalores da matriz de coeficientes. O sistema foi resolvido pelo método de eliminação de Gauss. A segunda foi a técnica clássica de decompor a matriz de coeficientes nas matrizes dos autovalores e dos autovetores. Para isto assumiram que a matriz contivesse todos os autovalores distintos. Desta forma, a função exponencial de uma matriz cheia se reduziu a uma matriz diagonal.

Fernandes, Vilhena e Bodmann (2013) [36] propuseram uma solução para o problema da cinética em geometria cilíndrica em meio homogêneo utilizando a transformada finita de Hankel. A transformada de Hankel, juntamente com a identidade de Parseval, indicam uma base ortogonal natural que é conveniente para expandir as soluções do problema. O sistema de EDO's homogêneas no tempo, que surge após aplicar a transformada de Hankel, foi resolvido analiticamente, obtendo uma solução na forma exponencial matricial. Esta exponencial matricial foi resolvida utilizando a técnica da decomposição em autovalores e autovetores.

Hackemack e Pounders (2014) [41] apresentaram um método para estimar os tamanhos dos intervalos de tempo para as equações da cinética com parâmetros nucleares dependentes do tempo usando a análise do erro de truncamento local. Essa análise foi feita na aproximação das derivadas de primeira ordem no tempo pelo MDF, na qual o erro de truncamento foi expandido em uma série de Taylor. Desta forma, desprezando os termos $O(h^2)$ e superiores, pode-se expressar os tamanhos dos intervalos de tempo em função de uma tolerância desejada. Para realizar alguns experimentos numéricos, os autores rodaram um código que utilizava um método de expansão nodal na variável espacial. Alguns anos depois, Boffie e Pounders (2018) [14] propuseram um melhoramento nesta metodologia de passos adaptativos no tempo. Este melhoramento foi necessário pois em alguns casos testes foram observadas implicações na precisão e estabilidade da solução. Para isto, os autores propuseram duas melhorias: uma na estimativa da segunda derivada e outra no controle do erro de truncamento.

Ceolin et al. (2015) [23] apresentaram uma solução para o problema da cinética espacial unidimensional em meio heterogêneo expandindo os fluxos e precursores em séries de Taylor. Assim, os autores conseguiram obter uma solução do problema com um controle de erro (truncamento das séries de Taylor) e na forma de uma expressão analítica. A ideia principal está em expandir os fluxos e os precursores em séries de Taylor para cada nodo e intervalo de tempo. Os coeficientes das expansões foram encontrados através de um sistema algébrico formado pela substituição das expansões nas equações da cinética e nas condições de contorno e interface. Conforme a precisão desejada, o tamanho dos subdomínios e ordem polinomial foram ajustados. Em 2016, Schramm [82] generalizou essa metodologia para o modelo bidimensional.

Figueira (2015) [37] apresentou uma metodologia para a solução dos problemas da cinética espacial bidimensional com presença de uma fonte externa. O autor propôs uma discretização espacial através de uma integração nodal e, para as derivadas nos contornos, uma aproximação por diferenças finitas. No sistema diferencial resultante da discretização espacial, o autor aplicou o método de direções alternadas explícito não simétrico, pois possui melhores condições de estabilidade, sendo mais adequado para o tratamento dos transientes acionados por fontes externas.

Vidal-Ferrandiz et al. (2015) [93] propuseram uma discretização espacial pelo método de hp -elementos finitos de alta ordem para reatores com geometria retangular e hexagonal. O motivo da utilização deste método foi pela adaptatividade do refinamento da malha espacial (h -adaptatividade) e também do grau das expansões polinomiais (p -adaptatividade). Já para a variável temporal, o método de Euler Implícito foi usado na equação de fluxo e nas equações de precursores um esquema de diferenças finitas implícitas de um passo. Como a malha espacial pode mudar a cada passo no tempo, esse esquema requer uma interpolação polinomial das soluções. Para manter a precisão da solução, essa interpolação deve ser feita usando

polinômios de Lagrange do mesmo grau que o grau usado no método de elementos finitos.

Oliveira (2017) [70] propôs uma solução para problemas da cinética em geometria cilíndrica tridimensional. A ideia principal desta solução foi a aplicação da separação de variáveis múltiplas, na qual os fluxos e precursores podem ser expressos como o produto de funções espaciais por funções temporais. Além disto, a partir de uma análise o autor mostrou que os fluxos e concentrações de precursores dependem da mesma função espacial. Com isto, conseguiu determinar a solução do problema da cinética desacoplado, solucionando uma equação diferencial parcial (EDP) para as funções espaciais e uma sistema de EDO's para as funções temporais. A parte espacial também foi resolvida através da técnica de separação de variáveis e a parte temporal usando o princípio da superposição de soluções, considerando todas as separações de variáveis e os espectros associados.

Tavares (2018) [89] propôs uma solução para o problema da cinética unidimensional em meio homogêneo. A metodologia consistiu em resolver equação por equação na seguinte ordem: equações dos fluxos de maior energia para os de menor energia e, em seguida, as equações dos precursores independente da ordem. Nestas equações aplicou um método Iterativo de Fonte, na qual as fontes de cada equação são os termos que contém as incógnitas das outras equações (fluxos ou precursores). Com essa metodologia as equações ficaram todas desacopladas. Desta forma, o autor partiu de uma estimativa inicial para os fluxos e precursores dos termos fontes e a cada nova solução estas estimativas foram atualizadas. Para a solução de cada equação foi aplicada a transformada de Laplace no tempo e, nas EDO's do problema transformado, métodos clássicos para EDO's. Para a transformada inversa foi utilizado inversão numérica através do algoritmo de Stehfest. Os pontos da inversão numérica foram interpolados através do método dos mínimos quadrados em polinômios que atualizaram a estimativa inicial.

Tumelero et al. (2019) [91] apresentaram uma solução para o problema da cinética espacial unidimensional em meio homogêneo. Eles propuseram uma expansão em séries Taylor na variável espacial, na qual a dependência do tempo é incorporada nos coeficientes da série de Taylor truncada. Ao substituir as séries na equações da cinética obtiveram um sistemas EDO's no tempo de acordo com as potências dos polinômios. Para resolver esse sistema de equações acopladas, os autores usaram o método de decomposição de Adomian [4].

No trabalho de Carreño et al. (2019) [22], os autores propuseram o uso dos métodos modais nas ECE's, após serem discretizadas espacialmente pelo método de elementos finitos de alta ordem. Nas equações discretizadas foram aplicados os métodos modais, que são baseados na expansão do fluxo de nêutrons em termos das autofunções associadas ao problema estacionário e coeficientes de amplitude dependentes do tempo, que mudam conforme o tipo de modos (λ , α e γ). O novo sistema de equações diferenciais obtido pelos diferentes modos é bem menor que o sistema original (quando apenas discretizados no espaço). Esses sistemas continuam rígidos, portanto métodos implícitos foram necessários para obter soluções aproximadas.

Recentemente, Li, Chen e Hao (2020) [60] apresentaram um método ortogonal quase estático para as equações de cinética espacial em problemas cilíndricos homogêneos. Nesse trabalho, os fluxos de nêutrons e as concentrações de precursores são decompostos em funções temporais e espaciais. Além disto, é assumido que a forma espacial dos fluxos e das concentrações são semelhantes. Com estas duas premissas, as equações diferenciais podem ser separadas em relação ao tempo e ao espaço. No espaço, aplicam novamente a separação de variáveis (axial e radial), onde são obtidas soluções analíticas em séries para as duas direções. As equações temporais obtidas na decomposição são na forma da cinética pontual, que para reatividade degrau e linear, os autores seguem as soluções derivadas nos seus trabalhos [59] e [58], respectivamente. O destaque desta metodologia é a busca por

soluções analíticas, entretanto, apresentam a derivação apenas para um grupo tanto de energia como de precursor, além de ser para problemas homogêneos.

De modo geral, podemos separar os trabalhos apresentados acima em três grupos que são caracterizados pela forma em que buscam tratar o problema. O primeiro grupo é formado pelos métodos numéricos, em que tratam as variáveis espaciais e temporais na forma discreta. O segundo grupo são os métodos analíticos, que na maioria dos casos apresentados, aplicam transformadas integrais em ambas as variáveis que, no entanto, tornam a derivação complexa e, assim, resolvem apenas problemas mais simples como, por exemplo, problemas em meio homogêneo. Por fim, o terceiro grupo que chamamos de métodos híbridos, que combinam esquemas numéricos e analíticos ou também que usam expansões.

A contribuição desta tese está inserida no terceiro grupo. Propomos a utilização de um esquema nodal para tratamento da variável espacial, no qual o domínio é subdividido em nodos e, cada nodo, as equações são integradas. Na variável temporal, tratamos as equações diferenciais dos fluxos e das concentrações de precursores de forma desacoplada e iterativa. Essas equações são investigadas sob duas formas: analítica e numérica. A solução analítica do sistema de EDO's de primeira ordem no tempo está associada a avaliação de uma exponencial matricial. Essa exponencial matricial pode ser calculada de várias maneiras, devendo levar em conta a estabilidade numérica e eficiência computacional. No entanto, muitos autores apontam que nenhum método é completamente satisfatório para matrizes em geral [10, 66, 71]. Cada tipo de matriz merece uma análise detalhada sobre qual método é o mais indicado. A seguir apresentamos uma revisão de alguns métodos para a avaliação destas exponenciais.

Em 1976, Parlett [72] apresentou uma fórmula de recorrência para determinar funções analíticas de matrizes triangulares, sem a necessidade de inverter matrizes. Entre as funções analíticas estão as exponenciais que são de nosso interesse. Parlett construiu a fórmula de recorrência a partir de dois lemas. Um

lema estabelece que funções analíticas de matrizes triangulares superiores em blocos também são triangulares superiores em blocos e mantém mesma estrutura. O segundo lema estabelece que se uma função analítica de matrizes quadradas \mathbf{B} for bem definida, então ela comuta com \mathbf{B} .

Um ano mais tarde, Ward (1977) [94] apresentou e analisou um algoritmo para calcular o exponencial matricial utilizando as aproximações de Padé e técnicas para reduzir a norma da matriz (conhecida como *scaling and squaring*). Essa técnica é usada pois o erro na aproximação da exponencial pelas aproximações de Padé aumenta à medida que a norma da matriz aumenta.

Em 1978, Moler e Van Loan [65] apresentaram dezenove maneiras para calcular o exponencial de uma matriz e vinte e cinco anos mais tarde fizeram uma atualização desse trabalho [66]. Dentre estas dezenove maneiras, eles destacam como “melhores” os métodos que utilizam séries de potências aliados com o *scaling and squaring* e os métodos que utilizam decomposições de matrizes, em especial, a decomposição de Schur.

Parlett e Ng (1985) [71] desenvolveram um algoritmo preciso para tomar a exponencial de matrizes cheias. O algoritmo proposto inicia com a decomposição de Schur, através do algoritmo QR que é estável, pois o processo usa apenas transformações unitárias de similaridade. Após a decomposição de Schur, os autores propuseram aplicar a fórmula de recorrência [72] na matriz triangular superior.

Arioli, Codenotti e Fassino em 1996 [10] fizeram uma análise do erro de arredondamento introduzido pelo método de Padé no cálculo da exponencial de uma matriz real. Eles concluíram que o método de Padé é estável para algumas classes de matrizes como: matrizes essencialmente não-negativas, matrizes normais e matrizes \mathbf{A} tais que $\mathbf{A} = \mathbf{D}\mathbf{B}\mathbf{D}^{-1}$, onde \mathbf{D} é uma matriz diagonal e \mathbf{B} é essencialmente não-negativa. Além disso, os autores apontam que, para matrizes altamente não

normais, durante o processo de *squaring* pode ocorrer cancelamentos sendo estes a única fonte real de instabilidade do método de Padé.

Bergamaschi e Vianello (1999) [13] propuseram uma implementação do método das séries de Chebyshev para o operador exponencial para matrizes grandes, esparsas e simétricas. O interesse dos autores por esse tipo especial de matrizes é pelo fato que elas surgem ao discretizar EDP's espacialmente pelos métodos de diferenças finitas e elementos finitos. Na aproximação do intervalo espectral, os autores utilizaram o método de Lanczos e uma técnica baseada no quociente de Rayleigh.

Dieci e Papini (2000) [29] apresentaram uma metodologia para determinar a exponencial de matrizes triangulares em bloco utilizando a aproximação de Padé. As principais contribuições do trabalho foram novas estimativas de erro para a aproximação Padé. Além disso, essas novas estimativas indicaram que não é necessário aplicar o chamado *scaling and squaring* com base na matriz completa, mas apenas com base nos blocos da diagonal, evitando o *overscaling*.

Davies e Higham (2003) [28] propuseram um algoritmo para computar funções matriciais usando decomposição de Schur e recorrência de Parlett. A novidade apresentada pelos autores foi a reorganização da matriz triangular de blocos e a determinação dos blocos diagonais não triviais através de uma série de Taylor. Essas duas técnicas devem ser aplicadas após a decomposição de Schur, mas antes da recorrência de Parlett.

Druskin (2008) [30] provou a redução estritamente monótona do erro na norma euclidiana da aproximação da solução de um sistema de EDO's homogêneo pelo método espectral de decomposição de Lanczos. Esse método é baseado na aproximação do subespaço de Krylov. Esta prova se deu para exponencial de matrizes tridiagonais oriundas, por exemplo, da aproximação de diferenças finitas de equações elípticas unidimensionais.

Em 2009, Al-Mohy e Higham [5] derivaram uma nova versão do algoritmo apresentado na ref. [47] para determinar a exponencial de matriz. Ambos algoritmos utilizam a aproximação de Padé e a técnica de *scaling and squaring*. Basicamente duas novidades foram propostas pelos autores, uma foi para matrizes triangulares, na qual os elementos da diagonal são recalculados separadamente. A outra novidade foi para matrizes completas, na qual introduziram uma nova maneira de aprimorar os limites do erro de truncamento, assim suavizando o problema de *overscaling*.

Pusa e Leppänen (2010) [77] propuseram o método de aproximação racional de Chebyshev para determinar a exponencial da matriz vindas das equações de queima. Os autores escolheram esse método, pois, segundo eles, é o método mais indicado para esse tipo de problema por causa dos seus autovalores. Dependendo das configurações do problema, os autovalores podem ser reais ou complexos, neste último caso, uma grande variação na magnitude das partes imaginárias dos autovalores.

Em 2011, Moore [67] propôs que as exponenciais de matriz sejam determinadas através da expansões de polinômios ortogonais de Chebyshev, Legendre ou Laguerre. Segundo o autor, os coeficientes dessas expansões tendem a zero à medida que as expansões convergem, evitando trabalhar explicitamente com altas potências da matriz. Além disso, indicou melhorias para obter uma aproximação precisa com uma expansão de menor grau e mais rapidamente, como por exemplo, agrupando os autovalores em blocos diagonais e acelerando usando *shifting e scaling*.

Al-Mohy e Higham (2011) [6] propuseram um algoritmo para calcular $e^{\mathbf{A}\mathbf{B}}$ sem formar explicitamente $e^{\mathbf{A}}$. Além de determinar uma única solução $e^{t\mathbf{A}\mathbf{B}}$, ele pode fornecer uma sequência $e^{t_k\mathbf{A}\mathbf{B}}$ em intervalos de tempo igualmente espaçado. Na construção desse algoritmo, os autores utilizaram o método *scaling and squaring* junto com uma aproximação truncada da série de Taylor, inspirado na análise que fizeram alguns anos antes [5]. Uma segunda contribuição desse trabalho foi a solução

numérica de sistemas de EDO's não lineares por integradores exponenciais. Eles integraram a parte linear do sistema de forma exata e aproximaram a parte não linear utilizando um conjunto de funções relacionadas à exponencial. Recentemente Fischer (2014, 2017) [38, 39] publicou dois trabalhos em que apresenta uma análise da estabilidade [38] e uma estimativa do erro de arredondamento da solução [39] deste método.

Talvez um dos métodos mais recentes (2004) para determinar a exponencial matricial seja o método Leja [18, 19, 20]. Nesse método a aproximação de $e^{\mathbf{A}}$ é baseada na interpolação polinomial nos pontos de uma sequência Leja. A sequência dos pontos Leja é determinada em um intervalo governado pelo espectro de \mathbf{A} com o auxílio do teorema do disco de Gershgorin. A escolha do intervalo de interpolação, da posição e do número de pontos de interpolação influenciam diretamente no erro da interpolação e no custo computacional [20]. Caliari et al. (2014) [20] fizeram comparações numéricas entre o método Leja e os métodos que utilizam o subespaço Krylov, séries de Taylor e polinômios de Chebychev. Eles concluíram que, para problemas rígidos com passo de tempo não muito pequeno, há uma clara vantagem dos métodos que expandem em série de Taylor e o método Leja.

Com este pequeno referencial percebemos que existem diversos métodos para determinar as exponenciais matriciais. Entretanto, conforme já mencionamos, em cada tipo de problema devemos analisar qual é o método mais indicado. A fim de estabelecer comparações, nesta tese propomos implementar a solução clássica para exponenciais matriciais, que é através da decomposição da matriz em seus autovalores e autovetores correspondentes. Escolhemos também implementar a aproximação de Padé, pois ela já foi aplicada na cinética espacial pela ref. [1], porém para os sistemas dos fluxos e dos precursores acoplados. Além disso, a ref. [1] não aplica a técnica *scaling and squaring*. Por fim, escolhemos o método Schur-Parlett [28], pois não encontramos na literatura sua aplicação em problemas da cinética espacial

e por ser apontado como um dos melhores métodos juntamente com os métodos que utilizam séries de potência [66], como por exemplo, a aproximação de Padé.

1.1 Objetivo geral

O objetivo geral dessa tese é o desenvolvimento de soluções para problemas estacionários e transientes da teoria da difusão de nêutrons considerando: teoria multigrupo de energia; geometria cartesiana, meio material homogêneo e heterogêneo e P grupos de precursores de nêutrons atrasados.

1.1.1 Objetivos específicos

- Propor uma metodologia adequada para a resolução de problemas estacionários de caráter geral, ou seja, que não esteja restrita nem pelas características geométricas nem materiais. Além disto, que possa ser aplicada na variável espacial nos problemas da cinética.
- Desenvolver soluções para as equações cinética espacial discretizadas na variável espacial, a fim de obter uma solução eficiente, do ponto de vista computacional, e precisa.
- Propor uma metodologia capaz de determinar a exponencial matricial, proveniente do problema da cinética espacial, de forma estável, precisa e rápida.

As principais contribuições que trazemos nesta tese são: a proposta de aproximação das densidades de correntes pelas médias dos coeficientes de difusão, a abordagem que utiliza o método da Secante para o problema de autovalor dominante, a metodologia iterativa de fonte para o problema da cinética espacial e a aplicação do método de Schur-Parlett para a exponencial matricial nos problemas da cinética espacial.

O texto deste trabalho está organizado da seguinte maneira: no Capítulo 2 descrevemos alguns dos principais conceitos que estão relacionados às equações da difusão de nêutrons e, em seguida, apresentamos essas equações tanto no estado estacionário como dependente do tempo. No Capítulo 3, propomos uma solução para o problema da difusão de nêutrons estacionária. A partir de uma formulação nodal e de algumas propostas de aproximação das densidades de corrente nas interfaces dos nodos, obtemos um problema algébrico de autovalor. Para a solução desse problema de autovalor, propomos três métodos: Bissecção, Secante e Iterativo de Fonte. Após isto, diversos problemas teste são resolvidos a fim de analisar a metodologia proposta.

No Capítulo 4, apresentamos algumas propostas de solução das equações da cinética espacial. A dependência espacial dessas equações é tratada de forma análoga ao problema estacionário (Capítulo 3), assim, obtemos um sistema de equações apenas dependentes do tempo. A fim de suavizar a rigidez e diminuir a dimensão, resolvemos os sistemas de equações dos fluxos e das concentrações de precursores de forma desacoplada. A partir de uma estimativa inicial para o termo fonte dos precursores, os sistemas são resolvidos de forma iterativa, nas quais os termos fontes são atualizados a cada iteração. Para o sistema de equações dos precursores, propomos soluções analíticas e, para o sistema de equações dos fluxos, propomos tanto soluções numéricas e como analíticas. A proposta analítica, para o sistema dos fluxos, é subdividida em sub-propostas, de acordo com a forma de atualização dos termos fontes. Além disto, essas soluções analíticas dos fluxos estão associadas ao cálculo de uma exponencial matricial. Assim, propomos três métodos: o primeiro é o método clássico em que decompõe a matriz em seus autovalores e seus autovetores correspondentes, o segundo é o método que utiliza a aproximação de Padé e o terceiro é a partir da decomposição de Schur e do algoritmo de Parlett.

No Capítulo 5, propomos um estudo comparativo entre os resultados obtidos via teoria de transporte e teoria da difusão, tanto para o problema estacio-

nário como da cinética espacial. Por fim, no Capítulo 6, apresentamos as conclusões sobre o estudo realizado nesta tese de doutorado e algumas propostas de continuidade.

2 MODELO FÍSICO-MATEMÁTICO DA TEORIA DA DIFUSÃO DE NÊUTRONS

Neste capítulo, apresentamos um modelo físico-matemático que descreve de forma aproximada a evolução da população de nêutrons em um reator nuclear. O modelo que adotamos nesta tese provém da teoria da difusão de nêutrons, ou seja, as equações da difusão de nêutrons. Antes de apresentarmos o modelo, descreveremos alguns conceitos que estão relacionados a esta teoria.

2.1 Fluxo escalar de nêutrons

O fluxo escalar de nêutrons, $\phi(\vec{u}, t)$ [$\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$], pode ser definido como o número de nêutrons que cruzam a área de uma seção transversal arbitrária, por unidade de área e por unidade de tempo. Ele é dado ao multiplicar a densidade de nêutrons, $n(\vec{u}, t)$ [cm^{-3}], pela velocidade dos nêutrons, v [cm s^{-1}], logo

$$\phi(\vec{u}, t) = n(\vec{u}, t)v, \quad (2.1)$$

onde \vec{u} é o vetor posição (com componentes x , y e z) e t é a variável tempo.

2.2 Aproximação pela lei de Fick

Na formulação do problema de transporte de nêutrons a partir de um volume arbitrário, temos um termo que representa os nêutrons que escapam pelo contorno do volume. Este termo é expresso pelo vetor densidade de corrente \mathbf{J} [55]. Uma relação entre o fluxo e a corrente pode ser estabelecida pela lei de Fick, usada originariamente para descrever fenômenos de difusão em líquidos e gases. O uso da

lei de Fick na simplificação da equação de transporte de nêutrons nos leva à sua aproximação, que é a equação da difusão [55]. Essa lei é expressa pela seguinte forma:

$$\mathbf{J}(\vec{u},t) = -D(\vec{u},t)\nabla\phi(\vec{u},t), \quad (2.2)$$

onde $D(\vec{u},t)$ representa o coeficiente de difusão. Entretanto, esta aproximação possui algumas restrições, como por exemplo, não se aplicar próximo aos contornos e às fontes e em meios fortemente absorvedores. Embora contenha estas limitações, a aproximação por difusão é amplamente utilizada por fornecer resultados satisfatórios para cálculos globais em física de reatores [31].

2.3 Seção de choque macroscópica

A seção de choque é uma medida probabilística da ocorrência de interação entre os nêutrons e os núcleos-alvos. A área que cada núcleo oferece para a interação com os nêutrons é chamada de seção de choque microscópica. Na teoria da difusão simbolizada pela letra grega minúscula σ , [cm^2]. A área total oferecida por todos os núcleos contidos em uma unidade de volume representa a seção de choque macroscópica, simbolizada pela letra grega maiúscula Σ , [cm^{-1}] [55, 87].

2.4 Fissão nuclear

O processo de fissão nuclear ocorre quando um átomo em equilíbrio absorve em seu núcleo um nêutron, tornando o núcleo instável (começa a vibrar). A amplitude destas vibrações pode ser tamanha que causa o rompimento gerando dois ou mais núcleos menores. Este rompimento do núcleo é chamado de fissão nuclear. Por exemplo, na fissão térmica do Urânio-235, juntamente com os núcleos menores

são emitidos, em média, de dois a três novos nêutrons e liberado aproximadamente 200MeV de energia [57], conforme esquema da Figura 2.1. Essa energia liberada é na forma de energia cinética dos núcleos menores, dos novos nêutrons e dos raios gama, bem como das partículas beta, raios gama e neutrinos emitidos conforme os núcleos menores sofrem decaimento radioativo [57]. Esses nêutrons emitidos diretamente da reação de fissão nuclear são chamados de nêutrons prontos.

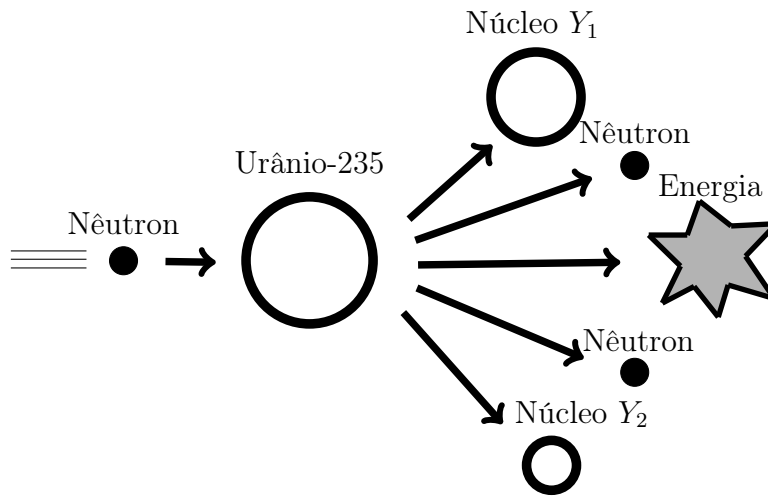
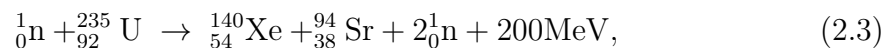


Figura 2.1: Esquema da fissão nuclear.

Um exemplo típico da reação de fissão do Urânio-235 [57] é da forma



onde Xe é o elemento químico Xenônio e Sr é o elemento Estrôncio. Nas usinas nucleares, a energia cinética dos elementos oriundos da fissão é dissipada em calor quase que instantaneamente, à medida que esses elementos interagem com o meio circundante [57]. E esse calor é convertido em energia elétrica através de uma série de processos, que dependem da tipo de reator [57, 87].

2.5 Teoria multigrupo de energia

Nos reatores nucleares podemos encontrar nêutrons com energia cinética que varia de 10MeV a menos de 0,01eV (cerca de nove ordens de magnitude) [31]. Em geral, os nêutrons gerados pelas fissões nucleares nascem em uma alta faixa de energia e sofrem uma série de colisões antes de serem absorvidos [57]. Ao colidirem nos núcleos atômicos, os nêutrons que não são absorvidos são espalhados. O espalhamento pode ser elástico, quando há conservação do momento e da energia cinética, ou pode ser inelástico, quando o nêutron troca parte da sua energia com núcleo. Em uma colisão inelástica o momento é conservado, porém a energia cinética não [57]. Nas trocas de energia, os nêutrons podem ganhar energia ou perder energia, fenômenos conhecidos como *up-scattering* e *down-scattering*, respectivamente. Como as seções de choque dependem da energia, exige-se um tratamento preciso da dependência energética dos nêutrons. Um destes tratamentos é abordado na teoria multigrupo, que consiste em tratar a variável energética como uma variável discreta por grupos de energia [31]. Ou seja, dividir o domínio energético em G grupos de energia, conforme a Figura 2.2.

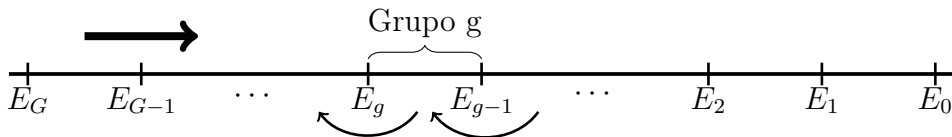


Figura 2.2: Esquema multigrupo de energia.

Na Figura 2.2, a seta acima do eixo indica o sentido decrescente da numeração dos grupos de energia e as setas abaixo (tipo arco) indicam o sentido migratório típico de perda de energia no processo de moderação dos nêutrons rápidos, ou seja, das maiores energias para as menores. Após dividirmos o domínio energético em faixas de energia, definimos os fluxos e as seções de choque a partir da integração da variável energia em cada uma destas faixas. Desta forma, definimos o fluxo escalar de nêutrons do grupo g como

$$\phi_g(\vec{u}, t) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi(\vec{u}, E, t) dE. \quad (2.4)$$

Em seguida, definimos a seção de choque macroscópica de absorção do grupo g como

$$\Sigma_{ag}(\vec{u}, t) = \frac{1}{\phi_g(\vec{u}, t)} \int_{E_g}^{E_{g-1}} \Sigma_a(\vec{u}, E, t) \phi(\vec{u}, E, t) dE, \quad (2.5)$$

onde $\Sigma_{ag}(\vec{u}, t)$ é dada em $[\text{cm}^{-1}]$. As demais definições e detalhamentos podem ser encontrados no Cap. 7 da ref. [31].

2.6 Produtos de fissão

Os fragmentos do átomo fissionado também são conhecidos como produtos de fissão. Esses fragmentos são núcleos menores instáveis, pois possuem uma grande proporção de nêutrons em comparação aos prótons no núcleo atômico [57]. Ao buscar a estabilidade decaem emitindo predominantemente raios betas e gamas, porém uma pequena parte desses fragmentos decaem emitindo novos nêutrons [57]. Portanto, a emissão destes novos nêutrons ocorre com um certo atraso ao se comparar com os emitidos na fissão, constituindo assim os nêutrons “atrasados”. Estes núcleos menores que decaem emitindo nêutrons são chamados precursores de nêutrons atrasados, que são reunidos (concentrados) em grupos de precursores [57]. Os grupos de precursores são caracterizados por faixas de meia-vida, ou seja, a meia vida dos precursores de nêutrons atrasados determina a qual grupo pertence.

2.7 Equações da cinética espacial

A variação da população de nêutrons em um reator nuclear é dada pela diferença entre a produção e a perda de nêutrons [31]. Como produção temos

os nêutrons nascidos por fissão, por espalhamento (para dentro do grupo), pelo decaimento dos precursores e pela presença de uma fonte externa. Como perda temos os nêutrons que escapam pelo contorno e os que são removidos pela absorção e pelo espalhamento (para fora do grupo). Na teoria da difusão de nêutrons as equações que descrevem essa variação são as equações da cinética espacial [31, 87] dadas por

$$\begin{aligned}
\frac{1}{v_g} \frac{\partial \phi_g(\vec{u}, t)}{\partial t} &= -\nabla \cdot \left(-D_g(\vec{u}, t) \nabla \phi_g(\vec{u}, t) \right) - \Sigma_{Rg}(\vec{u}, t) \phi_g(\vec{u}, t) \\
&\quad + (1 - \beta) \chi_g^p \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'}(\vec{u}, t) \phi_{g'}(\vec{u}, t) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{sg'g}(\vec{u}, t) \phi_{g'}(\vec{u}, t) \\
&\quad + \chi_g^d \sum_{p=1}^P \lambda_p C_p(\vec{u}, t) + S_g^{ext}(\vec{u}, t), \\
\frac{\partial C_p(\vec{u}, t)}{\partial t} &= -\lambda_p C_p(\vec{u}, t) + \beta_p \sum_{g=1}^G \nu_g \Sigma_{fg}(\vec{u}, t) \phi_g(\vec{u}, t),
\end{aligned} \tag{2.6}$$

onde:

g são os grupos de energia, em que $g = 1, \dots, G$;

p são os grupos de precursores de nêutrons retardados, em que $p = 1, \dots, P$;

ϕ_g é o fluxo de nêutrons do grupo g , [$\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$];

C_p é a concentração de precursores de nêutrons atrasados do grupo p , [cm^{-3}];

v_g é a velocidade dos nêutrons do grupo g , [cm s^{-1}];

D_g é o coeficiente de difusão do grupo g , [cm];

Σ_{Rg} é a seção de choque macroscópica de remoção do grupo g , [cm^{-1}];

χ_g^p é a fração do espectro integrado de fissão dos nêutrons prontos no grupo g ;

χ_g^d é a fração do espectro integrado de fissão dos nêutrons atrasados no grupo g ;

ν_g é o número médio de nêutrons liberado por fissão ocorrida no grupo g ;

Σ_{fg} é a seção de choque macroscópica de fissão do grupo g , [cm^{-1}];

$\Sigma_{sg'g}$ é a seção de choque macroscópica de espalhamento do grupo g' para o g , [cm^{-1}];

S_g^{ext} é a fonte externa de nêutrons do grupo g , [$\text{cm}^{-3} \text{s}^{-1}$];

β é a fração de nêutrons atrasados;

β_p é a fração de nêutrons atrasados do grupo p dos precursores;

λ_p é a constante de decaimento dos precursores de nêutrons atrasados do grupo p , $[\text{s}^{-1}]$.

A seção de choque macroscópica de remoção é a soma da seção de choque macroscópica de absorção e das seções de choque macroscópica de espalhamento para fora, dada por

$$\Sigma_{Rg}(\vec{u}, t) = \Sigma_{ag}(\vec{u}, t) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{sgg'}(\vec{u}, t). \quad (2.7)$$

Outro tópico muito importante em física de reatores é determinar a composição material e geométrica dos núcleos dos reatores nucleares [31]. Nesse estudo é muito comum utilizar a equação da difusão de nêutrons no estado estacionário. Essa equação determina a criticalidade do reator.

2.8 Problema da criticalidade

A equação da difusão de nêutrons no estado estacionário sem uma fonte externa é dada da seguinte forma [31]

$$\nabla \cdot \left(-D_g(\vec{u}) \nabla \phi_g(\vec{u}) \right) + \Sigma_{Rg}(\vec{u}) \phi_g(\vec{u}) = \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'}(\vec{u}) \phi_{g'}(\vec{u}) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{sg'g}(\vec{u}) \phi_{g'}(\vec{u}). \quad (2.8)$$

A menos que as configurações geométrica e material do núcleo do reator tenham uma combinação exata para que as perdas e os ganhos de nêutrons

sejam iguais, essa equação não tem uma solução em geral. A fim de superar esse problema, um parâmetro arbitrário K (autovalor) é introduzido nessa equação para que tenhamos sempre uma solução [31]. Este parâmetro K estabelece a relação de equilíbrio entre as perdas e os ganhos de nêutrons em sucessivas gerações de fissão. Desta maneira, a equação (2.8) acrescida do autovalor K é escrita como

$$\nabla \cdot \left(-D_g(\vec{u}) \nabla \phi_g(\vec{u}) \right) + \Sigma_{Rg}(\vec{u}) \phi_g(\vec{u}) = \frac{\chi_g}{K} \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'}(\vec{u}) \phi_{g'}(\vec{u}) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{sg'g}(\vec{u}) \phi_{g'}(\vec{u}), \quad (2.9)$$

onde K é chamado de fator de multiplicação efetivo. Entre os possíveis autovalores, apenas o autovalor dominante possui valor relevante para os cálculos globais de reatores nucleares. Esse autovalor dominante descreve a criticalidade do reator: subcrítico se $K < 1$, crítico se $K = 1$ e supercrítico se $K > 1$.

3 SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DA DIFUSÃO DE NÊUTRONS ESTACIONÁRIA

Neste capítulo, desenvolvemos uma metodologia de solução para o problema da criticalidade na teoria de difusão de nêutrons em geometria bidimensional. Essa metodologia é baseada em uma integração nodal da equação da difusão de nêutrons estacionária, onde obtemos variáveis médias definidas em cada nodo do domínio. Uma dessas variáveis é a densidade de corrente nas interfaces dos nodos, em que apresentamos diferentes propostas de aproximação. No problema de autovalor resultante da integração nodal e da aproximação das densidades de corrente, propomos três métodos para determinar os fluxos (autovetor) e o fator de multiplicação efetivo (autovalor dominante). A fim de verificar a metodologia proposta, apresentamos também resultados numéricos para problemas testes presentes na literatura.

3.1 Formulação nodal para o problema estacionário

A equação da difusão de nêutrons estacionária, Eq. (2.9), para o caso bidimensional em geometria cartesiana no domínio Ω contido em \mathbb{R}^2 é escrita como

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(-D_g(x,y) \frac{\partial}{\partial x} \phi_g(x,y) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(-D_g(x,y) \frac{\partial}{\partial y} \phi_g(x,y) \right) + \Sigma_{Rg}(x,y) \phi_g(x,y) = \frac{\chi_g}{K} \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'}(x,y) \phi_{g'}(x,y) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{sg'g}(x,y) \phi_{g'}(x,y), \quad (3.1)$$

onde $(x,y) \in \Omega$, $g = 1, \dots, G$ são os grupos de energia e os parâmetros seguem as definições dadas no Capítulo 2. As condições de contorno mais usuais para o sistema

de equações (3.1) são do tipo de Dirichlet, Neumann ou Robin, que são escritas na forma

$$a_g \phi_g(x,y) \Big|_{n_c} + b_g \frac{\partial}{\partial n} \phi_g(x,y) \Big|_{n_c} = 0, \quad (3.2)$$

onde $(x,y) \in \partial\Omega$, n depende do contorno, pode ser x ou y , n_c é o valor da variável n no contorno e $|a_g| + |b_g| > 0$ para a_g e b_g constantes reais. Além das condições de contorno, em problemas heterogêneos (diferentes materiais) utilizam-se nas interfaces dos materiais a continuidade do fluxo e da densidade de corrente, dadas respectivamente por

$$\phi_g^{(r)}(x,y) \Big|_{n_i} = \phi_g^{(r+1)}(x,y) \Big|_{n_i} \quad (3.3)$$

e

$$-D_g^{(r)} \frac{\partial}{\partial n} \phi_g^{(r)}(x,y) \Big|_{n_i} = -D_g^{(r+1)} \frac{\partial}{\partial n} \phi_g^{(r+1)}(x,y) \Big|_{n_i}, \quad (3.4)$$

onde $(x,y) \in \Omega$, r são as diferentes regiões materiais e n_i é o valor da variável n na interface.

Neste trabalho, derivamos uma formulação nodal a partir da Eq. (3.1). Para tanto particionamos o domínio Ω em N sub-regiões (nodos) retangulares homogêneos (parâmetros nucleares constantes) de dimensões $\Delta x^{(i,j)}$ em x e $\Delta y^{(i,j)}$ em y , onde (i,j) representa um nodo arbitrário. Assim, reescrevemos a Eq. (3.1) para cada nodo como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial x} \left(-D_g^{(i,j)} \frac{\partial}{\partial x} \phi_g^{(i,j)}(x,y) \right) + \frac{\partial}{\partial y} \left(-D_g^{(i,j)} \frac{\partial}{\partial y} \phi_g^{(i,j)}(x,y) \right) + \Sigma_{Rg}^{(i,j)} \phi_g^{(i,j)}(x,y) = \\ \frac{\chi_g}{K} \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'}^{(i,j)} \phi_{g'}^{(i,j)}(x,y) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{sg'g}^{(i,j)} \phi_{g'}^{(i,j)}(x,y). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Em cada nodo, integramos a Eq. (3.5) em $x \in [x_{i-1}, x_i]$ e $y \in [y_{j-1}, y_j]$ e dividimos por $\Delta x^{(i,j)} \Delta y^{(i,j)}$. Com isso a Eq. (3.5) é reescrita da forma

$$\begin{aligned} \frac{1}{\Delta x^{(i,j)}} \left(\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_i) - \bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_{i-1}) \right) + \frac{1}{\Delta y^{(i,j)}} \left(\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y_j) - \bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y_{j-1}) \right) + \Sigma_{Rg}^{(i,j)} \bar{\phi}_g^{(i,j)} = \\ \frac{\chi_g}{K} \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'}^{(i,j)} \bar{\phi}_{g'}^{(i,j)} + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{sg'g}^{(i,j)} \bar{\phi}_{g'}^{(i,j)}, \end{aligned} \quad (3.6)$$

onde $\bar{\phi}_g^{(i,j)}$ é o fluxo escalar médio do grupo g no nodo (i,j) definido por

$$\bar{\phi}_g^{(i,j)} = \frac{1}{\Delta x^{(i,j)} \Delta y^{(i,j)}} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \int_{y_{j-1}}^{y_j} \phi_g^{(i,j)}(x,y) \, dy \, dx, \quad (3.7)$$

$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x)$ é densidade de corrente média em y do grupo g no nodo (i,j)

$$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x) = -D_g^{(i,j)} \frac{d}{dx} \bar{\phi}_{gy}^{(i,j)}(x), \quad (3.8)$$

sendo $\bar{\phi}_{gy}^{(i,j)}(x)$ é o fluxo escalar médio na direção y do grupo g no nodo (i,j) definido por

$$\bar{\phi}_{gy}^{(i,j)}(x) = \frac{1}{\Delta y^{(i,j)}} \int_{y_{j-1}}^{y_j} \phi_g^{(i,j)}(x,y) \, dy \quad (3.9)$$

e $\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y)$ é densidade de corrente média em x do grupo g no nodo (i,j)

$$\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y) = -D_g^{(i,j)} \frac{d}{dy} \bar{\phi}_{gx}^{(i,j)}(y), \quad (3.10)$$

sendo $\bar{\phi}_{gx}^{(i,j)}(y)$ é o fluxo escalar médio na direção x do grupo g no nodo (i,j) definido por

$$\bar{\phi}_{gx}^{(i,j)}(y) = \frac{1}{\Delta x^{(i,j)}} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \phi_g^{(i,j)}(x,y) dx. \quad (3.11)$$

Notamos que as equações (3.6) estão escritas em função das incógnitas fluxos médios e densidades de corrente nas interfaces dos nodos, além do autovalor K . Temos um conjunto de GN equações com GN incógnitas referentes aos fluxos médios, além de incógnitas adicionais relativas às densidades de corrente, como usual em metodologias nodais, de tal modo que necessitamos introduzir equações auxiliares para a resolução do problema. O número de incógnitas adicionais que determina a ordem final do sistema depende da geometria. Com este intuito apresentamos cinco propostas de aproximação das densidades de correntes, em termos dos fluxos médios, de forma a reduzir o número de incógnitas do problema para GN (fluxos médios), além do autovalor K . Nas quatro primeiras propostas aproximamos as derivadas por um esquema de dois valores e na quinta proposta por um esquema de quatro valores.

3.1.1 Proposta 1 para as aproximações das densidades de correntes

Uma primeira proposta de aproximação das densidades de corrente das Eqs. (3.8) e (3.10) consiste em apenas aproximar as derivadas, mantendo o mesmo coeficiente de difusão para todas as aproximações do mesmo nodo. Assim, obtemos depois de algumas manipulações a aproximação para a densidade de corrente na interface leste do nodo (i,j) da forma

$$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_i) \cong -\frac{2D_g^{(i,j)}}{\Delta x^{(i+1,j)} + \Delta x^{(i,j)}} \left(\bar{\phi}_g^{(i+1,j)} - \bar{\phi}_g^{(i,j)} \right), \quad (3.12)$$

a aproximação na interface oeste

$$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_{i-1}) \cong -\frac{2D_g^{(i,j)}}{\Delta x^{(i,j)} + \Delta x^{(i-1,j)}} \left(\bar{\phi}_g^{(i,j)} - \bar{\phi}_g^{(i-1,j)} \right), \quad (3.13)$$

a aproximação na interface norte

$$\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y_j) \cong -\frac{2D_g^{(i,j)}}{\Delta y^{(i,j+1)} + \Delta y^{(i,j)}} \left(\bar{\phi}_g^{(i,j+1)} - \bar{\phi}_g^{(i,j)} \right), \quad (3.14)$$

e a aproximação na interface sul

$$\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y_{j-1}) \cong -\frac{2D_g^{(i,j)}}{\Delta y^{(i,j)} + \Delta y^{(i,j-1)}} \left(\bar{\phi}_g^{(i,j)} - \bar{\phi}_g^{(i,j-1)} \right). \quad (3.15)$$

Entretanto, se fizermos apenas essas aproximações, as condições de continuidade da densidade de corrente nas interfaces, Eq. (3.4), não são atendidas. A seguir, definimos outras três propostas que satisfazem as condições de continuidade.

3.1.2 Proposta 2 para as aproximações das densidades de correntes

A segunda proposta que apresentamos é inspirada nas aproximações regressivas, em que o coeficiente da difusão da aproximação da corrente nas interfaces em x e y são referente ao nodo oeste e sul da interface, respectivamente. Assim, obtemos a aproximação para a densidade de corrente na interface leste do nodo (i,j) da forma

$$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_i) \cong -\frac{2D_g^{(i,j)}}{\Delta x^{(i+1,j)} + \Delta x^{(i,j)}} \left(\bar{\phi}_g^{(i+1,j)} - \bar{\phi}_g^{(i,j)} \right), \quad (3.16)$$

a aproximação na interface oeste

$$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_{i-1}) \cong -\frac{2D_g^{(i-1,j)}}{\Delta x^{(i,j)} + \Delta x^{(i-1,j)}} \left(\bar{\phi}_g^{(i,j)} - \bar{\phi}_g^{(i-1,j)} \right), \quad (3.17)$$

a aproximação na interface norte

$$\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y_j) \cong -\frac{2D_g^{(i,j)}}{\Delta y^{(i,j+1)} + \Delta y^{(i,j)}} \left(\bar{\phi}_g^{(i,j+1)} - \bar{\phi}_g^{(i,j)} \right), \quad (3.18)$$

e a aproximação na interface sul

$$\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y_{j-1}) \cong -\frac{2D_g^{(i,j-1)}}{\Delta y^{(i,j)} + \Delta y^{(i,j-1)}} \left(\bar{\phi}_g^{(i,j)} - \bar{\phi}_g^{(i,j-1)} \right). \quad (3.19)$$

3.1.3 Proposta 3 para as aproximações das densidades de correntes

Essa proposta é desenvolvida a partir de aproximações que utilizam os fluxos médios dos nodos e os fluxos nas interfaces, inspirada na proposta de Abreu (2017) [3] para problemas unidimensionais. Dessa forma, aproximamos a densidade de corrente para a interface leste do nodo (i,j) como

$$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_i) \cong -D_g^{(i,j)} \left(\frac{\bar{\phi}_{gy}(x_i) - \bar{\phi}_g^{(i,j)}}{\Delta x^{(i,j)}/2} \right) \quad (3.20)$$

e para a interface oeste

$$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_{i-1}) \cong -D_g^{(i,j)} \left(\frac{\bar{\phi}_g^{(i,j)} - \bar{\phi}_{gy}(x_{i-1})}{\Delta x^{(i,j)}/2} \right). \quad (3.21)$$

Nessas aproximações, aplicamos as condições de continuidade nas interfaces na direção x e obtemos depois de algumas manipulações

$$\bar{\phi}_{gy}(x_i) = \frac{D_g^{(i+1,j)} \Delta x^{(i,j)} \bar{\phi}_g^{(i+1,j)} + D_g^{(i,j)} \Delta x^{(i+1,j)} \bar{\phi}_g^{(i,j)}}{D_g^{(i+1,j)} \Delta x^{(i,j)} + D_g^{(i,j)} \Delta x^{(i+1,j)}}. \quad (3.22)$$

De forma análoga, aproximamos a densidade de corrente para a interface norte do nodo (i,j) como

$$\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y_j) \cong -D_g^{(i,j)} \left(\frac{\bar{\phi}_{gx}(y_j) - \bar{\phi}_g^{(i,j)}}{\Delta y^{(i,j)}/2} \right) \quad (3.23)$$

e para a interface sul

$$\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y_{j-1}) \cong -D_g^{(i,j)} \left(\frac{\bar{\phi}_g^{(i,j)} - \bar{\phi}_{gx}(y_{j-1})}{\Delta y^{(i,j)}/2} \right). \quad (3.24)$$

Nessas aproximações, aplicamos as condições de continuidade nas interfaces na direção y e obtemos depois de algumas manipulações

$$\bar{\phi}_{gx}(y_j) = \frac{D_g^{(i,j+1)} \Delta y^{(i,j)} \bar{\phi}_g^{(i,j+1)} + D_g^{(i,j)} \Delta y^{(i,j+1)} \bar{\phi}_g^{(i,j)}}{D_g^{(i,j+1)} \Delta y^{(i,j)} + D_g^{(i,j)} \Delta y^{(i,j+1)}}. \quad (3.25)$$

Por fim, substituindo a Eq. (3.22) nas Eqs. (3.20) e (3.21) obtemos uma aproximação da corrente na interface leste do nodo (i,j) como

$$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_i) \cong -\frac{2D_g^{(i+1,j)} D_g^{(i,j)}}{D_g^{(i+1,j)} \Delta x^{(i,j)} + D_g^{(i,j)} \Delta x^{(i+1,j)}} \left(\bar{\phi}_g^{(i+1,j)} - \bar{\phi}_g^{(i,j)} \right) \quad (3.26)$$

e uma aproximação na interface oeste do nodo (i,j)

$$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_{i-1}) \cong -\frac{2D_g^{(i,j)}D_g^{(i-1,j)}}{D_g^{(i,j)}\Delta x^{(i-1,j)} + D_g^{(i-1,j)}\Delta x^{(i,j)}} \left(\bar{\phi}_g^{(i,j)} - \bar{\phi}_g^{(i-1,j)} \right). \quad (3.27)$$

Substituindo a Eq. (3.25) nas Eqs. (3.23) e (3.24) obtemos uma aproximação da corrente na interface norte do nodo (i,j) como

$$\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y_j) \cong -\frac{2D_g^{(i,j+1)}D_g^{(i,j)}}{D_g^{(i,j+1)}\Delta y^{(i,j)} + D_g^{(i,j)}\Delta y^{(i,j+1)}} \left(\bar{\phi}_g^{(i,j+1)} - \bar{\phi}_g^{(i,j)} \right) \quad (3.28)$$

e uma aproximação na interface sul do nodo (i,j)

$$\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y_{j-1}) \cong -\frac{2D_g^{(i,j)}D_g^{(i,j-1)}}{D_g^{(i,j)}\Delta y^{(i,j-1)} + D_g^{(i,j-1)}\Delta y^{(i,j)}} \left(\bar{\phi}_g^{(i,j)} - \bar{\phi}_g^{(i,j-1)} \right). \quad (3.29)$$

3.1.4 Proposta 4 para as aproximações das densidades de correntes

Desenvolvemos esta proposta a partir da média ponderada dos coeficientes da difusão e da aproximação da derivada por dois valores. Em ambos os casos, os valores dos coeficientes de difusão e dos fluxos médios são referentes aos nodos vizinhos de cada interface. Assim, propomos uma aproximação da densidade de corrente para a interface leste do nodo (i,j) como

$$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_i) \cong -\frac{2 \left(D_g^{(i+1,j)}\Delta x^{(i+1,j)} + D_g^{(i,j)}\Delta x^{(i,j)} \right)}{\left(\Delta x^{(i+1,j)} + \Delta x^{(i,j)} \right)^2} \left(\bar{\phi}_g^{(i+1,j)} - \bar{\phi}_g^{(i,j)} \right), \quad (3.30)$$

para a interface oeste

$$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_{i-1}) \cong -\frac{2\left(D_g^{(i,j)}\Delta x^{(i,j)} + D_g^{(i-1,j)}\Delta x^{(i-1,j)}\right)}{\left(\Delta x^{(i,j)} + \Delta x^{(i-1,j)}\right)^2}\left(\bar{\phi}_g^{(i,j)} - \bar{\phi}_g^{(i-1,j)}\right), \quad (3.31)$$

para a interface norte

$$\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y_j) \cong -\frac{2\left(D_g^{(i,j+1)}\Delta x^{(i,j+1)} + D_g^{(i,j)}\Delta x^{(i,j)}\right)}{\left(\Delta x^{(i,j+1)} + \Delta x^{(i,j)}\right)^2}\left(\bar{\phi}_g^{(i,j+1)} - \bar{\phi}_g^{(i,j)}\right), \quad (3.32)$$

e para a interface sul

$$\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y_{j-1}) \cong -\frac{2\left(D_g^{(i,j)}\Delta x^{(i,j)} + D_g^{(i,j-1)}\Delta x^{(i,j-1)}\right)}{\left(\Delta x^{(i,j)} + \Delta x^{(i,j-1)}\right)^2}\left(\bar{\phi}_g^{(i,j)} - \bar{\phi}_g^{(i,j-1)}\right). \quad (3.33)$$

Neste ponto as diferenças entre as quatro primeiras propostas de aproximação das densidades de corrente estão nos coeficientes que acompanham os fluxos escalares médios. Dessa forma, a fim de buscarmos uma generalização, definimos como $\mathfrak{l}_g^{(i,j)}$ os coeficientes que acompanham os fluxos médios da interface leste, $\mathfrak{o}_g^{(i,j)}$ da interface oeste, $\mathfrak{n}_g^{(i,j)}$ da interface norte e $\mathfrak{s}_g^{(i,j)}$ da interface sul, para cada nodo (i,j) e grupo g . Substituindo estas aproximações na Eq. (3.6) obtemos depois de algumas manipulações,

$$\begin{aligned} & -\frac{\mathfrak{n}_g^{(i,j)}}{\Delta y^{(i,j)}}\bar{\phi}_g^{(i,j+1)} - \frac{\mathfrak{l}_g^{(i,j)}}{\Delta x^{(i,j)}}\bar{\phi}_g^{(i+1,j)} + \frac{\mathfrak{l}_g^{(i,j)} + \mathfrak{o}_g^{(i,j)}}{\Delta x^{(i,j)}}\bar{\phi}_g^{(i,j)} + \\ & \frac{\mathfrak{n}_g^{(i,j)} + \mathfrak{s}_g^{(i,j)}}{\Delta y^{(i,j)}}\bar{\phi}_g^{(i,j)} - \frac{\mathfrak{o}_g^{(i,j)}}{\Delta x^{(i,j)}}\bar{\phi}_g^{(i-1,j)} - \frac{\mathfrak{s}_g^{(i,j)}}{\Delta y^{(i,j)}}\bar{\phi}_g^{(i,j-1)} + \\ & \Sigma_{Rg}^{(i,j)}\bar{\phi}_g^{(i,j)} = \frac{\chi_g}{K} \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'}^{(i,j)} \bar{\phi}_{g'}^{(i,j)} + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{sg'g}^{(i,j)} \bar{\phi}_{g'}^{(i,j)}. \end{aligned} \quad (3.34)$$

Entretanto, as aproximações das densidades de corrente para os contornos: oeste, leste, norte e sul, ainda não foram definidas, pois elas dependem das condições de contorno. A seguir, definiremos essas aproximações, que são iguais para as quatro propostas.

Iniciamos com o caso particular dos problemas em que a constante a_g da condição de contorno, Eq. (3.2), for igual a zero e b_g diferente de zero. Nesse caso, a Eq. (3.2) é reescrita como

$$b_g \frac{\partial}{\partial n} \phi_g(x,y) \Big|_{n_c} = 0, \quad (3.35)$$

ou seja, nestes contornos as variações dos fluxos (derivadas) são iguais a zero. Portanto, as aproximações das densidades de corrente também são iguais a zero nesses contornos.

Nos demais problemas, para definirmos as aproximações das densidades de corrente para os contornos oeste, tomamos a condição de contorno dada na Eq. (3.2) para os contornos oeste como

$$a_g^{(o)} \phi_g^{(i,j)}(x,y) \Big|_{x_{i-1}} + b_g^{(o)} \frac{\partial}{\partial x} \phi_g^{(i,j)}(x,y) \Big|_{x_{i-1}} = 0, \quad (3.36)$$

onde $a_g^{(o)}$ e $b_g^{(o)}$ são as constantes da condição de contorno oeste. Na Eq. (3.36), aplicamos a integração nodal na direção y e dividimos por $\Delta y^{(i,j)}$ e manipulando-a temos

$$\bar{\phi}_{gy}^{(i,j)}(x) \Big|_{x_{i-1}} = - \frac{b_g^{(o)}}{a_g^{(o)}} \frac{d}{dx} \bar{\phi}_{gy}^{(i,j)}(x) \Big|_{x_{i-1}}. \quad (3.37)$$

A derivada presente na Eq. (3.37) pode ser aproximada da forma

$$\left. \frac{d}{dx} \bar{\phi}_{gy}^{(i,j)}(x) \right|_{x_{i-1}} \cong \frac{\bar{\phi}_g^{(i,j)} - \bar{\phi}_{gy}^{(i,j)}(x) \Big|_{x_{i-1}}}{\Delta x^{(i,j)}/2}, \quad (3.38)$$

que ao substituir essa aproximação na Eq. (3.37) obtemos uma expressão para o fluxo no contorno oeste do nodo (i,j)

$$\bar{\phi}_{gy}^{(i,j)}(x) \Big|_{x_{i-1}} = -\frac{2b_g^{(o)}}{a_g^{(o)} \Delta x^{(i,j)} - 2b_g^{(o)}} \bar{\phi}_g^{(i,j)}. \quad (3.39)$$

Cabe ressaltar que estamos impondo $a_g^{(o)} \Delta x^{(i,j)} \neq 2b_g^{(o)}$. Se houver casos em que $a_g^{(o)} \Delta x^{(i,j)} = 2b_g^{(o)}$, propomos o descarte da malha $(\Delta x^{(i,j)})$ que estabelece essa igualdade.

Desta forma, aproximando as densidades de corrente para os contornos oeste como

$$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_{i-1}) \cong -\frac{2D_g^{(i,j)}}{\Delta x^{(i,j)}} \left(\bar{\phi}_g^{(i,j)} - \bar{\phi}_{gy}^{(i,j)}(x) \Big|_{x_{i-1}} \right) \quad (3.40)$$

e substituindo a Eq. (3.39) na Eq. (3.40), obtemos depois de algumas manipulações,

$$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_{i-1}) \cong -\frac{2D_g^{(i,j)} a_g^{(o)}}{a_g^{(o)} \Delta x^{(i,j)} - 2b_g^{(o)}} \bar{\phi}_g^{(i,j)} \quad (3.41)$$

e, assim, os coeficientes $\mathbf{o}_g^{(i,j)}$ são definidos nesses contornos como

$$\mathbf{o}_g^{(i,j)} = \frac{2D_g^{(i,j)} a_g^{(o)}}{a_g^{(o)} \Delta x^{(i,j)} - 2b_g^{(o)}}. \quad (3.42)$$

Um procedimento análogo pode ser aplicado para aproximar as densidades de correntes nos outros três contornos: leste, sul e norte. Assim, para os contornos leste definimos

$$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_i) \cong \frac{2D_g^{(i,j)} a_g^{(l)}}{a_g^{(l)} \Delta x^{(i,j)} + 2b_g^{(l)}} \bar{\phi}_g^{(i,j)}, \quad (3.43)$$

onde $a_g^{(l)}$ e $b_g^{(l)}$ são as constantes da condição de contorno leste. Semelhante as aproximações dos contornos oeste, impomos $a_g^{(l)} \Delta x^{(i,j)} \neq -2b_g^{(l)}$ e nos casos que houver a igualdade, descartamos a malha que estabelece essa igualdade. Assim, os coeficientes $\mathfrak{l}_g^{(i,j)}$ são definidos nesses contornos como

$$\mathfrak{l}_g^{(i,j)} = \frac{2D_g^{(i,j)} a_g^{(l)}}{a_g^{(l)} \Delta x^{(i,j)} + 2b_g^{(l)}}. \quad (3.44)$$

No contorno sul definimos

$$\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y_{j-1}) \cong -\frac{2D_g^{(i,j)} a_g^{(s)}}{a_g^{(s)} \Delta y^{(i,j)} - 2b_g^{(s)}} \bar{\phi}_g^{(i,j)}, \quad (3.45)$$

onde $a_g^{(s)}$ e $b_g^{(s)}$ são as constantes da condição de contorno sul e novamente impomos que $a_g^{(s)} \Delta y^{(i,j)} \neq 2b_g^{(s)}$. Assim, os coeficientes $\mathfrak{s}_g^{(i,j)}$ são definidos nesses contornos como

$$\mathfrak{s}_g^{(i,j)} = \frac{2D_g^{(i,j)} a_g^{(s)}}{a_g^{(s)} \Delta y^{(i,j)} - 2b_g^{(s)}}. \quad (3.46)$$

Por último, no contorno norte definimos

$$\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y_j) \cong \frac{2D_g^{(i,j)} a_g^{(n)}}{a_g^{(n)} \Delta y^{(i,j)} + 2b_g^{(n)}} \bar{\phi}_g^{(i,j)}, \quad (3.47)$$

onde $a_g^{(n)}$ e $b_g^{(n)}$ são as constantes da condição de contorno norte e como nos outros contornos impomos $a_g^{(n)} \Delta y^{(i,j)} \neq -2b_g^{(n)}$. Assim, os coeficientes $\mathfrak{n}_g^{(i,j)}$ são definidos nesses contornos como

$$\mathbf{n}_g^{(i,j)} = \frac{2D_g^{(i,j)} a_g^{(n)}}{a_g^{(n)} \Delta y^{(i,j)} + 2b_g^{(n)}}. \quad (3.48)$$

Por fim, quando substituimos estas aproximações das densidades de corrente para os contornos na Eq. (3.6), obtemos as equações que faltavam para completar o problema.

3.1.5 Proposta 5 para as aproximações das densidades de correntes

Essa proposta de aproximação das densidades de correntes é semelhante a Proposta 4, onde aproximamos os coeficientes por meio da média dos coeficientes da difusão dos nodos vizinhos à interface. Entretanto, as derivadas são aproximadas por quatro valores de fluxos médios. Restringimos esta proposta para problemas em que se possa particionar o domínio em nodos de igual largura, caso contrário, torna-se difícil a derivação das expressões. Com esta restrição, a média ponderada usada nos coeficientes de difusão se transforma em média aritmética. A aproximação das derivadas de primeira ordem por quatro valores podem ser obtidas através dos polinômios interpolador de Lagrange [17]. Desta forma, aproximamos a derivada no ponto x_i do nodo (i,j) por

$$\left. \frac{d}{dx} \bar{\phi}_{gy}^{(i,j)}(x) \right|_{x_i} \cong \frac{-\bar{\phi}_g^{(i+2,j)} + 27\bar{\phi}_g^{(i+1,j)} - 27\bar{\phi}_g^{(i,j)} + \bar{\phi}_g^{(i-1,j)}}{24\Delta x}. \quad (3.49)$$

Substituindo a média aritmética dos coeficientes de difusão dos nodos vizinhos à interface x_i e a Eq. (3.49) na Eq. (3.8), obtemos a aproximação da densidade de corrente para a interface leste do nodo (i,j)

$$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_i) \cong -\frac{D_g^{(i+1,j)} + D_g^{(i,j)}}{48\Delta x} \left(-\bar{\phi}_g^{(i+2,j)} + 27\bar{\phi}_g^{(i+1,j)} - 27\bar{\phi}_g^{(i,j)} + \bar{\phi}_g^{(i-1,j)} \right). \quad (3.50)$$

Um procedimento análogo pode ser aplicado para aproximar as densidades de correntes nas outras três interfaces. Assim, obtemos para a interface oeste do nodo (i, j)

$$\bar{J}_{g_y}^{(i,j)}(x_{i-1}) \cong -\frac{D_g^{(i,j)} + D_g^{(i-1,j)}}{48\Delta x} \left(-\bar{\phi}_g^{(i+1,j)} + 27\bar{\phi}_g^{(i,j)} - 27\bar{\phi}_g^{(i-1,j)} + \bar{\phi}_g^{(i-2,j)} \right), \quad (3.51)$$

para a interface norte

$$\bar{J}_{g_x}^{(i,j)}(y_j) \cong -\frac{D_g^{(i,j+1)} + D_g^{(i,j)}}{48\Delta y} \left(-\bar{\phi}_g^{(i,j+2)} + 27\bar{\phi}_g^{(i,j+1)} - 27\bar{\phi}_g^{(i,j)} + \bar{\phi}_g^{(i,j-1)} \right) \quad (3.52)$$

e para a interface sul

$$\bar{J}_{g_x}^{(i,j)}(y_{j-1}) \cong -\frac{D_g^{(i,j)} + D_g^{(i,j-1)}}{48\Delta y} \left(-\bar{\phi}_g^{(i,j+1)} + 27\bar{\phi}_g^{(i,j)} - 27\bar{\phi}_g^{(i,j-1)} + \bar{\phi}_g^{(i,j-2)} \right). \quad (3.53)$$

Novamente, para simplificar a notação, definimos como $\mathbf{l}_{4g}^{(i,j)}$ os coeficientes que acompanham os fluxos médios da interface leste, $\mathbf{o}_{4g}^{(i,j)}$ da interface oeste, $\mathbf{n}_{4g}^{(i,j)}$ da interface norte e $\mathbf{s}_{4g}^{(i,j)}$ da interface sul, para cada nodo (i, j) , grupo g e aproximação da derivada por quatro valores. Substituindo estas aproximações na Eq. (3.6) obtemos depois de algumas manipulações

$$\begin{aligned} & \frac{\mathbf{n}_{4g}^{(i,j)}}{\Delta y} \bar{\phi}_g^{(i,j+2)} + \frac{-27\mathbf{n}_{4g}^{(i,j)} + \mathbf{s}_{4g}^{(i,j)}}{\Delta y} \bar{\phi}_g^{(i,j+1)} + \frac{\mathbf{l}_{4g}^{(i,j)}}{\Delta x} \bar{\phi}_g^{(i+2,j)} + \\ & \frac{-27\mathbf{l}_{4g}^{(i,j)} + \mathbf{o}_{4g}^{(i,j)}}{\Delta x} \bar{\phi}_g^{(i+1,j)} + \frac{27\mathbf{n}_{4g}^{(i,j)} - 27\mathbf{s}_{4g}^{(i,j)}}{\Delta y} \bar{\phi}_g^{(i,j)} + \frac{27\mathbf{l}_{4g}^{(i,j)} - 27\mathbf{o}_{4g}^{(i,j)}}{\Delta x} \bar{\phi}_g^{(i,j)} + \\ & \frac{-\mathbf{l}_{4g}^{(i,j)} + 27\mathbf{o}_{4g}^{(i,j)}}{\Delta x} \bar{\phi}_g^{(i-1,j)} - \frac{\mathbf{o}_{4g}^{(i,j)}}{\Delta x} \bar{\phi}_g^{(i-2,j)} + \frac{-\mathbf{n}_{4g}^{(i,j)} + 27\mathbf{s}_{4g}^{(i,j)}}{\Delta y} \bar{\phi}_g^{(i,j-1)} - \\ & \frac{\mathbf{s}_{4g}^{(i,j)}}{\Delta y} \bar{\phi}_g^{(i,j-2)} + \sum_{Rg} \bar{\phi}_g^{(i,j)} = \frac{\chi_g}{K} \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \sum_{fg'} \bar{\phi}_{g'}^{(i,j)} + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \sum_{sg'} \bar{\phi}_{g'}^{(i,j)}. \quad (3.54) \end{aligned}$$

Observamos que as aproximações das densidades de corrente utilizadas para obter a Eq. (3.54), não estão definidas para os contornos e nem para as interfaces vizinhas aos contornos. Nesses locais, propomos as aproximações por dois valores apresentadas na Proposta 4. Na Figura 3.1, ilustramos quais são as propostas de aproximação das densidades de correntes (2 ou 4 valores) aplicadas em cada uma das interfaces de um problema retangular.

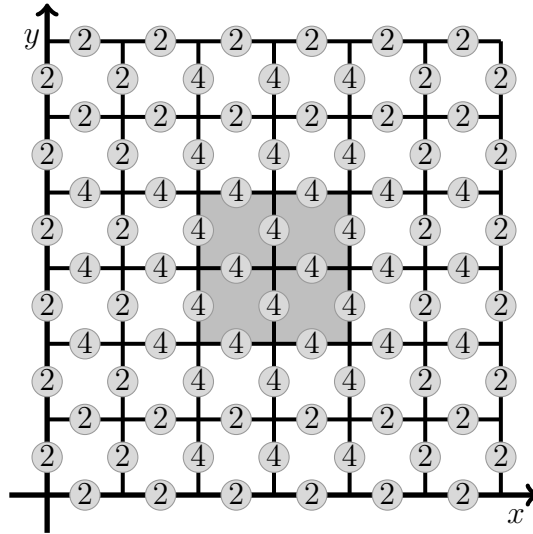


Figura 3.1: Esquema representando as aproximações de cada interface.

Os nodos em cinza da Figura 3.1 são aqueles em que aproximamos as densidades de corrente exclusivamente pelas propostas de quatro valores de fluxos médios. No entanto, os nodos que fazem limite com os quatro cantos do domínio são aqueles em que aproximamos as densidades de corrente exclusivamente pelas propostas de dois valores de fluxos médios. Nos demais nodos, as densidades de corrente são aproximadas por diferentes combinações de dois e quatro valores, onde obtemos as equações que faltavam para completar o problema.

Por fim, destacamos que estas mesmas metodologias podem ser aplicadas para problemas unidimensionais. No caso unidimensional, temos apenas as aproximações das densidades de correntes nas interfaces leste e oeste, ou seja, os termos que contêm os coeficientes \mathbf{n} e \mathbf{s} das Eqs. (3.34) e (3.54) são iguais a zero.

Com essas propostas de aproximação das densidades de correntes por meio dos fluxos médios, obtemos um conjunto de equações apenas em função dos fluxos médios e do K , que formam um problema de autovalor. Nas subseções seguintes iremos apresentar duas abordagens para determinar o autovalor dominante K e os fluxos escalares médios (autovetores correspondentes). A primeira abordagem se baseia na avaliação das raízes de uma equação característica, com duas versões, dadas pelo método da Bissecção e o método da Secante. Uma segunda abordagem é a do método Iterativo de Fonte.

3.2 Método da Bissecção e da Secante

A fim de estimar o autovalor K presente no conjunto de Eqs. (3.34) e (3.54), construímos um sistema linear homogêneo da forma

$$\mathbf{M}\bar{\Phi} = \mathbf{0}, \quad (3.55)$$

onde $\bar{\Phi}$ é um vetor que contém os fluxos médios por grupo em cada nodo e \mathbf{M} é uma matriz de blocos que contém os parâmetros nucleares. O vetor $\bar{\Phi}$ é da ordem GN e a matriz \mathbf{M} é da ordem $GN \times GN$, onde N é o número de nodos homogêneos em que o domínio é particionado.

A estrutura de blocos da matriz \mathbf{M} depende da dimensão do problema e da forma como aproximamos as densidades de correntes nas interfaces (2 ou 4 valores de fluxos médios). Na Tabela 3.1, apresentamos a quantidade de diagonais de blocos da matriz \mathbf{M} para cada um desses casos.

Tabela 3.1: Quantidade de diagonais de blocos da matriz \mathbf{M} .

	Unidimensional	Bidimensional
2 valores	3	5
4 valores	5	9

A fim de exemplificar, apresentamos a seguir a estrutura do vetor dos fluxos médios e da matriz \mathbf{M} para o caso bidimensional e para o caso unidimensional, ambos com aproximações das densidades de correntes por dois valores.

- Caso bidimensional

O vetor $\bar{\bar{\Phi}}$ que contém os fluxos médios é da forma

$$\bar{\bar{\Phi}} = \left[\bar{\bar{\Phi}}^{(1,1)}, \bar{\bar{\Phi}}^{(2,1)}, \dots, \bar{\bar{\Phi}}^{(Nx,1)}, \bar{\bar{\Phi}}^{(1,2)}, \dots, \bar{\bar{\Phi}}^{(Nx,Ny)} \right]^T \quad (3.56)$$

onde Nx e Ny representam o número de nodos nas direções x e y , respectivamente. Cada um dos vetores $\bar{\bar{\Phi}}^{(i,j)}$ possui componentes relacionados a cada grupo

$$\bar{\bar{\Phi}}^{(i,j)} = \left[\bar{\phi}_1^{(i,j)}, \bar{\phi}_2^{(i,j)}, \dots, \bar{\phi}_G^{(i,j)} \right]^T. \quad (3.57)$$

A matriz \mathbf{M} é uma matriz com cinco diagonais de blocos, das quais três estão no centro da matriz e as outras duas (uma de cada lado) tem um afastamento da diagonal central. Esse afastamento é igual ao número de nodos entre o nodo (i,j) até $(i,j+1)$ e até $(i,j-1)$, que definem o ordenamento das componentes no vetor $\bar{\bar{\Phi}}$ (Eq. (3.56)), uma vez que estes são ordenados seguindo a direção x , por exemplo:

$$(1,1), (2,1), \dots, (i-1, j-1), (\mathbf{i}, \mathbf{j} - \mathbf{1}), (i+1, j-1), \dots, (i-1, j), (\mathbf{i}, \mathbf{j}), (i+1, j), \dots \\ \dots, (i-1, j+1), (\mathbf{i}, \mathbf{j} + \mathbf{1}), (i+1, j+1), \dots, (Nx, Ny). \quad (3.58)$$

Devido à ordem da matriz \mathbf{M} , apresentamos ela em partes, onde as primeiras linhas são da forma

onde cada bloco da matriz \mathbf{M} são matrizes de ordem $G \times G$. Os blocos da diagonal principal $\mathbf{M}_d^{(i,j)}$ são matrizes cheias da forma

$$\mathbf{M}_d^{(i,j)} = \begin{bmatrix} m_{1,1}^{(i,j)} & m_{1,2}^{(i,j)} & \dots & m_{1,G}^{(i,j)} \\ m_{2,1}^{(i,j)} & m_{2,2}^{(i,j)} & \dots & m_{2,G}^{(i,j)} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ m_{G,1}^{(i,j)} & m_{G,2}^{(i,j)} & \dots & m_{G,G}^{(i,j)} \end{bmatrix}, \quad (3.61)$$

em que os elementos da matriz $\mathbf{M}_d^{(i,j)}$ são escritos como

$$m_{\kappa,g}^{(i,j)} = \delta_{\kappa,g} \left(\frac{\mathfrak{l}_g^{(i,j)} + \mathfrak{o}_g^{(i,j)}}{\Delta x^{(i,j)}} + \frac{\mathbf{n}_g^{(i,j)} + \mathfrak{s}_g^{(i,j)}}{\Delta y^{(i,j)}} + \Sigma_{Rg}^{(i,j)} \right) - \frac{\chi_\kappa}{K} \nu_g \Sigma_{fg}^{(i,j)} - (1 - \delta_{\kappa,g}) \Sigma_{sg\kappa}^{(i,j)}, \quad (3.62)$$

onde $\delta_{\kappa,g}$ é o delta de Kronecker.

Ainda, os blocos $\mathbf{M}_n^{(i,j)}$, $\mathbf{M}_l^{(i,j)}$, $\mathbf{M}_o^{(i,j)}$ e $\mathbf{M}_s^{(i,j)}$ de ordem $G \times G$ são matrizes diagonais da forma

$$\mathbf{M}_n^{(i,j)} = \text{diag} \left(\frac{\mathbf{n}_1^{(i,j)}}{\Delta y^{(i,j)}}, \frac{\mathbf{n}_2^{(i,j)}}{\Delta y^{(i,j)}}, \dots, \frac{\mathbf{n}_G^{(i,j)}}{\Delta y^{(i,j)}} \right), \quad (3.63)$$

$$\mathbf{M}_l^{(i,j)} = \text{diag} \left(\frac{\mathfrak{l}_1^{(i,j)}}{\Delta x^{(i,j)}}, \frac{\mathfrak{l}_2^{(i,j)}}{\Delta x^{(i,j)}}, \dots, \frac{\mathfrak{l}_G^{(i,j)}}{\Delta x^{(i,j)}} \right), \quad (3.64)$$

$$\mathbf{M}_o^{(i,j)} = \text{diag} \left(\frac{\mathfrak{o}_1^{(i,j)}}{\Delta x^{(i,j)}}, \frac{\mathfrak{o}_2^{(i,j)}}{\Delta x^{(i,j)}}, \dots, \frac{\mathfrak{o}_G^{(i,j)}}{\Delta x^{(i,j)}} \right) \quad (3.65)$$

e

em que os elementos da matriz $\mathbf{M}_d^{(i)}$ são escritos como

$$m_{\kappa,g}^{(i)} = \delta_{\kappa,g} \left(\frac{\mathfrak{l}_g^{(i)} + \mathfrak{o}_g^{(i)}}{\Delta x^{(i)}} + \Sigma_{Rg}^{(i)} \right) - \frac{\chi_\kappa}{K} \nu_g \Sigma_{fg}^{(i)} - (1 - \delta_{\kappa,g}) \Sigma_{sg\kappa}^{(i)}, \quad (3.71)$$

onde $\delta_{\kappa,g}$ é o delta de Kronecker.

Ainda, os blocos $\mathbf{M}_l^{(i)}$ e $\mathbf{M}_o^{(i)}$ de ordem $G \times G$ são matrizes diagonais da forma

$$\mathbf{M}_l^{(i)} = \text{diag} \left(\frac{\mathfrak{l}_1^{(i)}}{\Delta x^{(i)}}, \frac{\mathfrak{l}_2^{(i)}}{\Delta x^{(i)}}, \dots, \frac{\mathfrak{l}_G^{(i)}}{\Delta x^{(i)}} \right) \quad (3.72)$$

e

$$\mathbf{M}_o^{(i)} = \text{diag} \left(\frac{\mathfrak{o}_1^{(i)}}{\Delta x^{(i)}}, \frac{\mathfrak{o}_2^{(i)}}{\Delta x^{(i)}}, \dots, \frac{\mathfrak{o}_G^{(i)}}{\Delta x^{(i)}} \right). \quad (3.73)$$

No sistema linear homogêneo (3.55) queremos determinar os valores de K em que o determinante de \mathbf{M} seja igual a zero, $\det(\mathbf{M}) = 0$. Ou seja, estamos interessados nas raízes de uma função $f(K)$. Em particular, para esse problema de criticalidade buscamos a maior raiz (autovalor dominante).

3.2.1 Método da Bissecção

O método da Bissecção busca as raízes de uma função através de sucessivas bissecções (divisões ao meio) de um intervalo inicial que contenha ao menos uma raiz [17, 32]. A cada bissecção, escolhe-se o intervalo em que os pontos das suas extremidades, quando avaliados na função, possuam sinais opostos. Este método é baseado no Teorema de Bolzano, que é um caso particular do Teorema do Valor Intermediário [17].

Teorema 3.1 (Teorema de Bolzano). *Seja $f : [a,b] \rightarrow \mathbb{R}$ uma função contínua tal que $f(a) \cdot f(b) < 0$, então existe um número p em (a,b) tal que $f(p) = 0$.*

Observe que a função de interesse $f(K)$ é contínua para os intervalos em que $0 \notin [a,b]$, pois $f(K)$ é uma função racional

$$f(K) = \frac{c_{GN}}{K^{GN}} + \frac{c_{GN-1}}{K^{GN-1}} + \cdots + \frac{c_1}{K} + c_0, \quad (3.74)$$

onde os coeficientes c_i são constantes conhecidas. Nos problemas da criticalidade, o autovalor dominante K é muito próximo de um, assim podemos escolher um intervalo inicial que não contém o zero, satisfazendo a hipótese de continuidade do Teorema de Bolzano. Desta maneira, iniciamos o método da Bissecção com duas estimativas iniciais, K_1 e K_2 , tal que $f(K_1)$ e $f(K_2)$ tenham sinais opostos, $f(K_1) \cdot f(K_2) < 0$. Os próximos valores de K são determinados bisseccionando o intervalo atual da seguinte forma

$$K = \frac{K_1 + K_2}{2}. \quad (3.75)$$

O novo K atualiza o valor de K_1 ou K_2 . A escolha é feita a partir do sinal de $f(K)$, pois a relação de sinais opostos deve ser mantida. Este processo perdura até encontrar um K em que $f(K) = 0$ ou até atingir algum critério de parada, por exemplo, quando

$$|f(K)| < \epsilon_0 \quad (3.76)$$

e

$$\frac{|K_s - K_{s-1}|}{|K_s|} < \epsilon_1. \quad (3.77)$$

Embora o método da Bissecção sempre convirja [27], ele é geralmente mais lento quando comparado com o método da Secante, como veremos nos resultados numéricos. Além disto, quando desejamos determinar a maior raiz (autovalor dominante), a aplicação deste método enfrenta algumas dificuldades, como escolher o intervalo inicial que contenha a maior raiz e, caso o intervalo contenha mais de uma raiz, o método não garante a convergência para a maior.

3.2.2 Método da Secante

O método da Secante busca as raízes de uma função através de sucessivas raízes de retas secantes [17, 32]. As retas secantes são construídas a partir de duas estimativas iniciais para o K , K_1 e K_2 , e dos determinantes $\det(\mathbf{M}(K_1))$ e $\det(\mathbf{M}(K_2))$ da matriz \mathbf{M} . Para simplificar a notação utilizaremos $f(K) = \det(\mathbf{M}(K))$. Com os pares ordenados $(K_1, f(K_1))$ e $(K_2, f(K_2))$ podemos construir uma reta secante da função f dada por

$$g(K) = f(K_2) + \left(\frac{f(K_2) - f(K_1)}{K_2 - K_1} \right) (K - K_2), \quad (3.78)$$

que tem como raiz a próxima aproximação para o K . Deste modo, aplicamos $g(K_3) = 0$ na Eq. (3.78) e manipulamos a equação resultante na qual obtemos

$$K_3 = \frac{K_1 f(K_2) - K_2 f(K_1)}{f(K_2) - f(K_1)}. \quad (3.79)$$

Com o novo par ordenado $(K_3, f(K_3))$, podemos construir uma nova reta secante e assim sucessivamente, na qual obtemos a seguinte relação de recorrência

$$K_{s+1} = \frac{K_{s-1} f(K_s) - K_s f(K_{s-1})}{f(K_s) - f(K_{s-1})}. \quad (3.80)$$

Este processo perdura até encontrar um K em que o determinante é zero ou até atingir algum critério de parada, por exemplo, aqueles apresentados nas Eqs. (3.76) e (3.77).

No método da Secante temos que escolher K_1 e K_2 em que $\det(\mathbf{M}(K_1))$ e $\det(\mathbf{M}(K_2))$ não sejam suficientemente próximos, caso contrário, na fórmula de recorrência (3.80) obteríamos uma divisão por zero do ponto de vista computacional. Além disso, como nos problemas de criticalidade queremos o autovalor dominante, precisamos elaborar algumas estratégias para determiná-lo. Visto que o método da Secante não requer que as estimativas iniciais intercalem algum autovalor, propomos que as duas estimativas iniciais sejam um pouco maiores do que um, uma vez que o autovalor dominante crítico dos reatores nucleares são valores próximos de um. A fim de que essa estratégia também seja válida para os casos levemente supercríticos, adotamos $K^{[1]} = 1,3$ e $K^{[2]} = 1,2$. Desta forma, percebemos que o método da Secante para o problema da criticalidade (função racional do tipo Eq. (3.74)) e com a proposta das estimativas iniciais um pouco maiores do que um, converge na direção do autovalor dominante. Entretanto, ainda não temos uma comprovação formal desta convergência para o maior autovalor em problemas gerais da criticalidade, apenas, uma comprovação empírica a partir de problemas testes, como veremos nos resultados numéricos.

O determinante da matriz \mathbf{M} é calculado a partir da fatoração LU, que é igual a multiplicação dos elementos da diagonal principal da matriz \mathbf{U} e considerando as trocas de sinal, conforme as permutações das linhas ocorridas na fatoração. Entretanto, nos problemas em que a matriz \mathbf{M} for de grandes dimensões e/ou a magnitude dos elementos da diagonal principal da matriz \mathbf{U} for muito grande, estas multiplicações podem ultrapassar os valores máximos de máquina. Problema semelhante ocorre quando a magnitude dos elementos da diagonal principal da matriz \mathbf{U} for muito pequena, assim, estas multiplicações podem ultrapassar os valores mínimos de máquina. Para superar este problema, multiplicamos o determinante

por escalares adequados, uma vez que multiplicar uma função por escalar não altera as raízes da função.

Os valores dos escalares a serem multiplicados são guardados em um vetor moderador de ordem igual ao número de linhas da matriz U . O procedimento para definir este vetor moderador ocorre apenas na primeira iteração e, inicialmente, é um vetor com todas as entradas iguais a um. Assim, iniciamos o cálculo do determinante multiplicando $U(1,1)$ por $U(2,2)$, se esse valor parcial do determinante for muito grande, ele é multiplicado por um escalar pequeno, a fim de moderar o valor, e esse escalar é armazenado na posição (2) do vetor moderador. O mesmo ocorre se o valor parcial do determinante for um muito pequeno, assim o escalar a ser multiplicado deve ser grande. Caso contrário, segue-se para a multiplicação do próximo elemento, deixando a posição (2) do vetor moderador igual a um. Este procedimento deve se manter até completar as multiplicações de todos os elementos da diagonal de U . Assim, obtemos o determinante da primeira iteração e o vetor moderador que será utilizado nas demais iterações. A seguir, apresentamos um esquema deste procedimento na linguagem Fortran95.

```
=====
Subrotina para o determinante e o moderador
=====
01 if (iteracao==1) then
02   !vetor com todas as entradas iguais a 1
03   moderador=1.d0
04   Subrotina da fatoração LU de M (ipiv vetor permutação de linhas)
05   det=1.d0
06   do i=1,size(M(:,1))
07     !troca de sinal caso houve permutação de linhas
08     if (ipiv(i)/=i) then
09       det=det*(-1.d0)
10     endif
11     !ajustando o determinante quando valor for muito pequeno
12     if (abs(det)<1e-5) then
13       moderador(i)=1e5
14     endif
```

```

15      !ajustando o determinante quando valor for muito grande
16      if (abs(det)>1e5) then
17          moderador(i)=1e-5
18      endif
19      !calculando determinante
20      det=det*U(i,i)*moderador(i)
21  enddo
22 endif
=====

```

Os valores 1e-5 e 1e5, apresentados no esquema a cima, representam 10^{-5} e 10^5 , respectivamente. Para as demais iterações o vetor moderador permanece inalterado e o código segue mesma estrutura, porém eliminando as linhas 02, 03 e 11 a 18.

Após encontrarmos o autovalor K pelas duas abordagens, podemos determinar os fluxos. Para isto, além de substituir K no sistema homogêneo, Eq. (3.55), acrescentamos mais uma linha no sistema, que se refere ao cálculo da potência do reator. Novamente a fim de exemplificar, apresentamos a expressão que determina a potência de um reator bidimensional retangular

$$\mathbb{P} = E \sum_{i=1}^{Nx} \sum_{j=1}^{Ny} \sum_{g=1}^G \nu_g \Sigma_{fg}^{(i,j)} \bar{\phi}_g^{(i,j)} \Delta x^{(i,j)} \Delta y^{(i,j)} \quad (3.81)$$

e de um reator unidimensional

$$\mathbb{P} = E \sum_{i=1}^{Nx} \sum_{g=1}^G \nu_g \Sigma_{fg}^{(i)} \bar{\phi}_g^{(i)} \Delta x^{(i)}, \quad (3.82)$$

onde E é a quantidade de energia que em média é gerada por fissão. Assim, a partir de uma potência prescrita, o sistema torna-se sobredeterminado e não homogêneo. Este novo sistema é resolvido por mínimos quadrados.

3.3 Método Iterativo de Fonte

Nesta subseção apresentamos um método Iterativo de Fonte que determina o autovalor dominante, K , e seu autovetor correspondente, $\bar{\bar{\Phi}}$, através de sucessivas iterações. O sistema matricial utilizado nesse método é um pouco diferente dos métodos anteriores, pois o autovalor K deve estar em evidência, não mais fazendo parte das matrizes. Deste modo, manipulamos as Eqs. (3.34) e (3.54) a fim de obter um problema de autovalor da seguinte forma

$$\mathbf{M}_* \bar{\bar{\Phi}} = \frac{1}{K} \mathbf{F} \bar{\bar{\Phi}}, \quad (3.83)$$

onde \mathbf{M}_* difere da matriz \mathbf{M} apenas nos blocos da diagonal principal, pois, neste caso, os termos que contém o K e as seções de choque de fissão estão do lado direito do sistema. Novamente para um problema bidimensional retangular com as aproximações das densidades de correntes por dois valores, os elementos dos blocos da diagonal principal da matriz \mathbf{M}_* são escritos como

$$m_{\kappa,g}^{(i,j)} = \delta_{\kappa,g} \left(\frac{\mathbf{l}_g^{(i,j)} + \mathbf{o}_g^{(i,j)}}{\Delta x^{(i,j)}} + \frac{\mathbf{n}_g^{(i,j)} + \mathbf{s}_g^{(i,j)}}{\Delta y^{(i,j)}} + \Sigma_{Rg}^{(i,j)} \right) - (1 - \delta_{\kappa,g}) \Sigma_{sg\kappa}^{(i,j)} \quad (3.84)$$

e para um problema unidimensional

$$m_{\kappa,g}^{(i)} = \delta_{\kappa,g} \left(\frac{\mathbf{l}_g^{(i)} + \mathbf{o}_g^{(i)}}{\Delta x^{(i)}} + \Sigma_{Rg}^{(i)} \right) - (1 - \delta_{\kappa,g}) \Sigma_{sg\kappa}^{(i)}. \quad (3.85)$$

Já a matriz \mathbf{F} é uma matriz diagonal de blocos, que para problemas bidimensionais

$$\mathbf{F} = \text{diag} \left(\mathbf{F}_d^{(1,1)}, \mathbf{F}_d^{(2,1)}, \dots, \mathbf{F}_d^{(Nx,Ny)} \right), \quad (3.86)$$

onde

$$\mathbf{F}_d^{(i,j)} = \begin{bmatrix} f_{1,1}^{(i,j)} & \cdots & f_{1,G}^{(i,j)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_{G,1}^{(i,j)} & \cdots & f_{G,G}^{(i,j)} \end{bmatrix}, \quad (3.87)$$

para $f_{\kappa,g}^{(i,j)} = \chi_{\kappa} \nu_g \Sigma_{fg}^{(i,j)}$. E para problemas unidimensionais

$$\mathbf{F} = \text{diag} \left(\mathbf{F}_d^{(1)}, \mathbf{F}_d^{(2)}, \dots, \mathbf{F}_d^{(Nx)} \right), \quad (3.88)$$

onde

$$\mathbf{F}_d^{(i)} = \begin{bmatrix} f_{1,1}^{(i)} & \cdots & f_{1,G}^{(i)} \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ f_{G,1}^{(i)} & \cdots & f_{G,G}^{(i)} \end{bmatrix}, \quad (3.89)$$

para $f_{\kappa,g}^{(i)} = \chi_{\kappa} \nu_g \Sigma_{fg}^{(i)}$.

A partir de estimativas iniciais para os fluxos médios, do lado direito da Eq. (3.83), e do K , o método iterativo proposto faz sucessivas iterações sempre atualizando o termo fonte da seguinte forma

$$\mathbf{M}_* \bar{\bar{\Phi}}^{[s]} = \frac{1}{K^{[s-1]}} \mathbf{F} \bar{\bar{\Phi}}^{[s-1]}. \quad (3.90)$$

O valor de K é atualizado a cada iteração da seguinte forma [31]

$$K^{[s]} = K^{[s-1]} \frac{\langle \mathbf{F} \bar{\bar{\Phi}}^{[s]}, \mathbf{F} \bar{\bar{\Phi}}^{[s]} \rangle}{\langle \mathbf{F} \bar{\bar{\Phi}}^{[s-1]}, \mathbf{F} \bar{\bar{\Phi}}^{[s]} \rangle}, \quad (3.91)$$

onde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ é o produto interno, que transforma um par de vetores (\mathbf{u}, \mathbf{v}) em um escalar $\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle$. Este processo iterativo deve iterar até atender algum critério de parada. Além de um critério para o K como apresentamos na Eq. (3.77), podemos também impor um critério de parada para os fluxos, da seguinte forma

$$\frac{\|\bar{\Phi}^{[s]} - \bar{\Phi}^{[s-1]}\|_2}{\|\bar{\Phi}^{[s]}\|_2} < \epsilon_2. \quad (3.92)$$

3.4 Resultados para problemas da criticalidade

A fim de testarmos os métodos para determinação da criticalidade e as propostas de aproximação das densidades de correntes, resolvemos seis problemas testes cujos resultados estão disponíveis na literatura. Os três primeiros são problemas unidimensionais, em que comparamos as quatro primeiras propostas de aproximar as densidades de correntes (dois valores), e os outros três problemas são bidimensionais, em que comparamos as aproximações das densidades de correntes por dois e quatro valores de fluxos médios. Os nossos resultados são gerados por um programa implementado em Fortran95 e executados em um computador com um processador Intel Core i5 – 8250U, 1,60GHz e 8GB de RAM. Além disso, utilizamos as subrotinas do LAPACK [9] para fazer a decomposição LU e para resolver os sistemas lineares.

Para o método da Bisseção tomamos estimativas iniciais do K em torno do resultado esperado (autovalor dominante) em que $f(K_1)$ e $f(K_2)$ tenham sinais contrários. Por outro lado, em todos os problemas adotamos para o método Iterativo de Fonte $K^{[1]} = 1$ e para o método da Secante $K^{[1]} = 1,3$ e $K^{[2]} = 1,2$. Além disto, as estimativas iniciais para os fluxos médios do método Iterativo de Fonte utilizamos $\bar{\Phi}^{[1]} = 1$. Em todos os problemas testes adotamos os seguintes valores nos critérios de parada: $\epsilon_0 = 10^{-10}$, $\epsilon_1 = 10^{-10}$ e $\epsilon_2 = 10^{-10}$. Cabe ressaltar

que os métodos da Bissecção e Secante utilizam os dois primeiros critérios e o método Iterativo de Fonte utiliza os dois últimos critérios de parada. Além disto, nas tabelas a seguir em que apresentamos os parâmetros nucleares, a sigla *Mat.* representa a região material dos parâmetros.

3.4.1 Problema Teste I

Este primeiro problema teste foi proposto por Silva, Martinez e Gonçalves (2012) [84]. O problema é formado por um meio heterogêneo com dois tipos de materiais, um combustível, $0 \leq x \leq 30$ (cm), e outro refletor $30 \leq x \leq 50$ (cm), como podemos ver na Fig. 3.2.

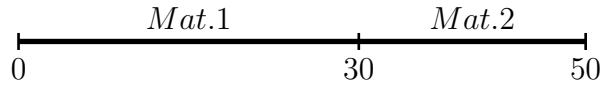


Figura 3.2: Geometria do Problema Teste I.

As condições de contorno impostas são do tipo reflexivas no contorno oeste e fluxos nulos no contorno leste, respectivamente,

$$\left. \frac{d}{dx} \phi_g(x) \right|_{x=0} = 0, \quad \left. \phi_g(x) \right|_{x=50} = 0. \quad (3.93)$$

Na Tabela 3.2 apresentamos os parâmetros nucleares do problema.

Tabela 3.2: Parâmetros nucleares para Problema Teste I.

<i>Mat.</i>	<i>g</i>	D_g (cm)	Σ_{Rg} (cm ⁻¹)	$\nu_g \Sigma_{fg}$ (cm ⁻¹)	Σ_{sg2} (cm ⁻¹)	χ_g
1	1	1,438000	0,029350	0,000242	0,01563	1,0
1	2	0,397600	0,104900	0,155618	0,00000	0,0
2	1	1,871420	0,035411	0,000000	0,03434	1,0
2	2	0,283409	0,031579	0,000000	0,00000	0,0

Fonte: Silva, Martinez e Gonçalves (2012) [84].

No método da Bissecção utilizamos como estimativa inicial para o K : $K_1 = 1,0$ e $K_2 = 0,6$ e como K de comparação utilizamos $K = 0,7346988$ determinado por Silva, Martinez e Gonçalves (2012) [84].

Tabela 3.3: Resultados do K para o Problema Teste I.

Método	Proposta	$\Delta x=1\text{cm}$	t(s)	$\Delta x=0,5\text{cm}$	t(s)	$\Delta x=0,25\text{cm}$	t(s)
Bis.	1	0,74923	0,011	0,74970	0,028	0,74982	0,074
	2	0,73548	0,011	0,73526	0,028	0,73510	0,080
	3	0,73470	0,011	0,73486	0,036	0,73490	0,076
	4	0,73471	0,013	0,73487	0,025	0,73491	0,075
Sec.	1	0,74923	0,006	0,74970	0,008	0,74982	0,020
	2	0,73548	0,006	0,73526	0,016	0,73510	0,028
	3	0,73470	0,004	0,73486	0,008	0,73490	0,020
	4	0,73471	0,004	0,73487	0,010	0,73491	0,020
I.F.	1	0,74923	0,008	0,74970	0,023	0,74982	0,091
	2	0,73548	0,007	0,73526	0,021	0,73510	0,082
	3	0,73470	0,007	0,73486	0,023	0,73490	0,081
	4	0,73471	0,007	0,73487	0,021	0,73491	0,081

Na Tabela 3.3 apresentamos os nossos resultados para este problema teste. A primeira observação que fazemos é com relação a discrepância dos resultados da Proposta 1, essa característica se repete nos demais problemas teste. Este fato ocorre pois temos uma descontinuidade nas interfaces devido à aproximação da densidade de corrente, conforme já tínhamos indicado na formulação do problema. Além disto, percebemos que os três métodos obtiveram pelo menos cinco dígitos de concordância, quando comparamos as mesmas propostas de aproximação das correntes. Entretanto, o método da Secante leva menos tempo computacional para obtê-los. Ademais, os nossos resultados das Propostas 2, 3 e 4 concordam em até três dígitos significativos com o resultado apresentado por Silva, Martinez e Gonçalves (2012) [84]. Entretanto, na ref. [84] não apresenta maiores detalhes como, por exemplo, tamanho da malha utilizada. Além do mais, se compararmos com os nossos resultados para $\Delta x = 1\text{cm}$ das Propostas 3 e 4 a concordância aumenta para até quatro dígitos significativos.

3.4.2 Problema Teste II

Este segundo problema teste foi proposto por Thomé, Carvalho e Alvim (1997) [90]. O problema é formado por um meio heterogêneo com três tipos de materiais dispostos em uma placa de 105cm, como podemos ver na Fig. 3.3.

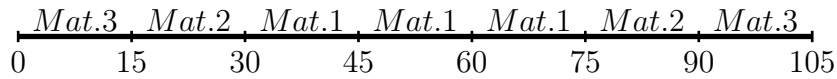


Figura 3.3: Geometria do Problema Teste II.

As condições de contorno impostas são do tipo fluxos nulos em ambos contornos,

$$\phi_g(x) \Big|_{x=0} = 0, \quad \phi_g(x) \Big|_{x=105} = 0. \quad (3.94)$$

Na Tabela 3.4 apresentamos os parâmetros nucleares para os três tipos de materiais.

Tabela 3.4: Parâmetros nucleares para Problema Teste II.

<i>Mat.</i>	<i>g</i>	$D_g(\text{cm})$	$\Sigma_{Rg}(\text{cm}^{-1})$	$\nu_g \Sigma_{fg}(\text{cm}^{-1})$	$\Sigma_{sg2}(\text{cm}^{-1})$	χ_g
1	1	1,6562	0,02299	0,005607	0,01391	1,0
1	2	0,4749	0,07637	0,116780	0,00000	0,0
2	1	1,6617	0,02293	0,006182	0,01363	1,0
2	2	0,4740	0,08547	0,135300	0,00000	0,0
3	1	0,6702	0,09213	0,000000	0,09084	1,0
3	2	0,1509	0,02072	0,000000	0,00000	0,0

Fonte: Thomé, Carvalho e Alvim (1997) [90].

No método da Bissecção utilizamos como estimativa inicial para o K : $K_1 = 1,2$ e $K_2 = 0,95$ e adotamos como resultado de comparação o K apresentado por Thomé, Carvalho e Alvim (1997) [90] que é $K = 1,1051$.

Tabela 3.5: Resultados do K para o Problema Teste II.

Método	Proposta	$\Delta x=1\text{cm}$	t(s)	$\Delta x=0,5\text{cm}$	t(s)	$\Delta x=0,25\text{cm}$	t(s)
Bis.	1	1,07135	0,024	1,07184	0,075	1,07197	0,325
	2	1,10364	0,025	1,10398	0,076	1,10406	0,342
	3	1,10312	0,023	1,10383	0,075	1,10402	0,282
	4	1,10398	0,023	1,10429	0,073	1,10425	0,320
Sec.	1	1,07135	0,010	1,07184	0,030	1,07197	0,098
	2	1,10364	0,011	1,10398	0,028	1,10406	0,094
	3	1,10312	0,010	1,10383	0,027	1,10402	0,096
	4	1,10398	0,009	1,10429	0,028	1,10425	0,091
I.F.	1	1,07135	0,027	1,07184	0,102	1,07197	0,287
	2	1,10364	0,044	1,10398	0,184	1,10406	0,538
	3	1,10312	0,031	1,10383	0,102	1,10402	0,302
	4	1,10398	0,029	1,10429	0,104	1,10425	0,309

Na Tabela 3.5 percebemos novamente a discordância dos resultados da Proposta 1 e que os resultados obtidos nas Propostas 2, 3 e 4 concordam em até três dígitos significativos com os resultados apresentados por Thomé, Carvalho e Alvim (1997) [90]. Entretanto, a ref. [90] não apresenta se este é seu resultado ótimo, nem tamanho de malha ou outro critério, para analisarmos porque não temos mais dígitos de concordância. Além disto, podemos perceber que os três métodos propostos obtiveram os mesmos seis primeiros dígitos e que novamente o método da Secante obteve um grande ganho computacional perante os outros dois métodos.

3.4.3 Problema Teste III

Este problema teste é um problema clássico considerado na literatura como *Benchmark* BSS-6 [7, 76, 79]. Consideramos um meio heterogêneo com três tipos de materiais dispostos em uma placa de 240cm, como podemos ver na Fig. 3.4.

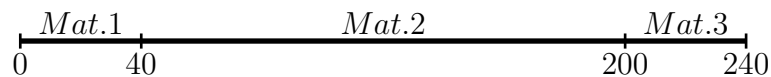


Figura 3.4: Geometria do Problema Teste III.

As condições de contorno impostas para esse problema são de fluxos nulos em ambos contornos,

$$\phi_g(x) \Big|_{x=0} = 0, \quad \phi_g(x) \Big|_{x=240} = 0. \quad (3.95)$$

Na Tabela 3.6 apresentamos os parâmetros nucleares para os três tipos de materiais.

Tabela 3.6: Parâmetros nucleares para Problema Teste III.

<i>Mat.</i>	<i>g</i>	$D_g(\text{cm})$	$\Sigma_{Rg}(\text{cm}^{-1})$	$\nu_g \Sigma_{fg}(\text{cm}^{-1})$	$\Sigma_{sg2}(\text{cm}^{-1})$	χ_g
1	1	1,5	0,026	0,010	0,015	1,0
1	2	0,5	0,180	0,200	0,000	0,0
2	1	1,0	0,020	0,005	0,010	1,0
2	2	0,5	0,080	0,099	0,000	0,0
3	1	1,5	0,026	0,010	0,015	1,0
3	2	0,5	0,180	0,200	0,000	0,0

Fonte: Pollard (1977) [7].

Inicializamos o método da Bissecção com as seguintes estimativas iniciais para o K : $K_1 = 1,1$ e $K_2 = 0,901$, e adotamos como resultado de referência $K = 0,90156$ apresentado por Pollard (1977) [76].

Tabela 3.7: Resultados do K para o Problema Teste III.

Método	Proposta	$\Delta x=1\text{cm}$	t(s)	$\Delta x=0,5\text{cm}$	t(s)	$\Delta x=0,25\text{cm}$	t(s)
Bis.	1	-	-	-	-	-	-
	2	0,901642	0,100	0,901608	0,330	0,901599	2,134
	3	0,901632	0,093	0,901606	0,373	0,901599	2,156
	4	0,901610	0,087	0,901594	0,338	0,901593	2,249
Sec.	1	0,892037	0,100	0,891973	0,296	0,891956	1,889
	2	0,901642	0,095	0,901608	0,304	0,901599	1,904
	3	0,901632	0,085	0,901606	0,300	0,901599	1,875
	4	0,901610	0,078	0,901595	0,320	0,901593	1,893
I.F.	1	0,892037	0,533	0,891973	1,958	0,891956	7,848
	2	-	-	-	-	-	-
	3	0,901632	0,492	0,901606	1,780	0,901599	6,980
	4	0,901610	0,480	0,901595	1,765	0,901593	7,006

Na Tabela 3.7 há duas linhas em que não apresentamos os resultados. A linha referente ao método da Bissecção e Proposta 1, as estimativa iniciais para este problema não intercalam nenhum autovalor. Este fato ocorre pois a Proposta 1 diverge das demais propostas, como podemos ver nos resultados dos demais métodos. Por outro lado, a linha referente ao método Iterativo de Fonte e Proposta 2, o código não convergiu até duas mil iterações, limite máximo proposto por nodos. Nos problemas testados, os critérios de parada são atendidos em menos de trezentas iterações. Outra informação importante a ser destacada é que o método da Bissecção demanda tempos computacionais próximo aos do método da Secante, isto ocorre pois a estimativa inicial $K = 0,901$ do método da Bissecção é muito próximo do autovalor dominante. Essa estimativa é necessária pois o segundo maior autovalor ($K = 0,900196$) é muito próximo do autovalor dominante. Assim, se adotamos um intervalo maior para as estimativas iniciais, o método pode convergir para outro autovalor ou não atender a hipótese do método, $f(K^{[1]}) \cdot f(K^{[2]}) < 0$. Por estes motivos, ao aplicar o método da Bissecção para problemas de autovalor dominante podemos enfrentar grandes dificuldades.

Ainda na Tabela 3.7, podemos observar que os três métodos obtiveram pelo menos cinco dígitos de concordância quando comparadas as mesmas propostas de aproximação das densidades de corrente. Ademais, os resultados obtidos nas Propostas 2, 3 e 4 concordam em até quatro dígitos com a referência adotada, o que sugere uma boa concordância para cálculos globais em física de reatores.

Além do autovalor dominante K , neste problema teste de referência, queremos também comparar os resultados das frações de potência e dos fluxos escalares de nêutrons. As frações de potência, ou seja, o percentual de potência gerado por cada uma das três regiões materiais do problema, apresentadas por Pollard (1977) [76] são 0,2790 para a primeira e a terceira região e 0,4421 para a segunda região. Na Tabela 3.8, apresentamos as frações de potência encontradas pelas metodologias propostas neste trabalho, quando utilizamos $\Delta x = 0,25\text{cm}$. Além disto,

apresentamos os erros relativos percentuais com relação aos valores da ref. [76], que estão abaixo das frações de potência.

Tabela 3.8: Frações de potência por região do Problema Teste III.

Método	Região	Proposta 1	Proposta 2	Proposta 3	Proposta 4
Bis.	1	-	0,27267 (2,27%)	0,27886 (0,05%)	0,27882 (0,06%)
	2	-	0,44228 (0,04%)	0,44229 (0,04%)	0,44236 (0,06%)
	3	-	0,28505 (2,17%)	0,27886 (0,05%)	0,27882 (0,06%)
Sec.	1	0,26731 (4,19%)	0,27267 (2,27%)	0,27886 (0,05%)	0,27882 (0,06%)
	2	0,46538 (5,27%)	0,44228 (0,04%)	0,44229 (0,04%)	0,44236 (0,06%)
	3	0,26731 (4,19%)	0,28505 (2,17%)	0,27886 (0,05%)	0,27882 (0,06%)
I.F.	1	0,26731 (4,19%)	-	0,27885 (0,05%)	0,27882 (0,06%)
	2	0,46539 (5,27%)	-	0,44230 (0,05%)	0,44237 (0,06%)
	3	0,26731 (4,19%)	-	0,27885 (0,05%)	0,27882 (0,06%)

O primeiro aspecto que destacamos dos resultados presentes na Tabela 3.8 é a não simetria das frações de potência obtidos pela Proposta 2. Como o problema é simétrico, os fluxos escalares também devem ser, por consequência, as frações de potência. Este fato indica uma certa deficiência da Proposta 2 na aproximação das densidades de correntes. Além disso, podemos observar que os resultados das Propostas 3 e 4 possuem boa concordância entre si e com a referência adotada.

Na Tabela 3.9 e na Figura 3.5 apresentamos os fluxos escalares de nêutrons do Problema Teste III. Cabe ressaltar que esses fluxos são médios para cada nodo, onde a primeira coluna da tabela indica o intervalo do nodo. Esses resultados foram obtidos através do método da Secante e Proposta 4 com $\Delta x = 0,25\text{cm}$.

Tabela 3.9: Fluxos médios de nêutrons dos grupos rápido e térmico do Problema Teste III.

$x \in$	Fluxo Rápido ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)	Fluxo Térmico ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)
[0; 0,25]	0,006004	0,000497
[20; 20,25]	0,822964	0,068144
[40; 40,25]	0,930273	0,092363
[60; 60,25]	0,560528	0,070355
[80; 80,25]	0,360045	0,045195
[100; 100,25]	0,258350	0,032430
[120; 120,25]	0,227535	0,028562
[140; 140,25]	0,259147	0,032530
[160; 160,25]	0,361860	0,045423
[180; 180,25]	0,563857	0,070772
[200; 200,25]	0,936238	0,090619
[220; 220,25]	0,816083	0,067574
[239,75; 240,00]	0,006004	0,000497

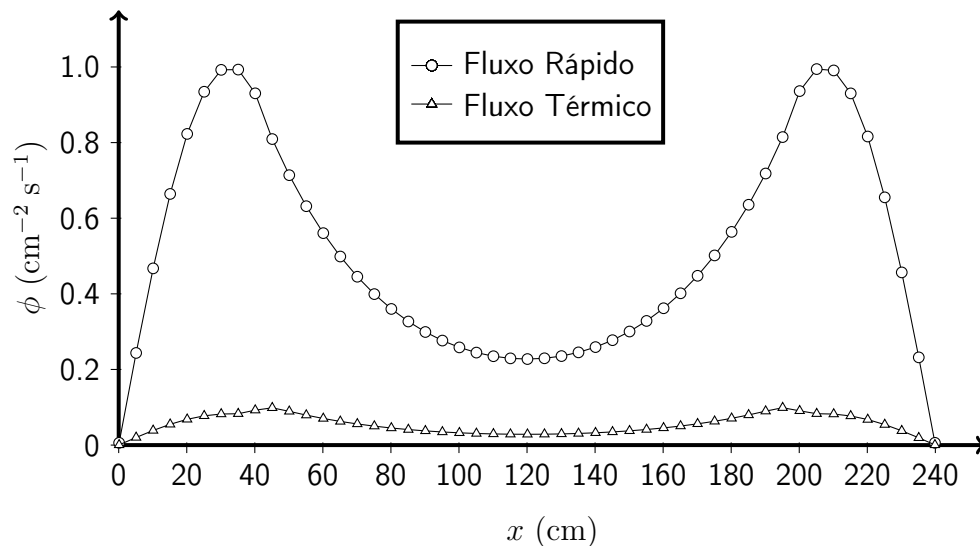


Figura 3.5: Ilustração dos fluxos médios de nêutrons dos grupos rápido e térmico do Problema Teste III.

Com estes três primeiros problemas percebemos a dificuldade de aplicar o método da Bissecção para problemas de autovalor dominante. Dessa forma, para os próximos problemas testes descartamos este método. Além disto, utilizaremos apenas as Propostas 4 e 5, pois queremos comparar a influência das diferentes ordens da aproximação das derivadas presentes nas densidades de correntes. Assim, nas tabelas e gráficos a seguir onde apresentamos nossos resultados, as siglas Sec.2, Sec.4, I.F.2 e I.F.4 representam os métodos utilizados e a forma das aproximações das derivadas nas densidades de correntes, 2 ou 4 valores, que são as Propostas 4 e 5, respectivamente.

3.4.4 Problema Teste IV

Este primeiro problema teste bidimensional é composto por um meio homogêneo de $200\text{cm} \times 200\text{cm}$ e condições de contorno de fluxo nulo em todo seu contorno, disponível na ref. [1]. Assim, devido às condições de simetria do problema, redefinimos seu domínio em um quarto do problema original (linha pontilhada na Figura 3.6), ou seja, $100\text{cm} \times 100\text{cm}$. Desta forma, as novas condições de contorno são do tipos reflexivas nos contornos norte e leste e de fluxos nulos nos contornos sul e oeste.

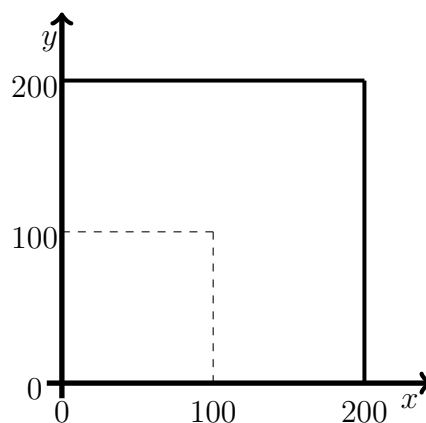


Figura 3.6: Geometria do Problema Teste IV.

Na Tabela 3.10 apresentamos os parâmetros nucleares do problema proposto.

Tabela 3.10: Parâmetros nucleares para o Problema Teste IV.

<i>Mat.</i>	<i>g</i>	$D_g(\text{cm})$	$\Sigma_{ag}(\text{cm}^{-1})$	$\nu_g \Sigma_{fg}(\text{cm}^{-1})$	$\Sigma_{sg2}(\text{cm}^{-1})$	χ_g
1	1	1,35	0,0013820	0,00058322	0,0023	1,0000
1	2	1,08	0,0056869	0,01031480	0,0000	0,0000

Fonte: Aboanber e Nahla (2006) [1].

O trabalho de Aboanber e Nahla (2006) [1] está focado em problemas de cinética, assim, não apresentam valores para o problema da criticalidade. Entretanto, segundo Jagannathan (1985) [51], o autovalor dominante analítico para este problema é $K=1,011329$. Na Tabela 3.11, apresentamos os nossos resultados para este problema teste.

Tabela 3.11: Resultados do K para o Problema Teste IV.

Nodos (cm)	Sec.2	t(s)	Sec.4	t(s)	I.F.2	t(s)	I.F.4	t(s)
20×20	1,01322	0,001	1,01350	0,001	1,01322	0,001	1,01350	0,001
10×10	1,01180	0,013	1,01180	0,012	1,01180	0,013	1,01180	0,009
5×5	1,01145	0,160	1,01144	0,162	1,01145	0,159	1,01144	0,160

Na Tabela 3.11, percebemos que os nossos resultados tem uma excelente concordância entre si. Essa concordância é tanto entre os dois métodos como entre as duas formas de aproximar as densidades de correntes nas interfaces dos nodos. Com relação ao autovalor dominante analítico, observamos uma concordância de até quatro dígitos significativos, o que sugere uma boa concordância para cálculos globais em física de reatores. Além dos autovalores, na Tabela 3.11, observamos os tempos necessários para a execução dos códigos, nos quais percebemos um custo computacional semelhante entre os dois métodos.

Além do autovalor dominante, o código gera o seu respectivo autovetor fluxo médio, que é a condição inicial para o problema da cinética. Assim, nas Tabelas 3.12 e 3.13, apresentamos os fluxos médios dos grupos 1 e 2 obtidos em uma malha

5cm \times 5cm. Esses fluxos são dos nodos em que $y \in [45,50]$ e x conforme indicado nas tabelas. Nessas tabelas, observamos que, os métodos da Secante e Iterativo de Fonte, geram resultados com pelo menos cinco dígitos de concordância. Quando comparamos os resultados entre as duas propostas de aproximação das densidades de correntes, temos uma diferença inferior a 8×10^{-5} .

Tabela 3.12: Fluxos médios de nêutrons do grupo 1 do Problema Teste IV nos nodos $y \in [45,50]$.

$x \in$	Sec. 2 ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)	Sec. 4 ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)	I.F. 2 ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)	I.F. 4 ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)
[0, 5]	0,02887	0,02889	0,02887	0,02889
[5, 10]	0,08644	0,08649	0,08644	0,08649
[10, 15]	0,14348	0,14354	0,14348	0,14354
[15, 20]	0,19963	0,19970	0,19963	0,19970
[20, 25]	0,25455	0,25463	0,25455	0,25463
[25, 30]	0,30791	0,30798	0,30791	0,30798
[30, 35]	0,35936	0,35944	0,35936	0,35944
[35, 40]	0,40860	0,40867	0,40860	0,40867
[40, 45]	0,45532	0,45538	0,45532	0,45538
[45, 50]	0,49923	0,49929	0,49923	0,49929
[50, 55]	0,54006	0,54011	0,54006	0,54011
[55, 60]	0,57757	0,57761	0,57757	0,57761
[60, 65]	0,61151	0,61154	0,61151	0,61154
[65, 70]	0,64168	0,64171	0,64168	0,64171
[70, 75]	0,66790	0,66792	0,66790	0,66792
[75, 80]	0,69000	0,69001	0,69000	0,69001
[80, 85]	0,70784	0,70785	0,70784	0,70785
[85, 90]	0,72132	0,72132	0,72132	0,72132
[90, 95]	0,73036	0,73035	0,73036	0,73035
[95, 100]	0,73489	0,73489	0,73489	0,73489

Tabela 3.13: Fluxos médios de nêutrons do grupo 2 do Problema Teste IV nos nodos $y \in [45,50]$.

$x \in$	Sec. 2 ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)	Sec. 4 ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)	I.F. 2 ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)	I.F. 4 ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)
[0, 5]	0,01068	0,01068	0,01068	0,01068
[5, 10]	0,03197	0,03198	0,03197	0,03198
[10, 15]	0,05306	0,05308	0,05306	0,05308
[15, 20]	0,07382	0,07385	0,07382	0,07385
[20, 25]	0,09413	0,09416	0,09413	0,09416
[25, 30]	0,11386	0,11389	0,11386	0,11389
[30, 35]	0,13289	0,13292	0,13289	0,13292
[35, 40]	0,15110	0,15113	0,15110	0,15113
[40, 45]	0,16838	0,16840	0,16838	0,16840
[45, 50]	0,18461	0,18464	0,18461	0,18464
[50, 55]	0,19971	0,19973	0,19971	0,19973
[55, 60]	0,21358	0,21360	0,21358	0,21360
[60, 65]	0,22614	0,22615	0,22614	0,22615
[65, 70]	0,23729	0,23730	0,23729	0,23730
[70, 75]	0,24699	0,24699	0,24699	0,24699
[75, 80]	0,25516	0,25516	0,25516	0,25516
[80, 85]	0,26176	0,26176	0,26176	0,26176
[85, 90]	0,26675	0,26674	0,26675	0,26674
[90, 95]	0,27009	0,27008	0,27009	0,27008
[95, 100]	0,27176	0,27176	0,27176	0,27176

3.4.5 Problema Teste V

O segundo problema teste bidimensional que propomos é o *benchmark* acadêmico ENE-6103 [44]. É um problema de dois grupos de energia em que o domínio é uma região quadrada de 350cm composta por dois tipos de materiais, conforme vemos na Figura 3.7.

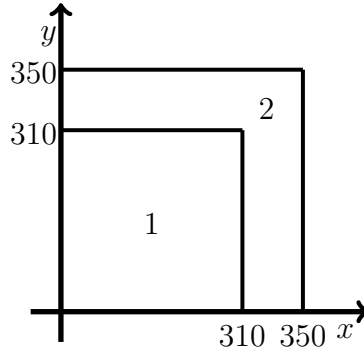


Figura 3.7: Geometria do Problema Teste V.

As condições de contorno impostas para este problema são de fluxo nulo nos contornos norte e leste, enquanto que nos contornos sul e oeste são condições reflexivas. Na Tabela 3.14, apresentamos os parâmetros nucleares para os dois tipos de materiais.

Tabela 3.14: Parâmetros nucleares para o Problema Teste V.

$Mat.$	g	$D_g(\text{cm})$	$\Sigma_{Rg}(\text{cm}^{-1})$	$\nu_g \Sigma_{fg}(\text{cm}^{-1})$	$\Sigma_{sg2}(\text{cm}^{-1})$	χ_g
1	1	1,2640	$8,154 \times 10^{-3}$	0,0000	$7,368 \times 10^{-3}$	1,0000
1	2	0,9328	$4,100 \times 10^{-3}$	$4,562 \times 10^{-3}$	0,00000	0,0000
2	1	1,3100	$1,018 \times 10^{-2}$	0,0000	$1,018 \times 10^{-2}$	1,0000
2	2	0,8695	$2,117 \times 10^{-4}$	0,0000	0,00000	0,0000

Fonte: Hébert (2008) [44].

Na Tabela 3.15, apresentamos as diferentes configurações de malhas utilizadas neste problema teste. Essas malhas são definidas dentro de quatro sub-regiões: Sub-Região 1: $[0,310] \times [0,310]$; Sub-Região 2: $[310,350] \times [0,310]$; Sub-Região 3: $[0,310] \times [310,350]$ e Sub-Região 4: $[310,350] \times [310,350]$.

Tabela 3.15: Dimensões das malhas (cm) para o Problema Teste V.

Sub-Região	Malha 1	Malha 2	Malha 3	Malha 4
1	310×310	62×62	31×31	10×10
2	40×310	40×62	$10 \times 15,5$	10×10
3	310×40	62×40	$15,5 \times 10$	10×10
4	40×40	40×40	10×10	10×10

Para fins de comparação, na Tabela 3.16, exibimos os resultados do K obtidos por Hébert (2008)[44] e pelo código QUANDRY, disponíveis na ref. [44]. Hébert (2008) desenvolveu uma metodologia nodal em que assume aproximações constantes ou quadráticas para as densidades de correntes nos contornos dos nodos.

Tabela 3.16: Resultados do K apresentados por Hébert (2008)[44].

Malha	Hébert [44] (Constante)	Hébert [44] (Quadrática)	Hébert [44] (QUANDRY)
1	0,991733	0,990257	0,990410
2	0,990186	0,990106	0,990106

Na Tabela 3.17, apresentamos os nossos resultados para este problema teste. Lembramos que a metodologia que utiliza as aproximações das densidades de correntes com quatro valores de fluxos médios, está restrita para malhas igualmente espaçadas.

Tabela 3.17: Resultados do K para o Problema Teste V.

Malha	Sec. 2	t(s)	Sec. 4	t(s)	I.F 2	t(s)	I.F. 4	t(s)
1	0,994670	10^{-4}	-	-	0,994670	10^{-4}	-	-
2	0,990329	0,003	-	-	0,990329	0,009	-	-
3	0,990089	0,588	-	-	0,990089	1,209	-	-
4	0,990075	2,785	0,990078	2,725	0,990075	5,328	0,990078	5,247

Ao observar os nossos resultados, na Tabela 3.17, e os resultados apresentados pela ref. [44], na Tabela 3.16, percebemos uma concordância de três dígitos significativos. Entretanto, queremos destacar que, para as malhas testadas, os resultados da ref. [44], ainda não fixaram o quarto dígito. Assim, provavelmente, para malhas mais finas a concordância com os nossos resultados pode aumentar.

Além disso, observamos que os métodos da Secante e Iterativo de Fonte concordam em pelo menos seis dígitos significativos, o que sugere uma excelente concordância. No entanto, na questão do custo computacional, o método da Secante obteve um ganho significativo. Por fim, destacamos que as duas propostas de aproximação das densidades de correntes obtiveram resultados semelhantes, tanto na precisão quanto nos tempos computacionais.

Neste problema teste não temos os parâmetros para desenvolver os problemas da cinética, mesmo assim, exibimos os fluxos médios através de gráficos. Na Figura 3.8, apresentamos os gráficos dos fluxos rápidos obtidos pelos dois métodos propostos e pelas duas aproximações das densidades de correntes para uma malha de $\Delta x = \Delta y = 10\text{cm}$. Esses fluxos são dos nodos em que $y \in [0,10]$ (linha de maior amplitude no gráfico) e dos nodos em que $y \in [180,190]$ (linha de menor amplitude). Nessa figura podemos perceber a concordância dos valores dos fluxos entre as quatro diferentes propostas.

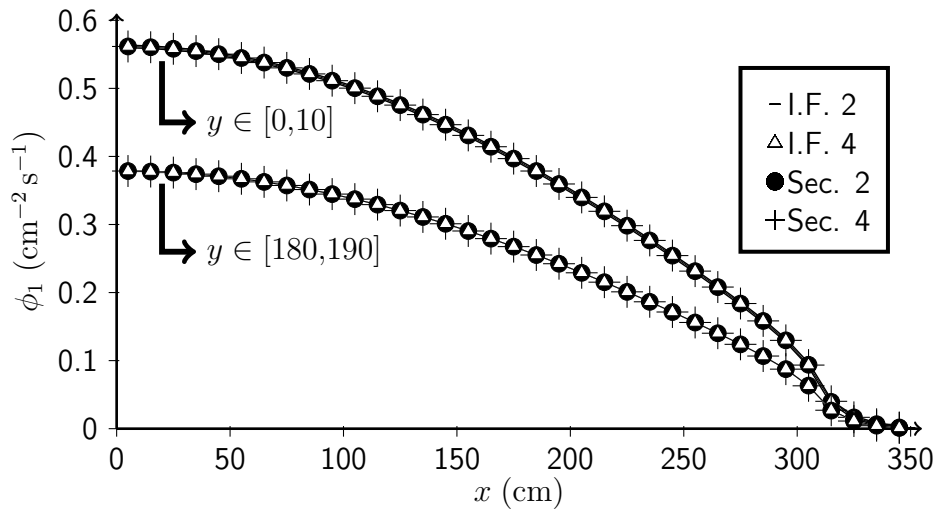


Figura 3.8: Ilustração dos fluxos médios de nêutrons do grupo rápido do Problema Teste V.

3.4.6 Problema Teste VI

O terceiro problema teste bidimensional que propomos é o *benchmark* transiente TWIGL [85]. É um problema de dois grupos de energia em que o domínio é uma região quadrada de 80cm composta por três tipos de materiais, conforme vemos na Figura 3.9.

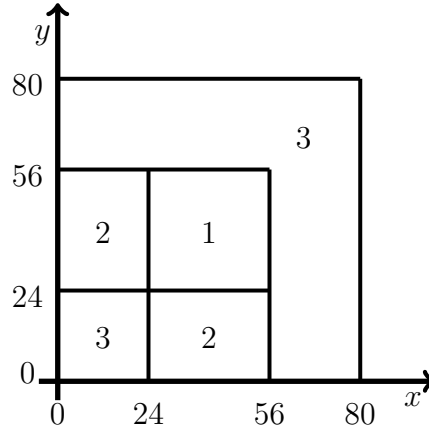


Figura 3.9: Geometria do Problema Teste VI.

As condições de contorno impostas para este problema são de fluxo nulo nos contornos norte e leste, enquanto que nos contornos sul e oeste são condições reflexivas. Na Tabela 3.18, apresentamos os parâmetros nucleares, destacamos que, no caso estacionário, os Materiais 1 e 2 são idênticos.

Tabela 3.18: Parâmetros nucleares para o Problema Teste VI.

<i>Mat.</i>	<i>g</i>	$D_g(\text{cm})$	$\Sigma_{ag}(\text{cm}^{-1})$	$\nu_g \Sigma_{fg}(\text{cm}^{-1})$	$\Sigma_{sg2}(\text{cm}^{-1})$	χ_g
1 e 2	1	1,4	0,010	0,007	0,01	1,0000
1 e 2	2	0,4	0,150	0,200	0,00	0,0000
3	1	1,3	0,008	0,003	0,01	1,0000
3	2	0,5	0,050	0,060	0,00	0,0000

Fonte: Smith (1979) [85].

Na Tabela 3.19, apresentamos as diferentes configurações de malhas utilizadas neste problema teste. Essas malhas são definidas dentro de nove sub-regiões: Sub-Região 1: $[0,24] \times [0,24]$; Sub-Região 2: $[24,56] \times [0,24]$; Sub-Região 3: $[56,80] \times [0,24]$; Sub-Região 4: $[0,24] \times [24,56]$; Sub-Região 5: $[24,56] \times [24,56]$; Sub-Região 6: $[56,80] \times [24,56]$; Sub-Região 7: $[0,24] \times [56,80]$; Sub-Região 8: $[24,56] \times [56,80]$ e Sub-Região 9: $[56,80] \times [56,80]$.

Tabela 3.19: Dimensões das malhas (cm) para o Problema Teste VI.

Sub-Região	Malha 1	Malha 2	Malha 3	Malha 4
1	12×12	8×8	4×4	2×2
2	16×12	8×8	4×4	2×2
3	12×12	8×8	4×4	2×2
4	12×16	8×8	4×4	2×2
5	16×16	8×8	4×4	2×2
6	12×16	8×8	4×4	2×2
7	12×12	8×8	4×4	2×2
8	16×12	8×8	4×4	2×2
9	12×12	8×8	4×4	2×2

Para fins de comparação, na Tabela 3.20, exibimos os resultados do K obtidos por Smith (1979) [85] e Song e Kim (1993) [86] e, na Tabela 3.21, os nossos resultados para este problema teste.

Tabela 3.20: Resultados do K para a comparação do Problema Teste VI.

Malha	Smith (1979) [85]	Song; Kim (1993) [86]
1	0,91323	-
2	0,91321	0,91315

Tabela 3.21: Resultados do K para o Problema Teste VI.

Malha	Sec.2	t(s)	Sec.4	t(s)	I.F.2	t(s)	I.F.4	t(s)
2	0,91347	0,023	0,91334	0,022	0,91347	0,063	0,91334	0,065
3	0,91301	0,444	0,91302	0,429	0,91301	0,634	0,91302	0,616
4	0,91311	10,710	0,91313	10,745	0,91311	9,726	0,91313	9,790

Na Tabela 3.21, novamente observamos uma excelente concordância entre os métodos da Secante e Iterativo de Fonte. Entretanto, neste problema teste, os tempos computacionais do método Iterativo de Fonte são menores no caso da Malha 4, diferentemente, das outras malhas e dos casos testes verificados até aqui. Com relação as diferentes aproximações das densidades de corrente, percebemos uma concordância de até quatro dígitos, precisão semelhante à ref. [86]. No entanto, com relação aos resultados de Smith (1979) [85], temos até três dígitos que é uma boa concordância.

Além do autovalor dominante, o código gera o seu respectivo autovetor fluxo médio, que é a condição inicial para o problema da cinética. Deste modo, nas Tabelas 3.22 e 3.23, apresentamos os fluxos médios dos grupos 1 e 2 obtidos na Malha 4 ($2\text{cm} \times 2\text{cm}$). Esses fluxos são dos nodos em que $y \in [0,2]$ e x conforme indicado nas tabelas. Nessas tabelas, observamos que, os métodos da Secante e Iterativo de Fonte, geram resultados com pelo menos cinco dígitos de concordância. Quando comparamos os resultados entre as duas propostas de aproximação das densidades de correntes, temos uma diferença inferior à 5×10^{-3} .

Tabela 3.22: Fluxos médios de nêutrons do grupo 1 do Problema Teste VI nos nodos $y \in [0,2]$.

$x \in$	Sec. 2 ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)	Sec. 4 ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)	I.F. 2 ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)	I.F. 4 ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)
[0, 2]	0,75421	0,75437	0,75421	0,75437
[4, 6]	0,75924	0,75940	0,75924	0,75940
[8, 10]	0,77136	0,77154	0,77136	0,77154
[12, 14]	0,79163	0,79183	0,79163	0,79183
[16, 18]	0,82251	0,82276	0,82251	0,82276
[20, 22]	0,87050	0,87096	0,87050	0,87096
[24, 26]	0,95398	0,95357	0,95398	0,95357
[28, 30]	0,99348	0,99348	0,99348	0,99348
[32, 34]	0,99983	0,99983	0,99983	0,99983
[36, 38]	0,98099	0,98101	0,98099	0,98101
[40, 42]	0,93908	0,93913	0,93908	0,93913
[44, 46]	0,87587	0,87597	0,87587	0,87597
[48, 50]	0,79325	0,79341	0,79325	0,79341
[52, 54]	0,69225	0,69246	0,69225	0,69246
[56, 58]	0,56034	0,56100	0,56034	0,56100
[60, 62]	0,43679	0,43736	0,43679	0,43736
[64, 66]	0,33202	0,33264	0,33202	0,33264
[68, 70]	0,23714	0,23795	0,23714	0,23795
[72, 74]	0,14827	0,14954	0,14827	0,14954
[76, 78]	0,06293	0,06569	0,06293	0,06569

Tabela 3.23: Fluxos médios de nêutrons do grupo 2 do Problema Teste VI nos nodos $y \in [0,2]$.

$x \in$	Sec. 2 ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)	Sec. 4 ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)	I.F. 2 ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)	I.F. 4 ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)
[0, 2]	0,15239	0,15243	0,15239	0,15243
[4, 6]	0,15332	0,15336	0,15332	0,15336
[8, 10]	0,15537	0,15542	0,15537	0,15542
[12, 14]	0,15798	0,15805	0,15798	0,15805
[16, 18]	0,15875	0,15879	0,15875	0,15879
[20, 22]	0,14822	0,14795	0,14822	0,14795
[24, 26]	0,08655	0,08710	0,08655	0,08710
[28, 30]	0,06818	0,06811	0,06818	0,06811
[32, 34]	0,06659	0,06657	0,06659	0,06657
[36, 38]	0,06515	0,06514	0,06515	0,06514
[40, 42]	0,06235	0,06235	0,06235	0,06235
[44, 46]	0,05818	0,05818	0,05818	0,05818
[48, 50]	0,05304	0,05303	0,05304	0,05303
[52, 54]	0,04990	0,04994	0,04990	0,04994
[56, 58]	0,07600	0,07548	0,07600	0,07548
[60, 62]	0,07822	0,07828	0,07822	0,07828
[64, 66]	0,06440	0,06454	0,06440	0,06454
[68, 70]	0,04721	0,04738	0,04721	0,04738
[72, 74]	0,02978	0,02999	0,02978	0,02999
[76, 78]	0,01268	0,01291	0,01268	0,01291

Na Figura 3.10, apresentamos os gráficos dos fluxos dos grupos 1 e 2 que são obtidos pela mesma configuração de malha das Tabelas 3.22 e 3.23. Esses fluxos são dos nodos em que $y \in [0,2]$, onde a linha de maior amplitude no gráfico é referente ao grupo 1 e a linha de menor amplitude do grupo 2.

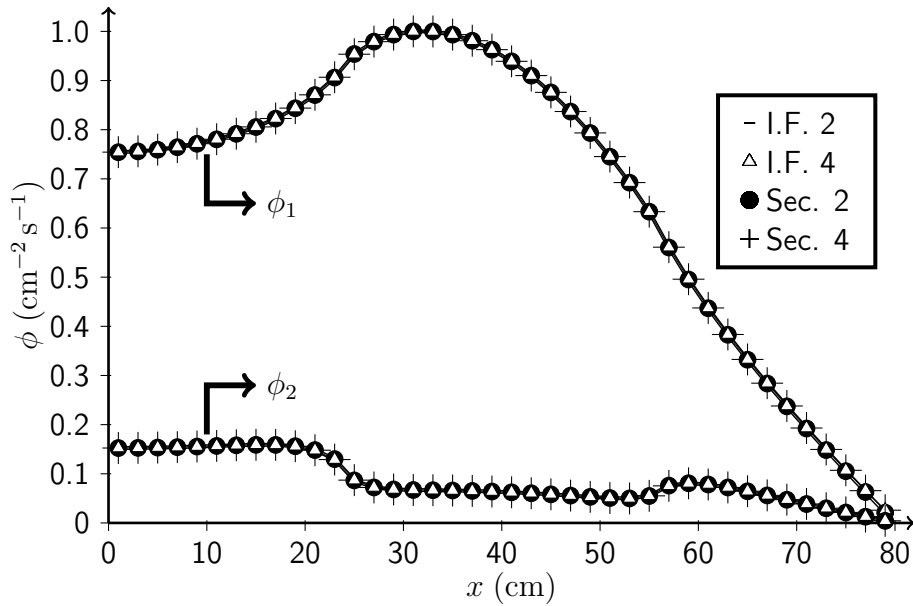


Figura 3.10: Ilustração dos fluxos do Problema Teste VI.

3.5 Conclusões sobre o problema da criticalidade

Ao final deste capítulo, concluímos que as metodologias propostas geram resultados satisfatórios quando comparados com os resultados presentes na literatura. Na questão dos métodos propostos, percebemos uma excelente concordância dos resultados entre si, tanto dos fluxos quanto dos autovalores dominantes. Entretanto, o método da Bissecção apresenta desvantagens com relação aos demais, uma vez que devemos saber em qual intervalo se encontra o autovalor dominante. Determinar este intervalo pode ser uma tarefa difícil, como ocorreu no Problema Teste III, em que o autovalor dominante é muito próximo do segundo maior autovalor, $K = 0,901593$ e $K = 0,900196$, respectivamente. Ademais, na maioria dos casos, o método da Secante demanda menor ou igual tempo computacional do que os métodos da Bissecção e Iterativo de Fonte, porém, ainda precisamos fazer uma comprovação formal da convergência para o maior autovalor em problemas gerais da criticalidade. Além disso, constatamos que as Propostas 1 e 2 de aproximação das densidades de correntes produzem resultados discordantes tanto com os das outras

propostas como os da literatura. A discordância dos resultados da Proposta 1 estão relacionados à descontinuidade nas interfaces e os erros da Proposta 2 são perceptíveis apenas quando analisamos os valores das potências, pois essa proposta produz valores assimétricos em problemas simétricos. Assim, apenas as Propostas 3, 4 e 5 geram bons resultados e, visto que as Propostas 4 e 5 são propostas originais deste trabalho, escolhemos essas aproximações para utilizar nos problemas da cinética.

4 SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DA CINÉTICA ESPACIAL NA TEORIA DA DIFUSÃO DE NÊUTRONS

Neste capítulo, desenvolvemos uma metodologia de solução para o problema da cinética espacial na teoria da difusão de nêutrons. Nessa metodologia tratamos a dependência espacial da mesma forma do problema estacionário (Capítulo 3), que é baseada na integração nodal das equações da cinética espacial e na aproximação das densidades de correntes nos contornos dos nodos. Ao aplicarmos esta metodologia na variável espacial, obtemos um sistema de equações diferenciais de primeira ordem na variável temporal. Esse sistema é formado pelas equações dos fluxos e das concentrações de precursores, as quais são acopladas pelos termos fontes. Abordamos estes dois conjuntos de equações de forma desacoplada e iterativa, em que os termos fontes são atualizados a cada iteração. Exploramos diferentes formas de atualizar os termos fontes e também soluções numéricas e analíticas para estas equações. Visto que as equações dos fluxos são escritas na forma matricial e as soluções analíticas estão relacionadas as exponenciais matriciais, apresentamos três propostas para o cálculo destas exponenciais. A fim de verificar a metodologia proposta, apresentamos também resultados numéricos para problemas testes presentes na literatura.

4.1 Formulação nodal para o problema da cinética

As equações da cinética espacial na teoria da difusão de nêutrons, Eq. (2.6), para o caso bidimensional em geometria cartesiana e em um domínio Ω contido em \mathbb{R}^2 são escritas como

$$\begin{aligned}
\frac{1}{v_g} \frac{\partial \phi_g(x,y,t)}{\partial t} &= - \frac{\partial}{\partial x} \left(-D_g(x,y,t) \frac{\partial}{\partial x} \phi_g(x,y,t) \right) \\
&\quad - \frac{\partial}{\partial y} \left(-D_g(x,y,t) \frac{\partial}{\partial y} \phi_g(x,y,t) \right) - \Sigma_{Rg}(x,y,t) \phi_g(x,y,t) \\
&\quad + (1 - \beta) \chi_g^p \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'}(x,y,t) \phi_{g'}(x,y,t) \\
&\quad + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{sg'g}(x,y,t) \phi_{g'}(x,y,t) + \chi_g^d \sum_{p=1}^P \lambda_p C_p(x,y,t), \\
\frac{\partial C_p(x,y,t)}{\partial t} &= - \lambda_p C_p(x,y,t) + \beta_p \sum_{g=1}^G \nu_g \Sigma_{fg}(x,y,t) \phi_g(x,y,t),
\end{aligned} \tag{4.1}$$

onde $(x,y) \in \Omega$, $t \in [t_0, \infty)$ sendo t_0 o tempo inicial, $g = 1, \dots, G$ são os grupos de energia, $p = 1, \dots, P$ são os grupos das concentrações de precursores e os demais parâmetros seguem as definições dadas na Seção 2.7 do Capítulo 2. Além das condições de contorno, Eq. (3.2), e das condições de continuidade, Eqs. (3.3) e (3.4), apresentadas no problema estacionário, no problema da cinética temos também condições iniciais dadas por

$$\phi_g(x,y,0) = \phi_{g0}(x,y) \tag{4.2a}$$

e

$$C_p(x,y,0) = \frac{\beta_p}{\lambda_p} \sum_{g=1}^G \nu_g \Sigma_{fg}(x,y,0) \phi_{g0}(x,y). \tag{4.2b}$$

onde $(x,y) \in \Omega$ e $\phi_{g0}(x,y)$ são os fluxos obtidos no problema estacionário.

Nas equações (4.1) propomos uma solução a partir da mesma formulação nodal aplicada no problema estacionário (Seção 3.1 do Capítulo 3), uma vez

que obtivemos bons resultados (Seção 3.4). Após aplicarmos a formulação nodal nas equações (4.1), obtemos um novo conjunto de equações para o nodo arbitrário (i,j)

$$\begin{aligned}
\frac{1}{v_g} \frac{d \bar{\phi}_g^{(i,j)}(t)}{dt} &= - \frac{1}{\Delta x^{(i,j)}} \left(\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_i, t) - \bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_{i-1}, t) \right) \\
&\quad - \frac{1}{\Delta y^{(i,j)}} \left(\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y_j, t) - \bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y_{j-1}, t) \right) - \Sigma_{Rg}^{(i,j)}(t) \bar{\phi}_g^{(i,j)}(t) \\
&\quad + (1 - \beta) \chi_g^p \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'}^{(i,j)}(t) \bar{\phi}_{g'}^{(i,j)}(t) \\
&\quad + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{sg'}^{(i,j)}(t) \bar{\phi}_{g'}^{(i,j)}(t) + \chi_g^d \sum_{p=1}^P \lambda_p \bar{C}_p^{(i,j)}(t), \\
\frac{d \bar{C}_p^{(i,j)}(t)}{dt} &= - \lambda_p \bar{C}_p^{(i,j)}(t) + \beta_p \sum_{g=1}^G \nu_g \Sigma_{fg}^{(i,j)}(t) \bar{\phi}_g^{(i,j)}(t),
\end{aligned} \tag{4.3}$$

onde x_i , x_{i-1} , y_j e y_{j-1} são os contornos do nodo (i,j) . Ademais, o fluxo escalar médio de nêutrons, $\bar{\phi}_g^{(i,j)}(t)$, a concentração de precursores média, $\bar{C}_p^{(i,j)}(t)$, e as densidades de correntes de nêutrons médias, $\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x,t)$ e $\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y,t)$, são definidos, respectivamente, como

$$\bar{\phi}_g^{(i,j)}(t) = \frac{1}{\Delta x^{(i,j)} \Delta y^{(i,j)}} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \int_{y_{j-1}}^{y_j} \phi_g^{(i,j)}(x,y,t) dy dx, \tag{4.4}$$

$$\bar{C}_p^{(i,j)}(t) = \frac{1}{\Delta x^{(i,j)} \Delta y^{(i,j)}} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \int_{y_{j-1}}^{y_j} C_p^{(i,j)}(x,y,t) dy dx, \tag{4.5}$$

$$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x,t) = -D_g^{(i,j)}(t) \frac{\partial}{\partial x} \bar{\phi}_g^{(i,j)}(x,t), \tag{4.6}$$

e

$$\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y,t) = -D_g^{(i,j)}(t) \frac{\partial}{\partial y} \bar{\phi}_{gx}^{(i,j)}(y,t). \quad (4.7)$$

sendo $\bar{\phi}_{gy}^{(i,j)}(x,t)$ o fluxo escalar médio na direção y do grupo g no nodo (i,j) definido por

$$\bar{\phi}_{gy}^{(i,j)}(x,t) = \frac{1}{\Delta y^{(i,j)}} \int_{y_{j-1}}^{y_j} \phi_g^{(i,j)}(x,y,t) \, dy \quad (4.8)$$

e $\bar{\phi}_{gx}^{(i,j)}(y,t)$ o fluxo escalar médio na direção x do grupo g no nodo (i,j) definido por

$$\bar{\phi}_{gx}^{(i,j)}(y,t) = \frac{1}{\Delta x^{(i,j)}} \int_{x_{i-1}}^{x_i} \phi_g^{(i,j)}(x,y,t) \, dx. \quad (4.9)$$

Observamos que as incógnitas nas Eqs. (4.3) são fluxos médios, densidades de corrente médias e concentrações de precursores médias. Entretanto, temos um conjunto de $(G + P)N$ equações com GN incógnitas referentes aos fluxos médios e PN incógnitas relativas às concentrações de precursores, além de incógnitas adicionais relativas às densidades de corrente. Como usual em metodologias nodais, necessitamos introduzir equações auxiliares para a resolução do problema. Com este intuito aproximamos as densidades de correntes de forma análoga ao que foi proposto no problema estacionário, entretanto, neste caso, os coeficientes de difusão e os fluxos médios são dependentes do tempo.

Como obtivemos melhores resultados com as Propostas 4 e 5 na solução dos problemas estacionários (Subseções 3.1.4 e 3.1.5), optamos por usar estas duas propostas para a solução dos problemas da cinética. Assim, a Proposta 4 em problemas dependentes do tempo para a interface leste do nodo (i,j) é escrita como

$$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_i,t) \cong -\Gamma_g^{(i,j)}(t) \left(\bar{\phi}_g^{(i+1,j)}(t) - \bar{\phi}_g^{(i,j)}(t) \right), \quad (4.10)$$

sendo

$$\mathbf{l}_g^{(i,j)}(t) = \frac{2 \left(D_g^{(i+1,j)}(t) \Delta x^{(i+1,j)} + D_g^{(i,j)}(t) \Delta x^{(i,j)} \right)}{(\Delta x^{(i+1,j)} + \Delta x^{(i,j)})^2}, \quad (4.11)$$

para a interface oeste

$$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_{i-1}, t) \cong -\mathbf{o}_g^{(i,j)}(t) \left(\bar{\phi}_g^{(i,j)}(t) - \bar{\phi}_g^{(i-1,j)}(t) \right), \quad (4.12)$$

sendo

$$\mathbf{o}_g^{(i,j)}(t) = \frac{2 \left(D_g^{(i,j)}(t) \Delta x^{(i,j)} + D_g^{(i-1,j)}(t) \Delta x^{(i-1,j)} \right)}{(\Delta x^{(i,j)} + \Delta x^{(i-1,j)})^2}, \quad (4.13)$$

para a interface norte

$$\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y_j, t) \cong -\mathbf{n}_g^{(i,j)}(t) \left(\bar{\phi}_g^{(i,j+1)}(t) - \bar{\phi}_g^{(i,j)}(t) \right), \quad (4.14)$$

sendo

$$\mathbf{n}_g^{(i,j)}(t) = \frac{2 \left(D_g^{(i,j+1)}(t) \Delta y^{(i,j+1)} + D_g^{(i,j)}(t) \Delta y^{(i,j)} \right)}{(\Delta y^{(i,j+1)} + \Delta y^{(i,j)})^2}, \quad (4.15)$$

e para a interface sul

$$\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y_{j-1}, t) \cong -\mathbf{s}_g^{(i,j)}(t) \left(\bar{\phi}_g^{(i,j)}(t) - \bar{\phi}_g^{(i,j-1)}(t) \right), \quad (4.16)$$

sendo

$$\mathfrak{s}_g^{(i,j)}(t) = \frac{2 \left(D_g^{(i,j)}(t) \Delta y^{(i,j)} + D_g^{(i,j-1)}(t) \Delta y^{(i,j-1)} \right)}{(\Delta y^{(i,j)} + \Delta y^{(i,j-1)})^2}. \quad (4.17)$$

Substituindo essas aproximações na Eq. (4.3), obtemos depois de algumas manipulações

$$\begin{aligned} \frac{1}{v_g} \frac{d \bar{\phi}_g^{(i,j)}(t)}{dt} &= \frac{\mathfrak{n}_g^{(i,j)}(t)}{\Delta y^{(i,j)}} \bar{\phi}_g^{(i,j+1)}(t) + \frac{\mathfrak{l}_g^{(i,j)}(t)}{\Delta x^{(i,j)}} \bar{\phi}_g^{(i+1,j)}(t) \\ &\quad - \left(\frac{\mathfrak{l}_g^{(i,j)}(t) + \mathfrak{o}_g^{(i,j)}(t)}{\Delta x^{(i,j)}} + \frac{\mathfrak{n}_g^{(i,j)}(t) + \mathfrak{s}_g^{(i,j)}(t)}{\Delta y^{(i,j)}} \right) \bar{\phi}_g^{(i,j)}(t) \\ &\quad + \frac{\mathfrak{o}_g^{(i,j)}(t)}{\Delta x^{(i,j)}} \bar{\phi}_g^{(i-1,j)}(t) + \frac{\mathfrak{s}_g^{(i,j)}(t)}{\Delta y^{(i,j)}} \bar{\phi}_g^{(i,j-1)}(t) \\ &\quad - \Sigma_{Rg}^{(i,j)}(t) \bar{\phi}_g^{(i,j)}(t) + (1 - \beta) \chi_g^p \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'}^{(i,j)}(t) \bar{\phi}_{g'}^{(i,j)}(t) \\ &\quad + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{sg'g}^{(i,j)}(t) \bar{\phi}_{g'}^{(i,j)}(t) + \chi_g^d \sum_{p=1}^P \lambda_p \bar{C}_p^{(i,j)}(t) \\ \frac{d \bar{C}_p^{(i,j)}(t)}{dt} &= - \lambda_p \bar{C}_p^{(i,j)}(t) + \beta_p \sum_{g=1}^G \nu_g \Sigma_{fg}^{(i,j)}(t) \bar{\phi}_g^{(i,j)}(t). \end{aligned} \quad (4.18)$$

As aproximações das densidades de corrente para os nodos que fazem fronteira com os quatro contornos não estão definidas, pois elas dependem das condições de contorno. Assim, seguindo os mesmos passos que apresentamos no caso estacionário, Eq. (3.36) a Eq. (3.42), definimos as aproximações das densidade de corrente para os nodos do contorno oeste como

$$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_{i-1}, t) \cong - \frac{2D_g^{(i,j)}(t) a_g^{(o)}}{a_g^{(o)} \Delta x^{(i,j)} - 2b_g^{(o)}} \bar{\phi}_g^{(i,j)}(t) \quad (4.19)$$

e, assim, os coeficientes $\mathfrak{o}_g^{(i,j)}(t)$ são definidos nesse contorno como

$$\mathfrak{o}_g^{(i,j)}(t) = \frac{2D_g^{(i,j)}(t)a_g^{(o)}}{a_g^{(o)}\Delta x^{(i,j)} - 2b_g^{(o)}}. \quad (4.20)$$

Para o contorno leste definimos

$$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_i, t) \cong \frac{2D_g^{(i,j)}(t)a_g^{(l)}}{a_g^{(l)}\Delta x^{(i,j)} + 2b_g^{(l)}}\bar{\phi}_g^{(i,j)}(t) \quad (4.21)$$

e, assim, os coeficientes $\mathfrak{l}_g^{(i,j)}(t)$ são definidos como

$$\mathfrak{l}_g^{(i,j)}(t) = \frac{2D_g^{(i,j)}(t)a_g^{(l)}}{a_g^{(l)}\Delta x^{(i,j)} + 2b_g^{(l)}}. \quad (4.22)$$

Para o contorno sul definimos

$$\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y_{j-1}, t) \cong -\frac{2D_g^{(i,j)}(t)a_g^{(s)}}{a_g^{(s)}\Delta y^{(i,j)} - 2b_g^{(s)}}\bar{\phi}_g^{(i,j)}(t) \quad (4.23)$$

e, assim, os coeficientes $\mathfrak{s}_g^{(i,j)}(t)$ são definidos como

$$\mathfrak{s}_g^{(i,j)}(t) = \frac{2D_g^{(i,j)}(t)a_g^{(s)}}{a_g^{(s)}\Delta y^{(i,j)} - 2b_g^{(s)}}. \quad (4.24)$$

Por último, para o contorno norte definimos

$$\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y_j, t) \cong \frac{2D_g^{(i,j)}(t)a_g^{(n)}}{a_g^{(n)}\Delta y^{(i,j)} + 2b_g^{(n)}}\bar{\phi}_g^{(i,j)}(t) \quad (4.25)$$

e, assim, os coeficientes $\mathfrak{n}_g^{(i,j)}(t)$ são definidos como

$$\mathfrak{n}_g^{(i,j)}(t) = \frac{2D_g^{(i,j)}(t)a_g^{(n)}}{a_g^{(n)}\Delta y^{(i,j)} + 2b_g^{(n)}}. \quad (4.26)$$

Por fim, quando substituimos estas aproximações das densidades de corrente para os nodos dos contornos na Eq. (4.3), obtemos um sistema com mesmo número de equações e de incógnitas.

A segunda proposta de aproximação das densidades de correntes é semelhante a Proposta 5 do caso estacionário. Nessa proposta utilizamos a média dos coeficientes de difusão dos nodos vizinhos de cada interface e a aproximação das derivadas por quatro valores de fluxos médios. Aplicando essa metodologia nos problemas dependentes do tempo, obtemos a aproximação da densidade de corrente para a interface leste do nodo (i,j) como

$$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_i,t) \cong -\mathbf{l}_{4g}^{(i,j)}(t) \left(-\bar{\phi}_g^{(i+2,j)}(t) + 27\bar{\phi}_g^{(i+1,j)}(t) - 27\bar{\phi}_g^{(i,j)}(t) + \bar{\phi}_g^{(i-1,j)}(t) \right), \quad (4.27)$$

onde os coeficientes $\mathbf{l}_{4g}^{(i,j)}(t)$ são definidos como

$$\mathbf{l}_{4g}^{(i,j)}(t) = \frac{D_g^{(i+1,j)}(t) + D_g^{(i,j)}(t)}{48\Delta x}. \quad (4.28)$$

Para a interface oeste

$$\bar{J}_{gy}^{(i,j)}(x_{i-1},t) \cong -\mathbf{o}_{4g}^{(i,j)}(t) \left(-\bar{\phi}_g^{(i+1,j)}(t) + 27\bar{\phi}_g^{(i,j)}(t) - 27\bar{\phi}_g^{(i-1,j)}(t) + \bar{\phi}_g^{(i-2,j)}(t) \right), \quad (4.29)$$

onde os coeficientes $\mathbf{o}_{4g}^{(i,j)}(t)$ são definidos como

$$\mathbf{o}_{4g}^{(i,j)}(t) = \frac{D_g^{(i,j)}(t) + D_g^{(i-1,j)}(t)}{48\Delta x}. \quad (4.30)$$

Para a interface norte

$$\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y_j, t) \cong -\mathbf{n}_{4g}^{(i,j)}(t) \left(-\bar{\phi}_g^{(i,j+2)}(t) + 27\bar{\phi}_g^{(i,j+1)}(t) - 27\bar{\phi}_g^{(i,j)}(t) + \bar{\phi}_g^{(i,j-1)}(t) \right), \quad (4.31)$$

onde os coeficientes $\mathbf{n}_{4g}^{(i,j)}(t)$ são definidos como

$$\mathbf{n}_{4g}^{(i,j)}(t) = \frac{D_g^{(i,j+1)}(t) + D_g^{(i,j)}(t)}{48\Delta y}. \quad (4.32)$$

Para a interface sul

$$\bar{J}_{gx}^{(i,j)}(y_{j-1}, t) \cong -\mathbf{s}_{4g}^{(i,j)}(t) \left(-\bar{\phi}_g^{(i,j+1)}(t) + 27\bar{\phi}_g^{(i,j)}(t) - 27\bar{\phi}_g^{(i,j-1)}(t) + \bar{\phi}_g^{(i,j-2)}(t) \right), \quad (4.33)$$

onde os coeficientes $\mathbf{s}_{4g}^{(i,j)}(t)$ são definidos como

$$\mathbf{s}_{4g}^{(i,j)}(t) = \frac{D_g^{(i,j)}(t) + D_g^{(i,j-1)}(t)}{48\Delta y}. \quad (4.34)$$

Substituindo essas aproximações na Eq. (4.3), obtemos depois de algumas manipulações

$$\begin{aligned}
\frac{1}{v_g} \frac{d \bar{\phi}_g^{(i,j)}(t)}{dt} = & - \frac{\mathbf{n}_{4g}^{(i,j)}(t)}{\Delta y} \bar{\phi}_g^{(i,j+2)}(t) + \frac{27\mathbf{n}_{4g}^{(i,j)}(t) - \mathbf{s}_{4g}^{(i,j)}(t)}{\Delta y} \bar{\phi}_g^{(i,j+1)}(t) \\
& - \frac{\mathbf{l}_{4g}^{(i,j)}(t)}{\Delta x} \bar{\phi}_g^{(i+2,j)}(t) + \frac{27\mathbf{l}_{4g}^{(i,j)}(t) - \mathbf{o}_{4g}^{(i,j)}(t)}{\Delta x} \bar{\phi}_g^{(i+1,j)}(t) \\
& - \left(\frac{27\mathbf{n}_{4g}^{(i,j)}(t) - 27\mathbf{s}_{4g}^{(i,j)}(t)}{\Delta y} + \frac{27\mathbf{l}_{4g}^{(i,j)}(t) - 27\mathbf{o}_{4g}^{(i,j)}(t)}{\Delta x} \right) \bar{\phi}_g^{(i,j)}(t) \\
& + \frac{\mathbf{l}_{4g}^{(i,j)}(t) - 27\mathbf{o}_{4g}^{(i,j)}(t)}{\Delta x} \bar{\phi}_g^{(i-1,j)}(t) + \frac{\mathbf{o}_{4g}^{(i,j)}(t)}{\Delta x} \bar{\phi}_g^{(i-2,j)}(t) \\
& + \frac{\mathbf{n}_{4g}^{(i,j)}(t) - 27\mathbf{s}_{4g}^{(i,j)}(t)}{\Delta y} \bar{\phi}_g^{(i,j-1)}(t) + \frac{\mathbf{s}_{4g}^{(i,j)}(t)}{\Delta y} \bar{\phi}_g^{(i,j-2)}(t) \\
& - \Sigma_{Rg}^{(i,j)}(t) \bar{\phi}_g^{(i,j)}(t) + (1 - \beta) \chi_g^p \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{fg'}^{(i,j)}(t) \bar{\phi}_{g'}^{(i,j)}(t) \\
& + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{sg'}^{(i,j)}(t) \bar{\phi}_{g'}^{(i,j)}(t) + \chi_g^d \sum_{p=1}^P \lambda_p \bar{C}_p^{(i,j)}(t) \\
\frac{d \bar{C}_p^{(i,j)}(t)}{dt} = & - \lambda_p \bar{C}_p^{(i,j)}(t) + \beta_p \sum_{g=1}^G \nu_g \Sigma_{fg}^{(i,j)}(t) \bar{\phi}_g^{(i,j)}(t).
\end{aligned} \tag{4.35}$$

A exemplo do caso estacionário, as aproximações das densidades de corrente utilizadas para obter a Eq. (4.35), não estão definidas para os contornos e nem para as interfaces vizinhas aos contornos. Nesses locais, aplicamos as aproximações apresentadas na proposta anterior, que aproximam as derivadas por dois valores. Assim, temos novamente diferentes combinações entre aproximações por 2 e 4 valores de fluxos médios, como ilustramos na Figura 3.1 do caso estacionário. Para completar o problema, aplicamos também a formulação nodal nas condições iniciais

$$\bar{\phi}_g^{(i,j)}(0) = \bar{\phi}_{g0}^{(i,j)} \tag{4.36a}$$

e

$$\bar{C}_p^{(i,j)}(0) = \frac{\beta_p}{\lambda_p} \sum_{g=1}^G \nu_{\Sigma_{fg}}^{(i,j)} \bar{\phi}_{g0}^{(i,j)}. \quad (4.36b)$$

Por fim, destacamos que esta mesma metodologia pode ser aplicada em problemas unidimensionais. Nesse caso, temos apenas os fluxos médios, $\bar{\phi}_g^{(i)}$ e as concentrações de precursores medias, $\bar{C}_p^{(i)}$, em uma única direção. Além disto, os termos que contêm os coeficientes \mathbf{n} e \mathbf{s} nas Eqs. (3.34) e (3.54) são iguais a zero.

Após a discretização espacial das equações da cinética e das condições iniciais, apresentamos nas próximas subseções algumas propostas de tratamento para a dependência temporal. A fim de exemplificar, também apresentamos a estrutura dos vetores e das matrizes para o caso bidimensional retangular e para o caso unidimensional, ambos com aproximações das densidades de correntes por dois valores.

4.2 Uma solução analítica para o sistema global

O conjunto de equações obtido tanto pela proposta de aproximação das densidades de corrente por dois valores, Eq. (4.18), como por quatro valores, Eq. (4.35), pode ser escrito como um único sistema global da forma

$$\frac{d}{dt} \bar{\Psi}(t) = \mathbf{A}(t) \bar{\Psi}(t), \quad (4.37)$$

onde $\mathbf{A}(t)$ é a matriz que contém os parâmetros nucleares do problema e $\bar{\Psi}(t)$ é o vetor que contém os fluxos médios e as concentrações de precursores médias, escrito na forma

$$\bar{\Psi}(t) = \begin{bmatrix} \bar{\Phi}(t) \\ \bar{C}(t) \end{bmatrix}. \quad (4.38)$$

Se $\mathbf{A}(t)$ é uma matriz cujos elementos são funções contínuas em t e $\mathbf{A}(t)$ comutar com $\int_0^t \mathbf{A}(s) ds$, então o sistema de EDO's homogêneo (4.37) possui uma solução analítica [34, 35] na forma

$$\bar{\bar{\Psi}}(t) = e^{\int_0^t \mathbf{A}(s) ds} \bar{\bar{\Psi}}_0, \quad (4.39)$$

onde $\bar{\bar{\Psi}}_0$ é o vetor que contém as condições iniciais. Observamos que se os parâmetros nucleares das Eqs. (4.18) e (4.35) são constantes, a condição de comutatividade é satisfeita. Caso contrário, analisamos cada caso específico. Se os parâmetros são dependentes do tempo e a comutatividade não for satisfeita, aproximamos os parâmetros por constantes em pequenos intervalos de tempo pela chamada técnica *Piecewise Constant Approximation* [53, 75].

O tratamento computacional deste sistema é desafiador, uma vez que a diferença de ordem de magnitude entre as grandezas envolvidas nas equações dos precursores e dos fluxos caracteriza um sistema rígido (*stiff*). Além disto, esse sistema que engloba as duas equações (fluxos e precursores) pode se tornar de grandes dimensões, demandando uma maior custo computacional. A fim de suavizar a rigidez e diminuir as dimensões dos sistemas, nas subseções a seguir apresentamos uma metodologia que trata os fluxos e os precursores de forma desacoplada.

4.3 Solução dos fluxos e dos precursores de forma desacoplada e iterativa

As equações diferenciais relativas aos fluxos, Eq. (4.18) ou Eq. (4.35), formam um conjunto de equações acopladas entre os grupos devido aos termos de fissão e espalhamento. Além do acoplamento entre os grupos, há um acoplamento entre as equações dos fluxos e das concentrações de precursores, devido à presença dos precursores nos termos fontes dos fluxos e vice-versa. Nesta subseção, propomos

um processo iterativo entre as equações relativas aos fluxos e às concentrações de precursores, que parte de uma estimativa inicial para os fluxos presentes no termo fonte das equações das concentrações. Assim, os dois sistemas de equações ficam desacoplados em dois sistemas menores e os termos fontes são atualizados a cada iteração até um determinado critério de parada.

Visto que, o sistema das equações dos fluxos está acoplado pelos grupos de energia, escrevemos as equações na forma matricial como

$$\mathbf{V}^{-1} \frac{d}{dt} \bar{\bar{\Phi}}(t) = \mathbf{M}_c(t) \bar{\bar{\Phi}}(t) + \mathbf{S}_{\text{flu}}(t), \quad (4.40)$$

onde \mathbf{V} é uma matriz diagonal de blocos, que é composta por N blocos diagonais iguais, \mathbf{V}_d , da forma

$$\mathbf{V}_d = \text{diag}(v_1, v_2, \dots, v_G), \quad (4.41)$$

sendo N o número de nodos do problema, para o caso bidimensional, $\bar{\bar{\Phi}}(t)$ é o vetor dos fluxos médios de nêutrons

$$\bar{\bar{\Phi}}(t) = \left[\bar{\bar{\Phi}}^{(1,1)}(t), \bar{\bar{\Phi}}^{(2,1)}(t), \dots, \bar{\bar{\Phi}}^{(Nx,1)}(t), \bar{\bar{\Phi}}^{(1,2)}(t), \dots, \bar{\bar{\Phi}}^{(Nx,Ny)}(t) \right]^T, \quad (4.42)$$

sendo Nx e Ny o número de nodos nas direções x e y , respectivamente. Cada um dos vetores $\bar{\bar{\Phi}}^{(i,j)}(t)$ possui componentes relacionados a cada grupo como

$$\bar{\bar{\Phi}}^{(i,j)}(t) = \left[\bar{\bar{\phi}}_1^{(i,j)}(t), \bar{\bar{\phi}}_2^{(i,j)}(t), \dots, \bar{\bar{\phi}}_G^{(i,j)}(t) \right]^T. \quad (4.43)$$

Para o caso unidimensional, o vetor dos fluxos médios é da forma

$$\bar{\Phi}(t) = \left[\bar{\Phi}^{(1)}(t), \bar{\Phi}^{(2)}(t), \dots, \bar{\Phi}^{(Nx)}(t) \right]^T, \quad (4.44)$$

e cada um dos vetores $\bar{\Phi}^{(i)}(t)$ possui componentes relacionados a cada grupo como

$$\bar{\Phi}^{(i)}(t) = \left[\bar{\phi}_1^{(i)}(t), \bar{\phi}_2^{(i)}(t), \dots, \bar{\phi}_G^{(i)}(t) \right]^T. \quad (4.45)$$

Além disso, $\mathbf{M}_c(t)$ é uma matriz com n diagonais de blocos, onde n depende da dimensão do problema e da aproximação das densidades de corrente, como apresentamos na Tabela 3.1. A matriz $\mathbf{M}_c(t)$ é semelhante à matriz \mathbf{M} do caso estacionário, Eqs. (3.59) e (3.60) para o caso bidimensional e Eq. (3.69) para o caso unidimensional. As únicas alterações são nos parâmetros nucleares que podem depender da variável temporal e do termo de fissão que é multiplicado por $(1 - \beta)$. Ainda na Eq. (4.40), temos o vetor fonte dos fluxos, que para o caso bidimensional é da forma

$$\mathbf{S}_{\text{flu}}(t) = \left[\mathbf{S}_{\text{flu}}^{(1,1)}(t), \mathbf{S}_{\text{flu}}^{(2,1)}(t), \dots, \mathbf{S}_{\text{flu}}^{(Nx,1)}(t), \mathbf{S}_{\text{flu}}^{(1,2)}(t), \dots, \mathbf{S}_{\text{flu}}^{(Nx,Ny)}(t) \right]^T, \quad (4.46)$$

sendo que cada um dos vetores $\mathbf{S}_{\text{flu}}^{(i,j)}(t)$ possui componentes relacionados a cada grupo como

$$\mathbf{S}_{\text{flu}}^{(i,j)}(t) = \begin{bmatrix} \chi_1^d \sum_{p=1}^P \lambda_p \bar{C}_p^{(i,j)}(t) \\ \vdots \\ \chi_G^d \sum_{p=1}^P \lambda_p \bar{C}_p^{(i,j)}(t) \end{bmatrix} \quad (4.47)$$

e para o caso unidimensional

$$\mathbf{S}_{\text{flu}}(t) = \left[\mathbf{S}_{\text{flu}}^{(1)}(t), \mathbf{S}_{\text{flu}}^{(2)}(t), \dots, \mathbf{S}_{\text{flu}}^{(Nx)}(t) \right]^T, \quad (4.48)$$

sendo que cada um dos vetores $\mathbf{S}_{\text{flu}}^{(i)}(t)$ possui componentes relacionados a cada grupo como

$$\mathbf{S}_{\text{flu}}^{(i)}(t) = \begin{bmatrix} \chi_I^d \sum_{p=1}^P \lambda_p \bar{C}_p^{(i)}(t) \\ \vdots \\ \chi_G^d \sum_{p=1}^P \lambda_p \bar{C}_p^{(i)}(t) \end{bmatrix}. \quad (4.49)$$

Visto que, as equações dos precursores, tanto na Eq. (4.18) como na Eq. (4.35), não são acopladas entre os grupos dos precursores, trabalhamos com elas de forma desacoplada por grupo. Assim, as equações diferenciais dos precursores são escritas da seguinte forma

$$\frac{d}{dt} \bar{\mathbf{C}}_p(t) = -\lambda_p \bar{\mathbf{C}}_p(t) + \beta_p \mathbf{S}_{\text{pre}}(t), \quad (4.50)$$

onde, para o caso bidimensional, $\bar{\mathbf{C}}_p(t)$ é o vetor das concentrações de precursores médias do grupo p dado por

$$\bar{\mathbf{C}}_p(t) = \left[\bar{C}_p^{(1,1)}(t), \bar{C}_p^{(2,1)}(t), \dots, \bar{C}_p^{(Nx,1)}(t), \bar{C}_p^{(1,2)}(t), \dots, \bar{C}_p^{(Nx,Ny)}(t) \right]^T \quad (4.51)$$

e $\mathbf{S}_{\text{pre}}(t)$ é o vetor fonte dos precursores dado por

$$\mathbf{S}_{\text{pre}}(t) = \begin{bmatrix} \sum_{g=1}^G \nu_g \Sigma_{fg}^{(1,1)} \bar{\phi}_g^{(1,1)}(t) \\ \vdots \\ \sum_{g=1}^G \nu_g \Sigma_{fg}^{(Nx,1)} \bar{\phi}_g^{(Nx,1)}(t) \\ \sum_{g=1}^G \nu_g \Sigma_{fg}^{(1,2)} \bar{\phi}_g^{(1,2)}(t) \\ \vdots \\ \sum_{g=1}^G \nu_g \Sigma_{fg}^{(Nx,Ny)} \bar{\phi}_g^{(Nx,Ny)}(t) \end{bmatrix}. \quad (4.52)$$

Para o caso unidimensional, o vetor das concentrações de precursores é da forma

$$\bar{\mathbf{C}}_p(t) = \left[\bar{C}_p^{(1)}(t), \bar{C}_p^{(2)}(t), \dots, \bar{C}_p^{(Nx)}(t) \right]^T \quad (4.53)$$

e o vetor fonte dos precursores é da forma

$$\mathbf{S}_{\text{pre}}(t) = \begin{bmatrix} \sum_{g=1}^G \nu_g \Sigma_{fg}^{(1,1)} \bar{\phi}_g^{(1)}(t) \\ \vdots \\ \sum_{g=1}^G \nu_g \Sigma_{fg}^{(Nx,1)} \bar{\phi}_g^{(Nx)}(t) \end{bmatrix}. \quad (4.54)$$

A partir de uma estimativa inicial dos fluxos para o termo fonte da Eq. (4.50), determinamos as novas concentrações que atualizam o termo fonte da Eq. (4.40). Dessa forma, determinamos os novos fluxos que atualizam o termo fonte dos precursores, e, assim, sucessivamente até atender um critério de parada. Esse processo iterativo é expresso como

$$\frac{d}{dt} \bar{\mathbf{C}}_p^{[s]}(t) = -\lambda_p \bar{\mathbf{C}}_p^{[s]}(t) + \beta_p \mathbf{S}_{\text{pre}}^{[s-1]}(t), \quad (4.55a)$$

e

$$\frac{d}{dt} \bar{\bar{\Phi}}^{[s]}(t) = \mathbf{VM}_c(t) \bar{\bar{\Phi}}^{[s]}(t) + \mathbf{VS}_{\text{flu}}^{[s]}(t), \quad (4.55b)$$

onde $\bar{\bar{\Phi}}^{[0]}(t)$ é a estimativa inicial. Para resolvermos esses novos sistemas de equações diferenciais, propomos uma solução analítica para as equações dos precursores e para as equações dos fluxos por duas formas: uma numérica e outra analítica.

4.3.1 Formulação numérica para as equações dos fluxos

O método numérico que propomos para o sistema de equações diferenciais dos fluxos (4.55b) é o método de Euler Implícito. Para aplicarmos esse método, discretizamos a variável temporal t em intervalos de tempo,

$$t_0, t_1, \dots, t_i, t_{i+1}, \dots, \infty, \quad (4.56)$$

onde $\Delta t = t_{i+1} - t_i$ e t_0 é o tempo inicial. A cada intervalo de tempo, iniciamos a processo iterativo com uma estimativa inicial constante para os fluxos do termo fonte da Eq. (4.55a). Assim, a equação diferencial para $t \in [t_i, t_{i+1}]$ é

$$\frac{d}{dt} \bar{\bar{C}}_p^{[1]}(t) = -\lambda_p \bar{\bar{C}}_p^{[1]}(t) + \beta_p \mathbf{S}_{\text{pre}}^{[0]}, \quad (4.57)$$

com solução analítica da forma

$$\bar{\bar{C}}_p^{[1]}(t) = e^{-\lambda_p(t-t_i)} \bar{\bar{C}}_p(t_i) + (1 - e^{-\lambda_p(t-t_i)}) \frac{\beta_p}{\lambda_p} \mathbf{S}_{\text{pre}}^{[0]}. \quad (4.58)$$

Em seguida, aplicamos o método de Euler Implícito no sistema de equações diferenciais (4.55b), onde obtemos

$$\frac{\bar{\bar{\Phi}}^{[1]}(t_{i+1}) - \bar{\bar{\Phi}}(t_i)}{\Delta t} = \mathbf{VM}_c(t_{i+1})\bar{\bar{\Phi}}^{[1]}(t_{i+1}) + \mathbf{VS}_{\text{flu}}^{[1]}(t_{i+1}). \quad (4.59)$$

Observamos que o termo fonte, $\mathbf{S}_{\text{flu}}^{[1]}(t_{i+1})$, é avaliado em t_{i+1} , portanto, a sua atualização é feita ao aplicar t_{i+1} na Eq. (4.58). Após aplicarmos o método de Euler Implícito, manipulamos a equação, a fim de obter um sistema linear da forma

$$\left(\mathbf{I} - \Delta t \mathbf{VM}_c(t_{i+1}) \right) \bar{\bar{\Phi}}^{[1]}(t_{i+1}) = \bar{\bar{\Phi}}(t_i) + \Delta t \mathbf{VS}_{\text{flu}}^{[1]}(t_{i+1}). \quad (4.60)$$

A solução do sistema linear (4.60) atualiza as fontes dos precursores da segunda iteração e, assim, segue o processo iterativo. Esse processo iterativo é mantido até um determinado critério de parada. Por fim, a condição inicial do primeiro intervalo de tempo é a solução do problema estacionário. Para os demais intervalos, a condição inicial é a solução do problema da cinética do intervalo de tempo antecessor.

4.3.2 Formulação analítica para as equações dos fluxos

Primeiramente, para propormos uma solução analítica e iterativa dos sistemas de equações diferenciais (4.55), precisamos conhecer a forma dos termos fontes de ambas equações. Dessa maneira, nos tópicos a seguir, apresentamos três formas de aproximar essas fontes. Ainda, caso os parâmetros nucleares dependam da variável temporal, resolvemos as equações em intervalos de tempo, a exemplo da abordagem numérica, onde aplicamos a técnica *Piecewise Constant Approximation* [53, 75] em cada intervalo, para aproximar os parâmetros por constantes, $\mathbf{M}_c(t) = \mathbf{M}_c$.

4.3.2.1 Aproximação constante para os termos fontes

A primeira forma que aproximamos os fluxos e precursores presentes nos termos fontes das Eqs. (4.55) é como um vetor constante. Assim as Eqs. (4.55) tornam-se

$$\frac{d}{dt} \bar{\mathbf{C}}_p^{[s]}(t) = -\lambda_p \bar{\mathbf{C}}_p^{[s]}(t) + \beta_p \mathbf{S}_{\text{pre}}^{[s-1]}, \quad (4.61a)$$

$$\frac{d}{dt} \bar{\bar{\mathbf{\Phi}}}^{[s]}(t) = \mathbf{VM}_c \bar{\bar{\mathbf{\Phi}}}^{[s]}(t) + \mathbf{VS}_{\text{flu}}^{[s]}, \quad (4.61b)$$

onde o processo iterativo inicia com uma estimativa inicial para os fluxos $\bar{\bar{\mathbf{\Phi}}}^{[0]}$. As demais atualizações propomos que sejam a partir da avaliação dos fluxos/precursosos no tempo t em que desejamos a solução. Os sistemas de equações não homogêneas (4.61) podem ser resolvidos de forma analítica através de uma adaptação do método dos coeficientes indeterminados [96]. Este método pode ser aplicado neste problema, uma vez que a parte não homogênea dos sistemas são vetores constantes. Aplicando este método obtemos as seguintes soluções analíticas

$$\bar{\mathbf{C}}_p^{[s]}(t) = e^{-\lambda_p t} \bar{\mathbf{C}}_{p0} + (1 - e^{-\lambda_p t}) \frac{\beta_p \mathbf{S}_{\text{pre}}^{[s-1]}}{\lambda_p} \quad (4.62a)$$

e

$$\bar{\bar{\mathbf{\Phi}}}^{[s]}(t) = e^{\mathbf{VM}_c t} \left(\bar{\bar{\mathbf{\Phi}}}_0 + \mathbf{X}^{[s]} \right) - \mathbf{X}^{[s]}, \quad (4.62b)$$

onde $\mathbf{X}^{[s]}$ é a solução do sistema linear $\mathbf{M}_c \mathbf{X}^{[s]} = \mathbf{S}_{\text{flu}}^{[s]}$ e $\bar{\mathbf{C}}_{p0}$ e $\bar{\bar{\mathbf{\Phi}}}_0$ são as condições iniciais.

4.3.2.2 Aproximação mista para os termos fontes

Nesta subsecção aproximamos os termos fontes das Eqs. (4.55) de duas formas diferentes, uma constante para a fonte da equação dos precursores, igual da subsecção anterior, e outra analítica para a fonte da equação dos fluxos. A forma analítica entendemos como sendo a solução (4.62a) obtida da equação dos precursores, que pode ser escrita para cada grupo p e nodo (i,j) na forma

$$\bar{C}_p^{(i,j)}(t) = e^{-\lambda_p t} \left(\bar{C}_{p0}^{(i,j)} - \frac{\beta_p}{\lambda_p} S_{\text{pre}}^{(i,j)} \right) + \frac{\beta_p}{\lambda_p} S_{\text{pre}}^{(i,j)}. \quad (4.63)$$

Deste modo, o termo fonte (4.47) para o nodo (i,j) torna-se

$$\mathbf{S}_{\text{flu}}^{(i,j)}(t) = \begin{bmatrix} \chi_1^d \sum_{p=1}^P \left[e^{-\lambda_p t} \left(\lambda_p \bar{C}_{p0}^{(i,j)} - \beta_p S_{\text{pre}}^{(i,j)} \right) + \beta_p S_{\text{pre}}^{(i,j)} \right] \\ \vdots \\ \chi_G^d \sum_{p=1}^P \left[e^{-\lambda_p t} \left(\lambda_p \bar{C}_{p0}^{(i,j)} - \beta_p S_{\text{pre}}^{(i,j)} \right) + \beta_p S_{\text{pre}}^{(i,j)} \right] \end{bmatrix}. \quad (4.64)$$

Podemos reescrever a Eq. (4.64) na forma compacta para todos os nodos da seguinte maneira

$$\mathbf{S}_{\text{flu}}(t) = \sum_{p=1}^P [e^{-\lambda_p t} \mathbf{S}_{p1}] + \mathbf{S}_2. \quad (4.65)$$

Por fim, substituído a nova fonte (4.65) na Eq. (4.55b) obtemos

$$\frac{d}{dt} \bar{\Phi}^{[s]}(t) = \mathbf{VM}_c \bar{\Phi}^{[s]}(t) + \mathbf{V} \left(\sum_{p=1}^P [e^{-\lambda_p t} \mathbf{S}_{p1}^{[s]}] + \mathbf{S}_2^{[s]} \right). \quad (4.66)$$

A equação diferencial matricial (4.66) também pode ser resolvida de forma analítica através de uma adaptação do método dos coeficientes indeterminados

[96], visto que a parte não homogênea são funções constantes e exponenciais. A solução homogênea é dada por uma exponencial matricial da forma

$$\bar{\bar{\Phi}}_h(t) = e^{\mathbf{VM}_c t} \mathbf{Y}, \quad (4.67)$$

onde \mathbf{Y} é um vetor constante desconhecido que determinamos a partir da condição inicial, e para a solução particular propomos uma solução na forma

$$\bar{\bar{\Phi}}_p(t) = \sum_{p=1}^P e^{-\lambda_p t} \mathbf{Q}_p + \mathbf{W}. \quad (4.68)$$

Aplicamos o método dos coeficientes indeterminados na equação (4.66) com a proposta de solução da Eq. (4.68), e juntamente com a condição inicial $\bar{\bar{\Phi}}_0$, obtemos a solução geral para os fluxos de nêutrons como

$$\bar{\bar{\Phi}}^{[s]}(t) = e^{\mathbf{VM}_c t} \left(\bar{\bar{\Phi}}_0 + \sum_{p=1}^P [\mathbf{Y}_{1p}^{[s]}] + \mathbf{Y}_2^{[s]} \right) - \sum_{p=1}^P [e^{-\lambda_p t} \mathbf{Y}_{1p}^{[s]}] - \mathbf{Y}_2^{[s]}, \quad (4.69)$$

onde $\mathbf{Y}_{1p}^{[s]}$ é a solução do sistema linear $(\mathbf{VM}_c + \lambda_p \mathbf{I}) \mathbf{Y}_{1p}^{[s]} = \mathbf{VS}_{p1}^{[s]}$ e $\mathbf{Y}_2^{[s]}$ é a solução do sistema linear $\mathbf{M}_c \mathbf{Y}_2^{[s]} = \mathbf{S}_2^{[s]}$.

4.3.2.3 Aproximação quase analítica para os termos fontes

Na subseção anterior propomos que a fonte das equações dos fluxos seja exatamente a solução das equações das concentrações, assim, seguimos com essa proposta por ser a mais analítica possível. Entretanto, nesta subseção apresentamos uma nova proposta para o termo fonte das equações das concentrações (4.55a), visto que até então utilizamos a forma constante. A nova proposta é formada por duas partes: uma exponencial e outra constante. A parte exponencial é a própria solução da equação dos fluxos e a parte constante é a outra parte da solução, avaliada no

valor de t que desejamos avaliar a solução. Chamamos esta nova proposta de quase analítica, pois o termo fonte na equação das concentrações é composto por uma parte analítica e outra aproximada e o termo fonte dos fluxos é toda analítica.

Iniciamos o desenvolvimento reescrevendo a solução para os fluxos, Eq. (4.69), da seguinte forma

$$\bar{\bar{\Phi}}(t) = \underbrace{e^{\mathbf{VM}_c t} \left(\bar{\bar{\Phi}}_0 + \sum_{p'=1}^P [\mathbf{Y}_{1p'}] + \mathbf{Y}_2 \right)}_{\text{Termo 1}} - \underbrace{\sum_{p'=1}^P [e^{-\lambda_{p'} t} \mathbf{Y}_{1p'}]}_{\text{Termo 2}} - \underbrace{\mathbf{Y}_2}_{\text{Termo 3}}. \quad (4.70)$$

Destacamos que as fontes que propomos são diferentes para cada grupo de precursor. Assim, para o grupo p , a parte exponencial da nova proposta de fonte é formada pelo somatório do Termo 2 com a exceção do índice $p' = p$ e a parte constante da nova fonte é o restante da solução, Eq. (4.70), avaliada no valor de t_* que desejamos avaliar a solução. A parte constante é escrita como

$$\mathbf{H}_p = e^{\mathbf{VM}_c t_*} \left(\bar{\bar{\Phi}}_0 + \sum_{p'=1}^P [\mathbf{Y}_{1p'}] + \mathbf{Y}_2 \right) - e^{-\lambda_p t_*} \mathbf{Y}_{1p} - \mathbf{Y}_2. \quad (4.71)$$

Desta forma, obtemos os fluxos que atualizam o termo fonte das equações das concentrações do grupo p da forma

$$\bar{\bar{\Phi}}_p(t) = \mathbf{H}_p - \sum_{\substack{p'=1 \\ p' \neq p}}^P [e^{-\lambda_{p'} t} \mathbf{Y}_{1p'}]. \quad (4.72)$$

Substituindo essa expressão no termo fonte na equação diferencial das concentrações, Eq. (4.50), temos

$$\frac{d}{dt} \bar{\mathbf{C}}_p(t) = -\lambda_p \bar{\mathbf{C}}_p(t) + \beta_p \mathbf{F}_c \left(\mathbf{H}_p - \sum_{\substack{p'=1 \\ p' \neq p}}^P [e^{-\lambda_{p'} t} \mathbf{Y}_{1p'}] \right), \quad (4.73)$$

onde \mathbf{F}_c é a matriz que contém as seções de choque de fissão, que para o caso particular de $G = 2$, temos

$$\mathbf{F}_c = \begin{bmatrix} \nu_1 \Sigma_{f1}^{(1,1)} & \nu_2 \Sigma_{f2}^{(1,1)} & 0 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \nu_1 \Sigma_{f1}^{(2,1)} & \nu_2 \Sigma_{f2}^{(2,1)} & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \ddots & \vdots & \vdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots & \nu_1 \Sigma_{f1}^{(Nx,Ny)} & \nu_2 \Sigma_{f2}^{(Nx,Ny)} \end{bmatrix}. \quad (4.74)$$

A exemplo da subseção anterior, a equação diferencial (4.73) pode ser resolvida de forma analítica através do método dos coeficientes indeterminados. Desta maneira, a solução homogênea é dada como

$$\bar{\mathbf{C}}_{p \text{ homo}}(t) = e^{-\lambda_p t} \mathbf{K}_p, \quad (4.75)$$

e propomos como solução particular

$$\bar{\mathbf{C}}_{p \text{ part}}(t) = \sum_{\substack{p'=1 \\ p' \neq p}}^P [e^{-\lambda_{p'} t} \mathbf{Q}_{p'}] + \mathbf{W}_p. \quad (4.76)$$

Após fazer a derivação da solução pelo método dos coeficientes indeterminados e aplicando a condição inicial, obtemos a seguinte solução

$$\begin{aligned} \bar{\mathbf{C}}_p(t) = e^{-\lambda_p t} \left(\bar{\mathbf{C}}_{p0} - \sum_{\substack{p'=1 \\ p' \neq p}}^P \left[\frac{\beta_p}{\lambda_{p'} - \lambda_p} \mathbf{F}_c \mathbf{Y}_{1p'} \right] - \frac{\beta_p}{\lambda_p} \mathbf{F}_c \mathbf{H}_p \right) \\ + \sum_{\substack{p'=1 \\ p' \neq p}}^P \left[\frac{\beta_p}{\lambda_{p'} - \lambda_p} e^{-\lambda_{p'} t} \mathbf{F}_c \mathbf{Y}_{1p'} \right] + \frac{\beta_p}{\lambda_p} \mathbf{F}_c \mathbf{H}_p, \quad (4.77) \end{aligned}$$

que pode ser escrita de forma compacta como

$$\bar{\mathbf{C}}_p(t) = \sum_{p'=1}^P [e^{-\lambda_{p'} t} \mathbf{U}_{1pp'}] + \mathbf{U}_{2p}. \quad (4.78)$$

Deste modo, o termo fonte da Eq. (4.47) para o nodo (i,j) torna-se

$$\mathbf{S}_{\text{flu}}^{(i,j)}(t) = \begin{bmatrix} \chi_1^d \left(e^{-\lambda_1 t} \sum_{p=1}^P \lambda_p \mathbf{U}_{1p1}^{(i,j)} + \dots + e^{-\lambda_P t} \sum_{p=1}^P \lambda_p \mathbf{U}_{1pP}^{(i,j)} + \sum_{p=1}^P \lambda_p \mathbf{U}_{2p}^{(i,j)} \right) \\ \vdots \\ \chi_G^d \left(e^{-\lambda_1 t} \sum_{p=1}^P \lambda_p \mathbf{U}_{1p1}^{(i,j)} + \dots + e^{-\lambda_P t} \sum_{p=1}^P \lambda_p \mathbf{U}_{1pP}^{(i,j)} + \sum_{p=1}^P \lambda_p \mathbf{U}_{2p}^{(i,j)} \right) \end{bmatrix}. \quad (4.79)$$

Deste ponto em diante a resolução segue os mesmos passos da subseção anterior, Eq. (4.65) a Eq. (4.69).

4.4 Exponencial matricial

Na seção anterior obtivemos uma solução para o problema da cinética espacial na teoria da difusão, porém, nas soluções homogêneas das propostas analíticas para as equações dos fluxos, nos deparamos com exponenciais matriciais. Por este motivo, nesta seção apresentamos algumas propostas para calcular as exponenciais matriciais.

4.4.1 Exponencial matricial por autovalores e autovetores

Para estabelecermos comparações, primeiramente escolhemos implementar a solução clássica, que é através da decomposição da matriz \mathbf{VM}_c em seus autovalores e autovetores correspondentes. Considerando o princípio da superposição e que a matriz \mathbf{VM}_c tenha autovalores distintos [96], a solução homogênea pode ser escrita na forma

$$\bar{\bar{\Phi}}_h(t) = a_1 e^{\eta_1 t} \zeta_1 + \cdots + a_{GN} e^{\eta_{GN} t} \zeta_n, \quad (4.80)$$

onde η_i são os autovalores e ζ_i seus autovetores correspondentes da matriz \mathbf{VM}_c e a_i são incógnitas que são determinadas a partir da aplicação das condições iniciais.

4.4.2 Exponencial matricial por aproximação de Padé

O segundo método que propomos para determinar a exponencial matricial é a aproximação de Padé juntamente com a técnica *scaling and squaring*. A aproximação Padé [66] para e^A é definida como

$$\mathbf{R}_{pq}(\mathbf{A}) = [\mathbf{Q}_{pq}(\mathbf{A})]^{-1} \mathbf{P}_{pq}(\mathbf{A}), \quad (4.81)$$

onde

$$\mathbf{P}_{pq}(\mathbf{A}) = \sum_{j=0}^p \frac{(p+q-j)! p!}{(p+q)! j! (p-j)!} (\mathbf{A})^j \quad (4.82)$$

e

$$\mathbf{Q}_{pq}(\mathbf{A}) = \sum_{j=0}^q \frac{(p+q-j)! q!}{(p+q)! j! (q-j)!} (-\mathbf{A})^j. \quad (4.83)$$

Determinamos a matriz $\mathbf{R}_{pq}(\mathbf{A})$ através da solução do sistema linear

$$\mathbf{Q}_{pq}(\mathbf{A})\mathbf{R}_{pq}(\mathbf{A}) = \mathbf{P}_{pq}(\mathbf{A}). \quad (4.84)$$

Segundo as referências [66] e [47], a melhor escolha dos índices da aproximação é $p = q$, pois o custo computacional das aproximações $p \neq q$ e $p = q$ são os mesmos, entretanto, aproximações $p \neq q$ são menos precisas que $p = q$. Além disto, Higham (2005) [47] indica que $p = q = 13$ é a escolha mais eficiente. Assim, as matrizes \mathbf{P} e \mathbf{Q} podem ser escritas como

$$\mathbf{P}_{13,13}(\mathbf{A}) = \mathbf{B} + \mathbf{C} \quad (4.85)$$

e

$$\mathbf{Q}_{13,13}(\mathbf{A}) = -\mathbf{B} + \mathbf{C} \quad (4.86)$$

onde

$$\mathbf{B} = \mathbf{A} \left(\mathbf{A}^6 (b_{13}\mathbf{A}^6 + b_{11}\mathbf{A}^4 + b_9\mathbf{A}^2) + b_7\mathbf{A}^6 + b_5\mathbf{A}^4 + b_3\mathbf{A}^2 + b_1\mathbf{I} \right), \quad (4.87)$$

$$\mathbf{C} = \mathbf{A}^6 (b_{12}\mathbf{A}^6 + b_{10}\mathbf{A}^4 + b_8\mathbf{A}^2) + b_6\mathbf{A}^6 + b_4\mathbf{A}^4 + b_2\mathbf{A}^2 + b_0\mathbf{I} \quad (4.88)$$

e

$$b_j = \frac{(26-j)!13!}{26!j!(13-j)!}. \quad (4.89)$$

A técnica *scaling and squaring* é usada para reduzir a norma da matriz, pois o erro na aproximação da exponencial pelas aproximações de Padé aumenta à medida que a norma da matriz \mathbf{A} aumenta [46, 66]. Essa técnica explora a propriedade das potências das funções exponenciais

$$e^{\mathbf{A}} = \left(e^{\mathbf{A}/m} \right)^m, \quad (4.90)$$

onde a escolha ideal para m são potências de dois [66]. Assim, devemos tomar a menor potência de dois, em que

$$\|2^{-s} \mathbf{A}\| \leq \theta \quad (4.91)$$

para θ suficientemente pequeno a fim de reduzir o erro. Neste trabalho, adotamos $\theta = 5,3719$, esse escolha é baseada no estudo de Al-Mohy e Higham (2009) [5].

Desta forma, a aproximação de Padé juntamente com a técnica *scaling and squaring* para as exponenciais matriciais é dada por

$$e^{\mathbf{A}} \approx \left(\mathbf{R}_{13,13}(2^{-s} \mathbf{A}) \right)^{2^s}. \quad (4.92)$$

Portanto, a exponencial matricial presente nas nossas propostas de solução para os problemas de cinética pode ser aproximada por

$$e^{\mathbf{VM}_c t} \approx \left(\mathbf{R}_{13,13}(2^{-s} \mathbf{VM}_c t) \right)^{2^s}. \quad (4.93)$$

4.4.3 Exponencial matricial por Schur-Parlett

Nesta subseção apresentamos o método chamado Schur-Parlett [28] para avaliar as exponenciais matriciais. O nome neste método vem do fato que

utilizamos a triangularização de Schur juntamente com um método recursivo para determinar a exponencial de matrizes triangulares apresentado por Parlett [72]. A matriz $\mathbf{VM}_c t$ possui todas entradas reais, por isto utilizamos o Teorema da triangularização real de Schur [27]:

Teorema 4.1. *Seja \mathbf{A} uma matriz real $n \times n$, então existe uma matriz ortogonal \mathbf{Q} também $n \times n$ tal que*

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{T}\mathbf{Q}^T, \quad (4.94)$$

onde \mathbf{T} é uma matriz triangular superior se \mathbf{A} tiver autovalores reais. Caso \mathbf{A} possuir autovalores complexos, então \mathbf{T} será uma matriz quase triangular superior por possuir blocos 2×2 na diagonal.

Tomando a triangularização real de Schur da \mathbf{A} , juntamente com a propriedade da matrizes ortogonais $\mathbf{Q}\mathbf{Q}^T = \mathbf{I}$, onde \mathbf{I} é uma matriz identidade, então temos que

$$\mathbf{A}^n = \mathbf{Q}\mathbf{T}^n\mathbf{Q}^T \quad (4.95)$$

para qualquer n natural. Além disto, definindo a matriz exponencial de \mathbf{A} pela série de potências [46] como

$$e^{\mathbf{A}} = \sum_{i=0}^{\infty} \frac{\mathbf{A}^i}{i!} = \mathbf{I} + \mathbf{A} + \frac{\mathbf{A}^2}{2!} + \frac{\mathbf{A}^3}{3!} + \dots, \quad (4.96)$$

e usando a definição da Eq. (4.95) e Eq. (4.96), podemos afirmar que

$$e^{\mathbf{A}} = \mathbf{Q}e^{\mathbf{T}}\mathbf{Q}^T. \quad (4.97)$$

A construção da exponencial de $t\mathbf{A}$ é análoga, uma vez que $t\mathbf{A} = t\mathbf{Q}\mathbf{T}\mathbf{Q}^T = \mathbf{Q}t\mathbf{T}\mathbf{Q}^T$, pois t é um escalar. Desta forma, seguindo os mesmos passos, obtemos

$$e^{t\mathbf{A}} = \mathbf{Q}e^{t\mathbf{T}}\mathbf{Q}^T. \quad (4.98)$$

Observe que na Eq. (4.98) ainda temos uma exponencial matricial para avaliar, porém não mais uma matriz cheia, mas uma triangular superior. Uma forma de determinar a exponencial de uma matriz triangular superior é apresentada por Parlett [72], onde ele usa como base os seguintes lemas.

Lema 4.1. *Se \mathbf{T} é uma matriz triangular superior em blocos, então $e^{\mathbf{T}}$ também é triangular superior em bloco e possui a mesma estrutura de blocos.*

Lema 4.2. *Seja ψ uma função analítica e \mathbf{B} uma matriz quadrada. Se $\psi(\mathbf{B})$ é bem definido, então comuta com \mathbf{B} .*

A partir deste dois lemas, Parlett constrói uma fórmula de recorrência para determinar a exponencial de uma matriz triangular superior em blocos \mathbf{T} . Seja a matriz $\mathbf{H} = e^{\mathbf{T}}$ de mesma estrutura de \mathbf{T} , então para $r < s$ temos

$$\mathbf{T}_{r,r}\mathbf{H}_{r,s} - \mathbf{H}_{r,s}\mathbf{T}_{s,s} = \sum_{k=0}^{s-r-1} (\mathbf{H}_{r,r+k}\mathbf{T}_{r+k,s} - \mathbf{T}_{r,s-k}\mathbf{H}_{s-k,s}), \quad (4.99)$$

onde r e s são os índices dos blocos. A diagonal de \mathbf{H} é dada pela exponencial dos blocos da diagonal de \mathbf{T} , ou seja $\mathbf{H}_{r,r} = e^{\mathbf{T}_{r,r}}$. Observe que a fórmula de recorrência deve ser aplicada da esquerda para a direita e de baixo para cima, caso contrário nem todos os blocos do somatório são conhecidos.

Após definir este método para calcular a exponencial matricial, retornamos a solução do sistema diferencial da subseção anterior. Na solução temos a exponencial matricial $e^{\mathbf{VM}ct}$, no qual aplicamos o método Schur-Parlett

$$e^{\mathbf{VM}ct} = \mathbf{Q}e^{t\mathbf{T}}\mathbf{Q}^T. \quad (4.100)$$

Por fim, precisamos ainda definir um critério de parada para o processo iterativo. Propomos que seja o erro relativo dos vetores de duas iterações sucessivas, $\bar{\bar{\Phi}}^{[s]}$ e $\bar{\bar{\Phi}}^{[s-1]}$, ambos avaliados no tempo desejado

$$\frac{\left\| \bar{\bar{\Phi}}^{[s]} - \bar{\bar{\Phi}}^{[s-1]} \right\|_2}{\left\| \bar{\bar{\Phi}}^{[s]} \right\|_2} \leq \epsilon_3, \quad (4.101)$$

onde ϵ_3 é uma constante arbitrária positiva prescrita. Optamos pela norma Euclidiana por ser a mais usual, porém pela teorema da equivalência das normas podemos escolher qualquer outra norma.

4.5 Resultados para problemas da cinética espacial

A fim de testar as propostas de solução para os problemas da cinética, resolvemos três problemas teste cujos resultados estão disponíveis na literatura [1, 76, 85]. Eles são os Problemas Testes III, IV e VI do caso estacionário, sendo o primeiro unidimensional e os outros dois bidimensionais. Os nossos resultados são gerados novamente por programas implementados em Fortran95 e executados em um computador com um processador Intel Core i5 – 8250U, 1,60GHz e 8GB de RAM. Além disso, utilizamos as subrotinas do LAPACK [9] para a decomposição espectral (*dgeev*) e de Schur (*dgehrd*, *dorghr* e *dhseqr*) e para a solução dos sistemas lineares (*dgetrf* e *dgetrs*).

Nos problemas da cinética, as seções de choque de fissão são divididas pelo fator de multiplicação efetivo para obter um reator crítico, no qual perturbações são introduzidos [21, 50]. Os fatores de multiplicação efetivos escolhidos são aqueles encontrados nos problemas estacionários, conforme seus respectivos problemas e

malhas. No critério de parada do processo iterativo de fonte, adotamos $\epsilon_3 = 10^{-8}$ e, na comparação dos resultados, utilizamos os erros relativos dos vetores soluções dos fluxos

$$\text{Erro Rel.} = \frac{\|\bar{\Phi}^* - \bar{\Phi}\|_2}{\|\bar{\Phi}^*\|_2} \quad (4.102)$$

e das potências

$$\text{Erro Rel.} = \frac{\|\mathbf{P}^* - \mathbf{P}\|_2}{\|\mathbf{P}^*\|_2} \quad (4.103)$$

onde * representa os valores que usamos como referência para comparação.

Nas tabelas em que apresentamos os resultados, abreviamos os nomes das metodologias conforme os métodos utilizados. Essas abreviações estão separadas entre as metodologias que utilizam um único sistema global e as que utilizam os sistemas desacoplados. Em cada uma delas n representa a quantidade de valores de fluxos médios utilizados na aproximação das densidades de correntes.

- Sistema global

APSG-n: Aproximação de Padé no Sistema Global;

EISG-n: Euler Implícito no Sistema Global;

SPSG-n: Schur-Parlett no Sistema Global.

- Sistemas desacoplados

AAFC-n: Autovalor/Autovetor e Fontes Constantes;

APFC-n: Aproximação de Padé e Fontes Constantes;

APFM-n: Aproximação de Padé e Fontes Mistas;

APFQA-n: Aproximação de Padé e Fontes Quase Analíticas;

EIIF-n: Euler Implícito e Iterativo de Fonte;

EINI-n: Euler Implícito Não Iterativo;

SPFC-n: Schur-Parlett e Fontes Constantes;

SPFM-n: Schur-Parlett e Fontes Mistas;

SPFQA-n: Schur-Parlett e Fontes Quase Analíticas.

Além disto, nas tabelas onde se lê 1,0e-10 entende-se por $1,0 \times 10^{-10}$.

4.5.1 Problema Teste BSS-6

O Problema Teste BSS-6 é o Problema Teste III apresentado no caso estacionário. Além dos parâmetros nucleares utilizados no problema da criticalidade, apresentamos na Tabela 4.1 os demais parâmetros necessários para o problema da cinética.

Tabela 4.1: Parâmetros nucleares para o Problema Teste BSS-6.

i	β_i	$\lambda_i(\text{s}^{-1})$	$v_i(\text{cm s}^{-1})$	χ_i^d
1	0,00025	0,0124	$1,0 \times 10^7$	1,0
2	0,00164	0,0305	$3,0 \times 10^5$	0,0
3	0,00147	0,1110		
4	0,00296	0,3010		
5	0,00086	1,1400		
6	0,00032	3,0100		

Fonte: Pollard (1977) [76].

No sistema crítico é introduzido uma perturbação nos parâmetros nucleares. Essa perturbação consiste em um aumento de 3% da seção de choque de remoção do grupo térmico do Material 1 no primeiro segundo

$$\Sigma_{R2}(t) = \begin{cases} 0,18 \cdot \left(1 + \frac{3}{100}t\right) & \text{se } 0 \leq t \leq 1,0 \\ 0,1854 & \text{se } 1,0 < t \end{cases} . \quad (4.104)$$

Nos tópicos a seguir, apresentamos uma série de comparações entre diferentes propostas de solução. A fim de comparação, neste problema teste adotamos os resultados obtidos pelo código POW [76] para o cálculo dos erros relativos das potências. O código POW utiliza diferenças finitas para discretizar tanto a variável temporal quanto espacial. Entretanto, a ref. [76] apresenta apenas os resultados $\Delta x = 2\text{cm}$ e $\Delta t = 10\text{ms}$, o que não nos permite concluir se estes são os seus melhores resultados.

4.5.1.1 *Comparação entre Euler Implícito Não Iterativo (EINI) e Euler Implícito Iterativo de Fonte (EIIF)*

Na Tabela 4.2, apresentamos as potências geradas por duas propostas que aplicam os mesmos métodos para tratamento da variável temporal, porém uma SEM e outra COM iteração de fonte. Em ambas, as equações dos precursores são resolvidas de forma analítica e as equações dos fluxos através do método de Euler Implícito. A proposta SEM iteração de fonte é baseada nos trabalhos de Verdú et al. (1995) [92] e Lima et al. (2011)[62] e a proposta COM iteração de fonte é descrita neste trabalho. Uma das principais diferenças é o tratamento do termo que contém os fluxos da equação dos precursores. Na nossa proposta assumimos os fluxos conhecidos, onde eles são ou da iteração anterior ou, se for a primeira iteração, uma estimativa inicial. Na outra proposta, aproximamos o termo que contém os fluxos na forma linear em cada intervalo de tempo, $[t_i, t_{i+1}]$. Em ambas, a solução da equação dos precursores é substituída na equação dos fluxos, onde é aplicado o método de Euler Implícito. Deste modo, na proposta SEM iteração de fonte, o conjunto de equações é resolvido uma única vez a cada passo no tempo, na nossa proposta resolvemos iterativamente até os fluxos atenderem o critério de parada. Na Tabela 4.2, apresentamos também os erros relativos dos vetores das potências.

Tabela 4.2: Potências do Problema Teste BSS-6 quando usamos $\Delta x = 2\text{cm}$ e as propostas sem e com iteração de fonte.

Δt (ms)	POW			EINI-2				
	10,0	100,0	10,0	1,0	0,1	0,01	0,001	0,0001
$t = 0,0\text{s}$	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
$t = 0,1\text{s}$	0,9298	0,9302	0,9300	0,9300	0,9300	0,9300	0,9300	0,9327
$t = 0,2\text{s}$	0,8732	0,8726	0,8735	0,8735	0,8735	0,8735	0,8735	0,8787
$t = 0,5\text{s}$	0,7596	0,7595	0,7600	0,7600	0,7600	0,7600	0,7600	0,7713
$t = 1,0\text{s}$	0,6587	0,6589	0,6592	0,6592	0,6592	0,6592	0,6591	0,6792
$t = 1,5\text{s}$	0,6432	0,6435	0,6436	0,6436	0,6436	0,6436	0,6434	0,6734
$t = 2,0\text{s}$	0,6306	0,6310	0,6310	0,6310	0,6310	0,6310	0,6308	0,6710
Erro Rel.	-	4,29e-04	4,40e-04	4,40e-04	4,40e-04	4,40e-04	3,45e-04	2,66e-02

Δt (ms)	POW			EIIIF-2				
	10,0	100,0	10,0	1,0	0,1	0,01	0,001	0,0001
$t = 0,0\text{s}$	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
$t = 0,1\text{s}$	0,9298	0,9290	0,9299	0,9300	0,9300	0,9300	0,9300	0,9300
$t = 0,2\text{s}$	0,8732	0,8719	0,8733	0,8735	0,8735	0,8735	0,8735	0,8735
$t = 0,5\text{s}$	0,7596	0,7578	0,7598	0,7600	0,7600	0,7600	0,7600	0,7600
$t = 1,0\text{s}$	0,6587	0,6572	0,6590	0,6592	0,6592	0,6592	0,6592	0,6592
$t = 1,5\text{s}$	0,6432	0,6419	0,6434	0,6436	0,6436	0,6436	0,6436	0,6436
$t = 2,0\text{s}$	0,6306	0,6295	0,6309	0,6310	0,6310	0,6310	0,6310	0,6310
Erro Rel.	-	1,55e-03	2,51e-04	4,40e-04	4,40e-04	4,40e-04	4,40e-04	4,40e-04

Ao observar os resultados presentes na Tabela 4.2, percebemos que no caso SEM iteração de fonte há uma certa instabilidade ao refinar a malha temporal. Assim, se necessitamos de resultados mais precisos em que exigimos malhas finas, este fato pode ser um problema.

4.5.1.2 Análise da metodologia que utiliza a exponencial matricial via autovalores e autovetores

Na Tabela 4.3, apresentamos os resultados para o caso em que a exponencial matricial é resolvida pelo método que utiliza os autovalores e autovetores da matriz $VM_c(t)$, juntamente com o princípio de superposição.

Tabela 4.3: Potências do Problema Teste BSS-6 quando usamos a proposta AAFC-2.

	POW			AAFC-2			
	2,0	2,0	2,0	2,0	1,0	1,0	1,0
Δx (cm)	2,0	2,0	2,0	2,0	1,0	1,0	1,0
Δt (ms)	10,0	100,0	10,0	1,0	100,0	10,0	1,0
$t = 0,0s$	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
$t = 0,1s$	0,9298	0,9271	0,9358	0,9993	0,9271	0,9358	0,9993
$t = 0,2s$	0,8732	0,8705	0,8766	0,9243	0,8704	0,8766	0,9243
$t = 0,5s$	0,7596	0,7571	0,7608	0,7846	0,7571	0,7607	0,7845
$t = 1,0s$	0,6587	0,6569	0,6595	0,6704	0,6568	0,6594	0,6703
$t = 1,5s$	0,6432	0,6418	0,6438	0,6487	0,6417	0,6437	0,6486
$t = 2,0s$	0,6306	0,6294	0,6312	0,6356	0,6293	0,6311	0,6355
Erro Rel.	-	2,48e-03	3,36e-03	4,31e-02	2,55e-03	3,34e-03	4,31e-02

Na Tabela 4.3, observamos que os resultados obtidos divergem da ref. [76] conforme a malha temporal é refinada. Este fato ocorre de forma semelhante nas duas malhas espaciais testadas, o que sugere que o problema esteja na metodologia aplicada na variável temporal.

4.5.1.3 Comparação entre Euler Implícito Iterativo e exponencial matricial por Schur-Parlett

Nesta subseção, apresentamos uma comparação entre as duas formas de tratamento das equações dos fluxos na variável temporal: uma numérica, via Euler Implícito, e outra analítica, via Schur-Parlett para as exponenciais matriciais. Entretanto, em ambos os casos, as equações dos fluxos e dos precursores são tratadas de forma iterativa de fonte.

Tabela 4.4: Potências do Problema Teste BSS-6 quando usamos as propostas Euler Implícito Iterativo e Schur-Parlett.

Δx (cm)	EIIIF-2			SPFC-2			SPFM-2			SPFQA-2		
	2,0	2,0	2,0	2,0	2,0	2,0	2,0	2,0	2,0	2,0	2,0	2,0
Δt (ms)	10,0	1,0	0,1	10,0	1,0	0,1	10,0	1,0	0,1	10,0	1,0	0,1
$t = 0,0s$	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
$t = 0,1s$	0,9299	0,9300	0,9300	0,9283	0,9297	0,9299	0,9284	0,9297	0,9299	0,9284	0,9297	0,9299
$t = 0,2s$	0,8733	0,8735	0,8735	0,8722	0,8733	0,8735	0,8722	0,8733	0,8735	0,8723	0,8733	0,8735
$t = 0,5s$	0,7598	0,7600	0,7600	0,7592	0,7598	0,7600	0,7593	0,7599	0,7600	0,7593	0,7599	0,7600
$t = 1,0s$	0,6590	0,6592	0,6592	0,6587	0,6591	0,6592	0,6588	0,6591	0,6592	0,6588	0,6591	0,6592
$t = 1,5s$	0,6434	0,6436	0,6436	0,6433	0,6435	0,6436	0,6434	0,6436	0,6436	0,6434	0,6436	0,6436
$t = 2,0s$	0,6309	0,6310	0,6310	0,6308	0,6310	0,6310	0,6308	0,6310	0,6310	0,6309	0,6310	0,6310
tempo(s)	0,378	2,963	30,737	11,116	158,236	1190,345	14,932	172,385	1395,807	18,132	188,677	1369,408
Erro Rel.	2,51e-04	4,40e-04	4,40e-04	8,82e-04	3,64e-04	4,32e-04	8,40e-04	3,64e-04	4,32e-04	8,21e-04	3,64e-04	4,32e-04

Δx (cm)	EIIIF-2			SPFC-2			SPFM-2			SPFQA-2		
	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0	1,0
Δt (ms)	10,0	1,0	0,1	10,0	1,0	0,1	10,0	1,0	0,1	10,0	1,0	0,1
$t = 0,0s$	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
$t = 0,1s$	0,9298	0,9299	0,9299	0,9283	0,9296	0,9299	0,9283	0,9296	0,9299	0,9283	0,9296	0,9299
$t = 0,2s$	0,8733	0,8735	0,8735	0,8721	0,8732	0,8734	0,8722	0,8732	0,8734	0,8722	0,8732	0,8734
$t = 0,5s$	0,7597	0,7599	0,7599	0,7591	0,7598	0,7599	0,7592	0,7598	0,7599	0,7592	0,7598	0,7599
$t = 1,0s$	0,6589	0,6591	0,6591	0,6586	0,6590	0,6591	0,6587	0,6590	0,6591	0,6587	0,6590	0,6591
$t = 1,5s$	0,6433	0,6435	0,6435	0,6432	0,6435	0,6435	0,6433	0,6435	0,6435	0,6433	0,6435	0,6435
$t = 2,0s$	0,6308	0,6309	0,6309	0,6307	0,6309	0,6309	0,6307	0,6309	0,6309	0,6308	0,6309	0,6309
tempo(s)	1,325	11,743	140,574	66,002	639,803	6245,476	68,341	702,026	6852,249	80,965	743,249	7256,354
Erro Rel.	1,57e-04	3,45e-04	3,45e-04	9,16e-04	2,80e-04	3,28e-04	8,78e-04	2,80e-04	3,28e-04	8,82e-04	2,80e-04	3,28e-04

Ao observar os resultados da Tabela 4.4, percebemos uma boa concordância dos nossos resultados com os resultados do código POW. Esta concordância é da ordem de 10^{-4} quando comparamos com os resultados da referência. Percebemos também que os nossos resultados estão convergindo a medida que a malha é refinada.

No que diz respeito a performance, a proposta numérica demanda tempos computacionais muito menores que as propostas analíticas, quando comparamos as mesmas malhas temporais. Essa diferença poderia ser prevista, uma vez que, as propostas analíticas demandam um número maior de operações que a proposta numérica, quando utilizamos as mesmas malhas. Entretanto, a nossa expectativa ao investigar as propostas analíticas era de se obter resultados mais precisos em malhas mais grossas. No entanto, neste problema teste, verificamos que este objetivo não foi atingido.

Observamos também que as três propostas analíticas (SPFC, SPFM e SPFQA) geram resultados com uma precisão semelhante, principalmente em malhas mais finas. Entretanto, os tempos computacionais para a proposta de fontes constantes (SPFC) são consideravelmente menores, o que nos indica uma maior eficiência. Por fim, destacamos que este é um problema subcrítico ($K = 0,901593$), onde os autovalores da matriz $\mathbf{VM}_c(t)$ são todos reais negativos. Mais adiante neste trabalho, investigamos problemas supercríticos.

4.5.1.4 *Comparação entre exponencial matricial via aproximação de Padé e via Schur-Parlett*

Na Tabela 4.5, apresentamos os resultados obtidos por duas diferentes propostas para a avaliação das exponenciais matriciais. Uma delas utiliza a decomposição de Schur juntamente com a proposta de Parlett para matrizes triangulares. A outra proposta é baseada na aproximação de Padé ($p = q = 13$) juntamente com

a técnica *scaling and squaring*, sendo que na última linha da tabela, apresentamos as potências de dois utilizadas na implementação desta técnica.

Tabela 4.5: Potências do Problema Teste BSS-6 quando utilizamos exponenciais matricial via Schur-Parlett e via aproximação de Padé.

Δx (cm)	SPFC-2				APFC-2			
	2,0	2,0	1,0	1,0	2,0	2,0	1,0	1,0
Δt (ms)	10,0	1,0	10,0	1,0	10,0	1,0	10,0	1,0
$t = 0,0s$	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000	1,0000
$t = 0,1s$	0,9283	0,9297	0,9283	0,9296	0,9283	0,9297	0,9283	0,9296
$t = 0,2s$	0,8722	0,8733	0,8721	0,8732	0,8722	0,8733	0,8721	0,8732
$t = 0,5s$	0,7592	0,7598	0,7591	0,7598	0,7592	0,7598	0,7591	0,7598
$t = 1,0s$	0,6587	0,6591	0,6586	0,6590	0,6587	0,6591	0,6586	0,6590
$t = 1,5s$	0,6433	0,6435	0,6432	0,6435	0,6433	0,6435	0,6432	0,6435
$t = 2,0s$	0,6308	0,6310	0,6307	0,6309	0,6308	0,6310	0,6307	0,6309
tempo(s)	11,116	158,24	66,002	639,80	12,065	103,43	87,636	865,79
$2^j: j =$	-	-	-	-	18	14	20	17

Na Tabela 4.5, observamos que as duas propostas geram os resultados com pelo menos quatro dígitos iguais. Entretanto, a proposta que utiliza a aproximação de Padé apresenta um significativo crescimento no custo computacional quando a malha espacial é refinada. Esse significativo crescimento está relacionado ao fato que a aproximação de Padé e a técnica *scaling and squaring* utilizam potências de matrizes, assim, ao aumentar ordem das matrizes, o número de operações cresce significativamente. Entretanto, em problemas que necessitem de menores potências de dois na técnica *scaling and squaring*, esta metodologia pode se tornar mais efetiva, como observamos no caso $\Delta x = 2cm$ e $\Delta t = 1ms$. Lembramos que essa técnica é aplicada para reduzir a norma da matriz a ser aplicada a aproximação de Padé.

Visto que, os resultados obtidos pela metodologia de Schur-Parlett e pela aproximação de Padé são os mesmos, nas tabelas a seguir onde comparamos as duas propostas, apresentamos os resultados nas mesmas colunas. Entretanto, acrescentamos uma linha para apresentar os tempos computacionais de cada uma das metodologias, onde $tempo_{sp}$ é o tempo da metodologia de Schur-Parlett e $tempo_{ap}$ é o tempo da metodologia que utiliza a aproximação de Padé.

4.5.2 Problema Teste Homogêneo Bidimensional

Este problema é o Problema Teste IV apresentado no caso estacionário, que é definido em um meio homogêneo, e destacamos que ele é um problema super-crítico. Além dos parâmetros nucleares utilizados no problema estacionário (Tabela 3.10), apresentamos, na Tabela 4.6, os demais parâmetros necessários para a solução do problema da cinética.

Tabela 4.6: Parâmetros nucleares para o Problema Teste Homogêneo Bidimensional.

i	$\lambda_i(\text{s}^{-1})$	β_i	χ_i^d	$v_i(\text{cm s}^{-1})$
1	0,08	0,0064	1,0	$3,0 \times 10^7$
2	-	-	0,0	$2,2 \times 10^5$

Fonte: Aboanber e Nahla (2006) [1].

No tempo $t = 0\text{s}$ é inserida uma perturbação, que consiste em uma diminuição uniforme instantânea da seção de choque de absorção do grupo térmico da forma

$$\Sigma_{a2} = \Sigma_{a2}(0) - 0,0000369. \quad (4.105)$$

A fim de comparação, adotamos os resultados obtidos por Aboanber e Nahla (2006) [1] como referência para o cálculo do erro relativo. No seu trabalho, Aboanber e Nahla propõem uma discretização espacial por meio da aproximação por diferença central. No sistema global de equações diferenciais no tempo resultante da discretização espacial, os autores propõem uma solução analítica que é na forma de uma exponencial matricial, em que aplicam a aproximação de Padé. Como as entradas da matriz exponencial podem depender da variável temporal, propõem uma “marcha” no tempo, onde as entradas são assumidas como valores médios para cada intervalo de tempo.

Observe que este problema homogêneo tem apenas um grupo de precursores, assim, as nossas propostas de fontes mistas e de fontes quase analíticas são idênticas, portanto, apresentamos apenas os resultados para fontes mistas. Além disso, os resultados apresentados nas tabelas a seguir são referentes aos fluxos térmicos no centro do núcleo.

4.5.2.1 Comparação entre os resultados obtidos via sistema global e via sistemas iterativos de fonte

O primeiro estudo comparativo que propomos é entre as metodologias que tratam as equações da cinética como um único sistema global e como dois sistemas iterativos de fonte. Na Tabela 4.7, apresentamos os resultados da abordagem analítica dos sistemas de equações diferenciais na variável temporal, onde as soluções estão associadas as exponenciais matriciais.

Tabela 4.7: Fluxos térmicos do Problema Teste Homogêneo Bidimensional quando usamos os sistemas globais e os sistemas iterativos resolvidos via exponenciais matriciais.

	Ref. [1]	SPSG-2/APSG-2			SPFC-2/APFC-2			SPFM-2/APFM-2		
$\Delta x = \Delta y$ (cm)	20	20	10	5	20	10	5	20	10	5
Δt (ms)	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0
$t = 0,00s$	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382
$t = 0,08s$	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609
$t = 0,16s$	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805
$t = 0,24s$	0,974	0,975	0,974	0,974	0,975	0,974	0,974	0,975	0,974	0,974
$t = 0,32s$	1,122	1,123	1,122	1,122	1,123	1,122	1,122	1,123	1,122	1,122
$t = 0,40s$	1,252	1,253	1,252	1,252	1,253	1,252	1,252	1,253	1,252	1,252
Erro Rel.	-	7,79e-04	0,000	0,000	7,79e-04	0,000	0,000	7,79e-04	0,000	0,000
tempo _{sp} (s)	-	0,011	0,308	10,459	0,009	0,157	3,418	0,010	0,135	2,359
tempo _{ap} (s)	-	0,010	0,281	8,300	0,009	0,138	2,978	0,010	0,111	1,972
$2^j: j=$	-	14	15	17	12	14	17	12	14	17

	Ref. [1]	SPSG-2/APSG-2			SPFC-2/APFC-2			SPFM-2/APFM-2		
$\Delta x = \Delta y$ (cm)	20	10	10	10	10	10	10	10	10	10
Δt (ms)	4,0	P.U.	40,0	4,0	P.U.	40,0	4,0	P.U.	40,0	4,0
$t = 0,00s$	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382
$t = 0,08s$	0,609	0,609	0,609	0,609	0,610	0,610	0,609	0,610	0,609	0,609
$t = 0,16s$	0,805	0,805	0,805	0,805	0,811	0,806	0,805	0,807	0,805	0,805
$t = 0,24s$	0,974	0,974	0,974	0,974	0,992	0,976	0,974	0,982	0,975	0,974
$t = 0,32s$	1,122	1,122	1,122	1,122	1,159	1,126	1,122	1,137	1,124	1,122
$t = 0,40s$	1,252	1,252	1,252	1,252	1,315	1,257	1,252	1,278	1,254	1,252
Erro Rel.	-	0,0000	0,0000	0,0000	3,40e-02	3,08e-03	0,0000	1,40e-02	1,35e-03	0,0000
tempo _{sp} (s)	-	0,281*	0,316	0,308	0,102*	0,111	0,157	0,067*	0,077	0,135
tempo _{ap} (s)	-	0,282*	0,260	0,281	0,095*	0,096	0,138	0,059*	0,069	0,111
$2^j: j=$	-	22	18	15	21	18	14	21	18	14

Na Tabela 4.7, o sinal * nas colunas do Passo Único (P.U.) indicam o tempo necessário para obter os fluxos para cada tempo desejado. Os tempos das demais colunas representam o tempo necessário para obter os fluxos de todos os passos no tempo até $t = 0,4s$. Nesta tabela percebemos que trabalhar com um único sistema global demanda mais tempo computacional do que os sistemas desacoplados. Essa diferença nos tempos tendem a aumentar a medida que refinamos a malha espacial, ou seja, aumentamos as dimensões dos sistemas. Este fato ocorre pois a operação mais custosa do código é a exponenciação, no caso do sistema global a ordem da matriz é $N(G + P) \times N(G + P)$ e no caso dos sistemas desacoplados $NG \times NG$.

Ainda na Tabela 4.7, percebemos que a abordagem que utiliza um sistema global não necessita discretizar a variável temporal para obter a mesma precisão dos resultados. Entretanto, mesmo assim demanda mais tempo computacional do que a abordagem desacoplada iterativa fazendo passos no tempo. Observamos também que para este problema teste, o fato da matriz em que determinamos a exponencial do sistema global ter um valor de condicionamento mais elevado ($8,5 \times 10^8$) do que a matriz do sistema desacoplado ($1,3 \times 10^6$), não afetou a precisão dos resultados. Outro aspecto que destacamos é a influência da técnica *scaling and squaring* no custo computacional. Por exemplo, quando observamos os tempos da metodologia que trabalha com o sistema global, percebemos que o passo único leva mais tempo que do que fazer passos no tempo, por causa de um maior número de potências utilizadas dessa técnica. Por fim, quando comparamos os tempos computacionais entre as metodologias Schur-Parlett e aproximação de Padé, percebemos uma vantagem da aproximação de Padé, tanto para os sistemas acoplados como desacoplados.

A exemplo do estudo comparativo que acabamos de fazer, propomos uma comparação entre as abordagens que utilizam o método de Euler Implícito nos sistemas diferenciais. Assim, na Tabela 4.8, apresentamos os resultados ao aplicar esse método nos sistemas globais e nos sistemas desacoplados iterativos.

Tabela 4.8: Fluxos térmicos do Problema Teste Homogêneo Bidimensional quando usamos os sistemas globais e os sistemas iterativos resolvidos via Euler Implícito.

	Ref. [1]	EISG-2			EIIIF-2		
$\Delta x = \Delta y$ (cm)	20	20	10	5	20	10	5
Δt (ms)	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0	4,0
$t = 0,00s$	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382
$t = 0,08s$	0,609	0,609	0,608	0,608	0,609	0,608	0,608
$t = 0,16s$	0,805	0,804	0,804	0,803	0,804	0,804	0,803
$t = 0,24s$	0,974	0,973	0,973	0,973	0,973	0,973	0,973
$t = 0,32s$	1,122	1,121	1,120	1,120	1,121	1,120	1,120
$t = 0,40s$	1,252	1,251	1,250	1,250	1,251	1,250	1,250
tempo(s)	-	0,003	0,010	0,149	0,004	0,016	0,147
Erro Rel.	-	9,00e-04	1,49e-03	1,68e-03	9,00e-04	1,49e-03	1,68e-03

	Ref. [1]	EISG-2			EIIIF-2		
$\Delta x = \Delta y$ (cm)	20	20	10	5	20	10	5
Δt (ms)	4,0	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4	0,4
$t = 0,00s$	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382
$t = 0,08s$	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609
$t = 0,16s$	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805
$t = 0,24s$	0,974	0,974	0,974	0,974	0,974	0,974	0,974
$t = 0,32s$	1,122	1,122	1,122	1,122	1,122	1,122	1,122
$t = 0,40s$	1,252	1,253	1,252	1,252	1,253	1,252	1,252
tempo(s)	-	0,008	0,054	0,753	0,018	0,089	0,472
Erro Rel.	-	4,50e-04	0,0000	0,0000	4,50e-04	0,0000	0,0000

Na Tabela 4.8, percebemos uma precisão semelhante entre as duas formas de tratar os sistemas diferenciais. No entanto, na questão do custo computacional, notamos que a abordagem global é mais rápida em sistemas de menores dimensões e a abordagem iterativa torna-se mais rápida a medida que a ordem dos sistemas crescem. Recordamos que a ordem dos sistemas dependem do número de nodos, de grupos de energia e de precursores. Neste problema teste, as ordens dos sistemas são pequenas, pois é um problema homogêneo, assim, demanda poucos nodos, e são apenas dois grupos de energia e um de precursores. Assim, em problemas heterogêneos, em que há diversas regiões materiais, vários grupos de energia e de precursores, o custo computacional da abordagem iterativa tende a ser menor mesmo em malhas grossas.

4.5.2.2 Comparação dos resultados obtidos via Euler Implícito Iterativo e via exponencial matricial

Nesta subseção apresentamos os resultados comparativos entre as diferentes abordagens propostas neste trabalho. Os resultados estão dispostos em duas tabelas que são caracterizadas pela malha espacial.

Tabela 4.9: Fluxos térmicos do Problema Teste Homogêneo Bidimensional para $\Delta x = \Delta y = 20\text{cm}$.

	Ref. [1]	EIIIF-2				SPFC-2/APFC-2			SPFM-2/APFM-2		
$\Delta x = \Delta y$ (cm)	20	20	20	20	20	20	20	20	20	20	20
Δt (ms)	4,0	10,0	4,0	1,0	0,1	10,0	4,0	1,0	10,0	4,0	1,0
$t = 0,00\text{s}$	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382
$t = 0,08\text{s}$	0,609	0,607	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609
$t = 0,16\text{s}$	0,805	0,802	0,804	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805
$t = 0,24\text{s}$	0,974	0,971	0,973	0,974	0,974	0,975	0,975	0,975	0,975	0,975	0,975
$t = 0,32\text{s}$	1,122	1,118	1,121	1,122	1,123	1,123	1,123	1,123	1,123	1,123	1,123
$t = 0,40\text{s}$	1,252	1,248	1,251	1,252	1,253	1,254	1,253	1,253	1,253	1,253	1,253
Erro Rel.	-	3,31e-03	9,00e-04	0,000	7,79e-04	1,10e-03	7,79e-04	7,79e-04	7,79e-04	7,79e-04	7,79e-04
tempo _{sp} (s)	-	0,003	0,004	0,011	0,067	0,006	0,009	0,023	0,006	0,010	0,029
tempo _{ap} (s)	-	0,003	0,004	0,011	0,067	0,006	0,009	0,023	0,006	0,010	0,029
$2^j: j=$	-	-	-	-	-	13	12	10	13	12	10

	Ref. [1]	EIIIF-4				SPFC-4/APFC-4			SPFM-4/APFM-4		
$\Delta x = \Delta y$ (cm)	20	20	20	20	20	20	20	20	20	20	20
Δt (ms)	4,0	10,0	4,0	1,0	0,1	10,0	4,0	1,0	10,0	4,0	1,0
$t = 0,00\text{s}$	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382
$t = 0,08\text{s}$	0,609	0,607	0,608	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609
$t = 0,16\text{s}$	0,805	0,802	0,804	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805
$t = 0,24\text{s}$	0,974	0,971	0,973	0,974	0,974	0,975	0,975	0,975	0,975	0,975	0,975
$t = 0,32\text{s}$	1,122	1,118	1,121	1,122	1,122	1,123	1,123	1,123	1,123	1,123	1,122
$t = 0,40\text{s}$	1,252	1,248	1,251	1,252	1,253	1,254	1,253	1,253	1,253	1,253	1,253
Erro Rel.	-	3,31e-03	1,01e-03	0,000	4,50e-04	1,10e-03	7,79e-04	7,79e-04	7,79e-04	7,79e-04	6,36e-04
tempo _{sp} (s)	-	0,002	0,004	0,011	0,066	0,005	0,008	0,022	0,006	0,010	0,030
tempo _{ap} (s)	-	0,002	0,004	0,011	0,066	0,005	0,008	0,022	0,005	0,009	0,028
$2^j: j=$	-	-	-	-	-	13	12	10	13	12	10

Tabela 4.10: Fluxos térmicos do Problema Teste Homogêneo Bidimensional para $\Delta x = \Delta y = 10\text{cm}$.

	Ref. [1]	EIIIF-2				SPFC-2/APFC-2			SPFM-2/APFM-2		
$\Delta x = \Delta y$ (cm)	20	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10
Δt (ms)	4,0	10,0	4,0	1,0	0,1	10,0	4,0	1,0	10,0	4,0	1,0
$t = 0,00\text{s}$	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382
$t = 0,08\text{s}$	0,609	0,607	0,608	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609
$t = 0,16\text{s}$	0,805	0,802	0,804	0,804	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805
$t = 0,24\text{s}$	0,974	0,970	0,973	0,974	0,974	0,975	0,974	0,974	0,974	0,974	0,974
$t = 0,32\text{s}$	1,122	1,118	1,120	1,122	1,122	1,123	1,122	1,122	1,122	1,122	1,122
$t = 0,40\text{s}$	1,252	1,247	1,250	1,251	1,252	1,253	1,252	1,252	1,253	1,252	1,252
Erro Rel.	-	3,76e-03	1,49e-03	6,36e-04	0,000	7,79e-04	0,000	0,000	4,50e-04	0,000	0,000
tempo _{sp} (s)	-	0,009	0,016	0,053	0,232	0,125	0,157	0,291	0,094	0,135	0,273
tempo _{ap} (s)	-	0,009	0,016	0,053	0,232	0,108	0,138	0,273	0,074	0,111	0,241
$2^j: j=$	-	-	-	-	-	16	14	12	16	14	12
	Ref. [1]	EIIIF-4				SPFC-4/APFC-4			SPFM-4/APFM-4		
$\Delta x = \Delta y$ (cm)	20	10	10	10	10	10	10	10	10	10	10
Δt (ms)	4,0	10,0	4,0	1,0	0,1	10,0	4,0	1,0	10,0	4,0	1,0
$t = 0,00\text{s}$	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382	0,382
$t = 0,08\text{s}$	0,609	0,607	0,608	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609	0,609
$t = 0,16\text{s}$	0,805	0,802	0,803	0,804	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805	0,805
$t = 0,24\text{s}$	0,974	0,970	0,973	0,974	0,974	0,975	0,974	0,974	0,974	0,974	0,974
$t = 0,32\text{s}$	1,122	1,118	1,120	1,121	1,122	1,123	1,122	1,122	1,122	1,122	1,122
$t = 0,40\text{s}$	1,252	1,247	1,250	1,251	1,252	1,253	1,252	1,252	1,252	1,252	1,252
Erro Rel.	-	3,76e-03	1,68e-03	7,79e-04	0,000	7,79e-04	0,000	0,000	0,000	0,000	0,000
tempo _{sp} (s)	-	0,008	0,015	0,051	0,232	0,093	0,126	0,257	0,097	0,141	0,282
tempo _{ap} (s)	-	0,008	0,015	0,051	0,232	0,071	0,102	0,221	0,077	0,111	0,244
$2^j: j=$	-	-	-	-	-	16	14	12	16	14	12

Nas Tabelas 4.9 e 4.10, percebemos que a metodologia que utiliza as exponenciais matriciais convergem para a solução em malhas temporais mais grossas quando comparamos com o método de Euler Implícito. Por outro lado, entre as duas propostas para determinar as exponenciais matriciais, a aproximação de Padé apresenta uma vantagem na questão do custo computacional perante a abordagem de Schur-Parlett. Além disto, as aproximações das densidades de correntes por dois e quatro valores de fluxos médios produzem resultados muito próximos, tanto na precisão, quanto no tempo computacional. Por fim, destacamos que mesmo este problema sendo supercrítico ($K = 1,011329$), os autovalores da matriz em que calculamos a exponencial ou são reais negativos ($\max = -0,155476$) ou são complexos com parte imaginária muito pequena ($6,5 \times 10^{-12}$) e parte real negativa.

4.5.3 Problema Teste TWIGL

Este problema é o Problema Teste VI apresentado no caso estacionário, que é formado por três tipos de materiais dispostos em um região quadrada de 80cm, como apresentamos na Figura 3.9. Além dos parâmetros nucleares utilizados no problema estacionário (Tabela 3.18), na Tabela 4.11, dispomos os demais parâmetros necessários para o problema da cinética.

Tabela 4.11: Parâmetros nucleares para o Problema Teste TWIGL.

i	$\lambda_i(\text{s}^{-1})$	β_i	χ_i^d	$v_i(\text{cm s}^{-1})$
1	0,08	0,0075	1,0	$1,0 \times 10^7$
2	-	-	0,0	$2,0 \times 10^5$

Fonte: Smith (1979) [85].

A fim de comparação, adotamos os resultados obtidos por Sutton e Aviles (1996) [88] através código SPANDEX como referência para o cálculo do erro relativo. Sutton e Aviles aplicam o método de expansão nodal no espaço e o método de Runge-Kutta generalizado de Rosenbrock no tempo, com passo de tempo variável. Escolhemos esta referência para comparação, pois apresenta resultados para

diferentes configurações de malha e uma convergência nos quatro dígitos apresentados. Além dos resultados obtidos pelo código SPANDEX, adotamos também os resultados obtidos pelo código QUANDRY, que é a implementação da metodologia proposta por Smith (1979) [85]. Smith aplica o chamado método nodal analítico (MNA) nas variáveis espaciais, que consiste na integração transversal da equação de difusão, resultando em EDO's unidimensionais que são resolvidas analiticamente. Além disto, propõe uma aproximação quadrática para as densidades de correntes nos contornos dos nodos. Por fim, o sistema de equações ordinárias no tempo resultante da aplicação do MNA, Smith resolve pelo método Theta: $\theta = 1,0$ (Euler Implícito) para os termos dos fluxos e $\theta = 0,5$ (Crank-Nicolson) para os termos dos precursores. O código que implementa esta metodologia é chamado de QUANDRY (**Q**uadratic **A**nalitic **N**odal **D**iffusion **T**heory).

4.5.3.1 *Perturbação instantânea*

A primeira proposta de transiente deste problema teste é feita a partir de uma perturbação instantânea do sistema crítico. Essa perturbação consiste na diminuição instantânea da seção de choque de absorção do grupo térmico do Material 1 no tempo $t = 0s$ da forma

$$\Sigma_{a2} = \Sigma_{a2}(0) - 0,0035. \quad (4.106)$$

Nas Tabelas 4.12 e 4.13, apresentamos os resultados das potências para diversos intervalos de tempos e configurações de malha. Os valores das potências são normalizados da forma que a potência no tempo $t = 0s$ seja igual a um e os erros relativos são em relação aos resultados obtidos pelo código SPANDEX com uma malha de 400 nodos e 130 passos de tempo (passo variável). Adotamos esta configuração de malha pois a partir dela o código gera resultados com pelo menos 4 dígitos fixos.

Tabela 4.12: Potências do Problema Teste TWIGL com uma perturbação instantânea e domínio dividido em 100 nodos.

Nº nodos	QUANDRY		SPANDEX	EIIIF-2			SPFC-2/APFC-2			SPFM-2/APFM-2		
	36	100	400	100	100	100	100	100	100	100	100	100
Δt (ms)	10,0	2,5	*	10,0	2,5	0,1	10,0	2,5	0,1	10,0	2,5	0,1
$t = 0,0s$	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
$t = 0,1s$	2,064	2,061	2,062	2,079	2,080	2,081	2,082	2,081	2,081	2,081	2,081	2,081
$t = 0,2s$	2,076	2,078	2,079	2,098	2,098	2,098	2,100	2,099	2,098	2,099	2,099	2,098
$t = 0,3s$	2,095	2,095	2,096	2,116	2,116	2,116	2,118	2,117	2,116	2,117	2,116	2,116
$t = 0,4s$	2,112	2,113	2,114	2,134	2,134	2,134	2,136	2,135	2,134	2,135	2,134	2,134
$t = 0,5s$	2,130	2,131	2,131	2,152	2,152	2,152	2,154	2,153	2,152	2,153	2,153	2,152
Erro Rel.	9,09e-04	4,17e-04	-	9,07e-03	9,16e-03	9,24e-03	1,01e-02	9,62e-03	9,24e-03	9,62e-03	9,43e-03	9,24e-03
tempo _{sp} (s)	-	-	-	0,013	0,028	0,267	0,117	0,180	1,108	0,102	0,208	1,285
tempo _{ap} (s)	-	-	-	0,013	0,028	0,267	0,077	0,157	1,054	0,090	0,178	1,238
$2^j: j=$	-	-	-	-	-	-	16	14	9	16	14	9

Nº nodos	QUANDRY		SPANDEX	EIIIF-4			SPFC-4/APFC-4			SPFM-4/APFM-4		
	36	100	400	100	100	100	100	100	100	100	100	100
Δt (ms)	10,0	2,5	*	10,0	2,5	0,1	10,0	2,5	0,1	10,0	2,5	0,1
$t = 0,0s$	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
$t = 0,1s$	2,064	2,061	2,062	2,068	2,069	2,070	2,071	2,070	2,070	2,070	2,070	2,070
$t = 0,2s$	2,076	2,078	2,079	2,087	2,087	2,087	2,089	2,087	2,087	2,088	2,087	2,087
$t = 0,3s$	2,095	2,095	2,096	2,105	2,105	2,105	2,106	2,105	2,105	2,105	2,105	2,105
$t = 0,4s$	2,112	2,113	2,114	2,122	2,122	2,122	2,124	2,123	2,122	2,123	2,123	2,122
$t = 0,5s$	2,130	2,131	2,131	2,140	2,140	2,140	2,142	2,141	2,140	2,141	2,140	2,140
Erro Rel.	9,09e-04	4,17e-04	-	3,77e-03	3,84e-03	3,93e-03	4,67e-03	4,12e-03	3,93e-03	4,21e-03	4,02e-03	3,93e-03
tempo _{sp} (s)	-	-	-	0,010	0,029	0,266	0,100	0,185	1,113	0,106	0,202	1,284
tempo _{ap} (s)	-	-	-	0,010	0,029	0,266	0,082	0,162	1,068	0,085	0,178	1,208
$2^j: j=$	-	-	-	-	-	-	16	14	9	16	14	9

* Passo de tempo variável, 130 passos de tempo.

Tabela 4.13: Potências do Problema Teste TWIGL com uma perturbação instantânea e domínio dividido em 400 nodos.

Nº nodos	QUANDRY		SPANDEX	EIIIF-2			SPFC-2/APFC-2			SPFM-2/APFM-2		
	36	100	400	400	400	400	400	400	400	400	400	400
Δt (ms)	10,0	2,5	*	10,0	2,5	0,1	10,0	2,5	0,1	10,0	2,5	0,1
$t = 0,0s$	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
$t = 0,1s$	2,064	2,061	2,062	2,061	2,062	2,062	2,063	2,062	2,062	2,062	2,062	2,062
$t = 0,2s$	2,076	2,078	2,079	2,079	2,079	2,079	2,081	2,079	2,079	2,080	2,079	2,079
$t = 0,3s$	2,095	2,095	2,096	2,096	2,096	2,096	2,098	2,097	2,096	2,097	2,097	2,096
$t = 0,4s$	2,112	2,113	2,114	2,114	2,114	2,114	2,116	2,114	2,114	2,115	2,114	2,114
$t = 0,5s$	2,130	2,131	2,131	2,132	2,132	2,132	2,133	2,132	2,132	2,132	2,132	2,132
Erro Rel.	9,09e-04	4,17e-04	-	2,95e-04	2,09e-04	2,09e-04	8,60e-04	2,95e-04	2,09e-04	4,17e-04	2,95e-04	2,09e-04
tempo _{sp} (s)	-	-	-	0,103	0,215	2,071	2,019	2,847	18,794	2,193	3,166	22,097
tempo _{ap} (s)	-	-	-	0,103	0,215	2,071	1,610	2,255	17,989	1,678	2,541	21,986
$2^j: j=$	-	-	-	-	-	-	18	16	11	18	16	11

Nº nodos	QUANDRY		SPANDEX	EIIIF-4			SPFC-4/APFC-4			SPFM-4/APFM-4		
	36	100	400	400	400	400	400	400	400	400	400	400
Δt (ms)	10,0	2,5	*	10,0	2,5	0,1	10,0	2,5	0,1	10,0	2,5	0,1
$t = 0,0s$	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
$t = 0,1s$	2,064	2,061	2,062	2,059	2,060	2,060	2,061	2,060	2,060	2,061	2,060	2,060
$t = 0,2s$	2,076	2,078	2,079	2,077	2,077	2,077	2,079	2,078	2,077	2,078	2,077	2,077
$t = 0,3s$	2,095	2,095	2,096	2,095	2,095	2,095	2,096	2,095	2,095	2,095	2,095	2,095
$t = 0,4s$	2,112	2,113	2,114	2,112	2,112	2,112	2,114	2,112	2,112	2,113	2,112	2,112
$t = 0,5s$	2,130	2,131	2,131	2,130	2,130	2,130	2,131	2,130	2,130	2,130	2,130	2,130
Erro Rel.	9,09e-04	4,17e-04	-	9,09e-04	7,81e-04	7,81e-04	2,09e-04	6,92e-04	7,81e-04	4,66e-04	7,81e-04	7,81e-04
tempo _{sp} (s)	-	-	-	0,085	0,207	2,114	2,077	2,877	18,814	2,126	3,139	22,105
tempo _{ap} (s)	-	-	-	0,085	0,207	2,114	1,628	2,246	18,206	1,695	2,610	22,015
$2^j: j=$	-	-	-	-	-	-	18	16	11	18	16	11

* Passo de tempo variável, 130 passos de tempo.

Nas Tabelas 4.12 e 4.13, notamos que as nossas metodologias geram resultados concordantes com os resultados dos outros dois códigos (SPANDEX e QUANDRY), a medida que refinamos as malhas. Nesse aspecto, observamos que o refinamento da malha espacial tem uma maior influência na precisão dos resultados do que a malha temporal. Por exemplo, quando observamos os resultados no refinamento temporal, tanto na Tabela 4.12 (100 nodos) como na Tabela 4.13 (400 nodos), notamos que os nossos resultados alteram-se no máximo em dois milésimos. Entretanto, quando observamos os resultados no refinamento espacial (comparação entre as Tabelas 4.12 e 4.13), notamos que os nossos resultados alteram-se na ordem dos centésimos.

Destacamos também o ganho computacional e uma mais rápida convergência da abordagem que utiliza o método de Euler Implícito perante a abordagem analítica via exponenciais matriciais. Dentre as duas propostas para determinar as exponenciais matriciais, percebemos um pequeno ganho da proposta que utiliza as aproximações de Padé. Esse pequeno ganho está relacionado ao fato que a exponencial matricial é determinada uma única vez, pois os elementos da matriz a exponenciar não dependem da variável temporal. Entretanto, nos casos em que os elementos da matriz (parâmetros nucleares) dependerem do tempo, é necessário fazer uma “marcha” no tempo, provocando um maior ganho da proposta via aproximação de Padé. Ademais, notamos também que a proposta de fontes mistas apresentam uma mais rápida convergência do que a proposta de fontes constantes, no entanto, demanda um maior custo computacional.

4.5.3.2 Perturbação em rampa

A segunda proposta de transiente deste problema teste é feita a partir de uma perturbação em rampa do sistema crítico. Essa perturbação consiste na diminuição na forma de rampa da seção de choque de absorção do grupo térmico do Material 1 no tempo $t = 0s$ da forma

$$\Sigma_{a2}(t) = \begin{cases} \Sigma_{a2}(0) \cdot \left(1 - \frac{7}{60}t\right) & \text{se } 0 \leq t \leq 0,2 \\ 0,1465 & \text{se } 0,2 < t \end{cases}. \quad (4.107)$$

Nas tabelas 4.14 e 4.15, apresentamos os resultados das potências para diversos intervalos de tempos e configurações de malha. Da mesma forma que o transiente anterior, os valores das potências são normalizados da forma que a potência no tempo $t = 0$ s seja igual a um e os erros relativos são em relação aos resultados obtidos pelo código SPANDEX com uma malha de 36 nodos e 15 passos de tempo (passo variável).

Destacamos que, diferentemente do caso da perturbação instantânea, os parâmetros nucleares, em particular a seção de choque de absorção, dependem da variável temporal. Com isso, tanto a matriz do sistema linear que surge ao aplicar o método de Euler Implícito nas equações diferenciais, como a matriz da exponencial matricial, variam com o tempo. Assim, tanto a decomposição LU, que propomos para a solução do sistema linear, como o cálculo da exponencial matricial, devem ser determinados em cada intervalo de tempo em que houver variação dos parâmetros. Essa alteração implica em um acréscimo no custo computacional, quando comparamos com o caso em que há uma perturbação instantânea.

Tabela 4.14: Potências do Problema Teste TWIGL com uma perturbação em rampa e domínio dividido em 100 nodos.

Nº nodos	QUANDRY		SPANDEX	EIIIF-2			SPFC-2/APFC-2			SPFM-2/APFM-2		
	36	100	36	100	100	100	100	100	100	100	100	100
Δt (ms)	5,0	2,5	*	5,0	2,5	0,1	5,0	2,5	0,1	5,0	2,5	0,1
$t = 0,0s$	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
$t = 0,1s$	1,305	1,307	1,309	1,312	1,312	1,311	1,321	1,316	1,312	1,321	1,316	1,312
$t = 0,2s$	1,954	1,957	1,960	1,978	1,976	1,975	1,999	1,987	1,976	1,998	1,987	1,976
$t = 0,3s$	2,074	2,074	2,075	2,095	2,094	2,094	2,096	2,095	2,094	2,095	2,095	2,094
$t = 0,4s$	2,092	2,092	2,092	2,113	2,112	2,112	2,113	2,113	2,112	2,113	2,113	2,112
$t = 0,5s$	2,109	2,109	2,110	2,131	2,130	2,130	2,131	2,131	2,130	2,131	2,131	2,130
Erro Rel.	1,66e-03	8,73e-04	-	9,06e-03	8,51e-03	8,40e-03	1,23e-02	1,02e-02	8,51e-03	1,21e-02	1,02e-02	8,51e-03
tempo _{sp} (s)	-	-	-	0,067	0,128	2,888	2,846	6,507	175,83	2,720	6,149	178,98
tempo _{ap} (s)	-	-	-	0,067	0,128	2,888	1,707	3,177	78,783	1,773	3,430	79,367
$2^j: j=$	-	-	-	-	-	-	15	14	9	15	14	9

Nº nodos	QUANDRY		SPANDEX	EIIIF-4			SPFC-4/APFC-4			SPFM-4/APFM-4		
	36	100	36	100	100	100	100	100	100	100	100	100
Δt (ms)	5,0	2,5	*	5,0	2,5	0,1	5,0	2,5	0,1	5,0	2,5	0,1
$t = 0,0s$	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
$t = 0,1s$	1,305	1,307	1,309	1,310	1,310	1,309	1,319	1,314	1,310	1,319	1,314	1,310
$t = 0,2s$	1,954	1,957	1,960	1,968	1,967	1,966	1,989	1,978	1,966	1,989	1,978	1,966
$t = 0,3s$	2,074	2,074	2,075	2,084	2,083	2,083	2,084	2,084	2,083	2,084	2,084	2,083
$t = 0,4s$	2,092	2,092	2,092	2,101	2,101	2,101	2,102	2,101	2,101	2,102	2,101	2,101
$t = 0,5s$	2,109	2,109	2,110	2,119	2,119	2,118	2,120	2,119	2,118	2,119	2,119	2,118
Erro Rel.	1,66e-03	8,73e-04	-	3,96e-03	3,74e-03	3,53e-03	7,88e-03	5,48e-03	3,53e-03	7,82e-03	5,48e-03	3,53e-03
tempo _{sp} (s)	-	-	-	0,071	0,121	2,925	3,097	6,316	181,27	2,807	6,464	185,56
tempo _{ap} (s)	-	-	-	0,071	0,121	2,925	1,738	3,259	78,540	1,735	3,429	79,481
$2^j: j=$	-	-	-	-	-	-	15	14	9	15	14	9

* Passo de tempo variável, 15 passos de tempo.

Tabela 4.15: Potências do Problema Teste TWIGL com uma perturbação em rampa e domínio dividido em 400 nodos.

Nº nodos	QUANDRY		SPANDEX	EIIIF-2			SPFC-2/APFC-2			SPFM-2/APFM-2		
	36	100	36	400	400	400	400	400	400	400	400	400
Δt (ms)	5,0	2,5	*	5,0	2,5	0,1	5,0	2,5	0,1	5,0	2,5	0,1
$t = 0,0s$	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
$t = 0,1s$	1,305	1,307	1,309	1,309	1,309	1,308	1,318	1,313	1,308	1,318	1,313	1,308
$t = 0,2s$	1,954	1,957	1,960	1,962	1,961	1,959	1,983	1,971	1,960	1,982	1,971	1,959
$t = 0,3s$	2,074	2,074	2,075	2,076	2,075	2,075	2,076	2,076	2,075	2,076	2,076	2,075
$t = 0,4s$	2,092	2,092	2,092	2,093	2,093	2,093	2,094	2,093	2,093	2,093	2,093	2,093
$t = 0,5s$	2,109	2,109	2,110	2,111	2,110	2,110	2,111	2,111	2,110	2,111	2,111	2,110
Erro Rel.	1,66e-03	8,73e-04	-	5,96e-04	3,19e-04	3,90e-04	5,59e-03	2,67e-03	3,19e-04	5,37e-03	2,67e-03	3,90e-04
tempo _{sp} (s)	-	-	-	1,204	2,125	58,661	70,172	155,29	3790,60	69,341	156,93	3802,11
tempo _{ap} (s)	-	-	-	1,204	2,125	58,661	51,688	104,81	2199,13	51,760	105,252	2238,46
$2^j: j=$	-	-	-	-	-	-	17	16	11	17	16	11

Nº nodos	QUANDRY		SPANDEX	EIIIF-4			SPFC-4/APFC-4			SPFM-4/APFM-4		
	36	100	36	400	400	400	400	400	400	400	400	400
Δt (ms)	5,0	2,5	*	5,0	2,5	0,1	5,0	2,5	0,1	5,0	2,5	0,1
$t = 0,0s$	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
$t = 0,1s$	1,305	1,307	1,309	1,308	1,308	1,308	1,317	1,313	1,308	1,317	1,313	1,308
$t = 0,2s$	1,954	1,957	1,960	1,960	1,959	1,958	1,981	1,970	1,958	1,981	1,970	1,958
$t = 0,3s$	2,074	2,074	2,075	2,074	2,074	2,073	2,075	2,074	2,073	2,074	2,074	2,073
$t = 0,4s$	2,092	2,092	2,092	2,091	2,091	2,091	2,092	2,091	2,091	2,092	2,091	2,091
$t = 0,5s$	2,109	2,109	2,110	2,109	2,108	2,108	2,109	2,109	2,108	2,109	2,109	2,108
Erro Rel.	1,66e-03	8,73e-04	-	4,51e-04	6,37e-04	8,43e-04	5,07e-03	2,46e-03	8,43e-04	5,07e-03	2,46e-03	8,43e-04
tempo _{sp} (s)	-	-	-	1,324	2,135	54,375	70,156	147,06	3841,24	70,676	148,14	3967,59
tempo _{ap} (s)	-	-	-	1,324	2,135	54,375	51,767	105,77	2203,47	52,032	106,05	2221,85
$2^j: j=$	-	-	-	-	-	-	17	16	11	17	16	11

* Passo de tempo variável, 15 passos de tempo.

Nas Tabelas 4.14 e 4.15, observamos novamente que, a medida que refinamos a malha espacial, os nossos resultados se aproximam dos resultados dos códigos SPANDEX e QUANDRY. Além disso, observamos novamente que o refinamento da malha espacial tem uma maior interferência na precisão dos resultados do que a malha temporal. Quando comparamos o tratamento numérico (EIIF) com o tratamento analítico (APFC, SPFC, APFM e SPFM), percebemos que o tratamento numérico demanda menos tempo computacional e, em geral, melhor precisão, isto quando analisamos mesmas malhas (tempo e espaço). Ademais, as propostas que utilizam as exponenciais matriciais necessitam passos de tempo menores para captar a influência da variação da seção de choque. Este fato pode ser observado nas potências dos tempos 0,1s e 0,2s.

O cálculo da exponencial matricial é a principal causa da grande diferença do custo computacional entre a metodologia numérica e a metodologia analítica. Dentre as duas propostas para determinar as exponenciais matriciais, percebemos um significativo ganho da proposta via aproximação de Padé. Observamos também que o refinamento na malha espacial implica em maior custo computacional do que o refinamento na malha temporal. O que sugere que devemos buscar melhores aproximações das densidades de corrente para obter ganhos mais expressivos.

Com relação às diferentes propostas de aproximações das densidades de correntes (dois e quatro valores de fluxos médios), percebemos que as aproximações com mais valores de fluxos médios produziram melhores resultados, sem prejuízo no tempo computacional. A aproximação com quatro valores altera a esparsidade das matrizes ao comparar com a aproximação com dois valores. Entretanto, não altera o tamanho das matrizes. Esta mudança acarreta apenas um código mais complexo, porém, obtém resultados mais precisos sem acréscimo do tempo computacional. Por fim, quando comparamos a metodologia analítica com fontes constantes e com fontes mistas, percebemos que as fontes mistas geram melhores resultados em malhas

temporais mais grossas, porém em malhas finas, na maioria dos casos, os resultados são os mesmos.

4.6 Conclusões sobre o problema da cinética espacial

Ao final deste capítulo, concluímos que a nossa proposta de uma metodologia iterativa de fonte gera resultados de acordo com os resultados presentes na literatura. Além disso, observamos um ganho computacional perante a metodologia que trata as equações dos fluxos e precursores de forma acoplada. Ademais, percebemos que a nossa proposta iterativa de fonte produz uma melhor estabilidade numérica quando comparamos com a proposta não iterativa, especialmente em malhas temporais muito finas.

Na questão do tratamento numérico ou analítico dos sistemas diferenciais dos fluxos, percebemos uma concordância entre os resultados obtidos por ambos. Entretanto, o tempo computacional do tratamento numérico é significativamente menor quando comparamos mesmas malhas. No entanto, no problema supercrítico que testamos, a metodologia numérica necessita de malha temporal mais fina para obter a mesma precisão da metodologia analítica. Neste caso, o tratamento analítico obteve um pequeno ganho computacional.

No tratamento analítico em que temos três propostas para as exponenciais matriciais, percebemos uma certa instabilidade nos resultados da abordagem clássica (via autovalores e autovetores), a medida que a malha temporal é refinada. Nas outras duas abordagens (aproximação de Padé e Schur-Parlett), há uma concordância na precisão dos resultados. Entretanto, para problemas em que a técnica *scaling and squaring* exige uma menor quantidade de potências de dois, a aproximação de Padé tem um melhor desempenho que a proposta Schur-Parlett. Por fim, concluímos também que a atualização dos termos fontes por constantes é a forma

mais eficiente, por apresentar precisão semelhante ou igual à das outras duas formas e em tempos computacionais menores.

5 ANÁLISE COMPARATIVA ENTRE AS TEORIAS DE TRANSPORTE E DE DIFUSÃO

A motivação dessa análise comparativa é averiguar a influência da aproximação da difusão nos cálculos globais em física de reatores. Para isto fazemos uma comparação entre os resultados obtidos através da teoria de transporte de nêutrons e da teoria da difusão de nêutrons para os problemas da criticalidade e da cinética espacial. Neste contexto, investigamos o Problema Teste 16-A1 [8], que é um problema definido em um meio com espalhamento isotrópico e simetria azimutal, que consiste de um meio heterogêneo com sete regiões conforme Figura 5.1 e Tabela 5.1.

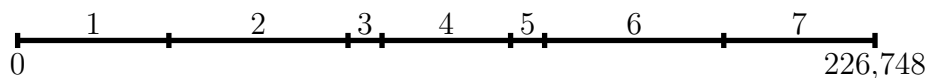


Figura 5.1: Geometria do Problema Teste 16-A1.

Juntamente com as dimensões das sete regiões, na Tabela 5.1, apresentamos uma proposta de subdivisão de cada região, conforme apresentado pela ref. [8]. Essa subdivisão tem como finalidade estabelecer um padrão inicial para a geração de malhas mais refinadas.

Tabela 5.1: Domínio do Problema Teste 16-A1.

Região	1	2	3	4	5	6	7
Dimensão (cm)	40	47,374	9	34	9	47,374	40
Nº de sub-regiões (nodos)	20	24	5	16	5	24	20

Fonte: American Nuclear Society (1985) [8].

As Regiões 1 e 7 são formadas pelo mesmo material de cobertura (Material 1), as Regiões 2, 4 e 6 são formadas pelo mesmo material combustível (Material 2) e as Regiões 3 e 5 são uma mistura de sódio e o material das barras de controle (Material 3). Os parâmetros nucleares de cada material são descritos na Tabela 5.2.

Tabela 5.2: Parâmetros do Problema Teste 16-A1.

Material	g	$\nu_g \Sigma_{fg} (\text{cm}^{-1})$	$\Sigma_{tg} (\text{cm}^{-1})$	$\Sigma_{sgg} (\text{cm}^{-1})$	$\Sigma_{sgg'} (\text{cm}^{-1})$
1	1	$8,34410 \times 10^{-4}$	$2,411 \times 10^{-1}$	$2,33644 \times 10^{-1}$	$3,598 \times 10^{-3}$
1	2	$3,27760 \times 10^{-4}$	$4,172 \times 10^{-1}$	$4,07004 \times 10^{-1}$	0,00000
2	1	$7,45180 \times 10^{-3}$	$1,849 \times 10^{-1}$	$1,77711 \times 10^{-1}$	$2,085 \times 10^{-3}$
2	2	$1,10612 \times 10^{-2}$	$3,668 \times 10^{-1}$	$3,53721 \times 10^{-1}$	0,00000
3	1	0,00000	$9,432 \times 10^{-2}$	$8,57100 \times 10^{-2}$	$1,7168 \times 10^{-3}$
3	2	0,00000	$1,8762 \times 10^{-1}$	$1,71310 \times 10^{-1}$	0,00000
$\chi_1 = 1,0$		$\chi_2 = 0,0$			

Fonte: American Nuclear Society (1985) [8].

A Tabela 5.2 apresenta as seções de choque utilizadas na teoria de transporte de nêutrons, entretanto para aplicarmos na teoria da difusão precisamos dos coeficientes de difusão. Como este é um problema com espalhamento isotrópico temos

$$D_g = \frac{1}{3\Sigma_{tg}}. \quad (5.1)$$

Além disto, necessitamos também das seções de choque de remoção, determinadas na forma [31]

$$\Sigma_{Rg} = \Sigma_{tg} - \Sigma_{sgg}. \quad (5.2)$$

5.1 Problema estacionário

Os nossos resultados para o problema da criticalidade são gerados pela metodologia que apresentamos no Capítulo 3. Dentre elas optamos pela combinação do método da Secante e a Proposta 4 para as aproximações das densidades de corrente (Sec. Prop. 4). Além disso, adotamos os seguintes valores nos critérios de parada: $\epsilon_0 < 10^{-10}$ e $\epsilon_1 = 10^{-10}$.

Os resultados via teoria de transporte de nêutrons que adotamos para comparação são aqueles apresentados na ref. [8], que foi elaborada pelo Laboratório Nacional de Argonne. Para o Problema Teste 16-A1, a ref. [8] apresenta os resultados obtidos através de dois códigos:

- **16-A1-1** (código TIMEX) obteve $K = 1,000198$
- **16-A1-2** (código TDA) obteve $K = 1,000000$

onde código TDA trata os valores dos fluxo escalar como valores médios do intervalo de malha e o código TIMEX valores nos limites dos intervalos da malha.

A fim de comparação, adotamos também os autovalores dominantes calculados através da equação da difusão por Banfield (2013) [12]. Mesmo que sua tese seja mais especificamente para os problemas de transporte, ele apresenta alguns resultados em difusão. Banfield propõe um método de cinética direta semi-implícito (SIDK) desenvolvido para a equação de transporte de nêutrons. Esse método é uma modificação do método de cinética de difusão desenvolvido por Ginestar et al. (1998) [40]. Banfield (2013) diz que as únicas diferenças na derivação são que o termo de espalhamento é incluído no operador de fuga e que a derivação é feita para um número genérico de grupos de energia. Portanto, como não apresenta como é feita discretização espacial, acreditamos que seja a mesma da ref. [40], que é baseada na expansão polinomial de Legendre.

Tabela 5.3: Resultados para o autovalor dominante K para o Problema Teste 16-A1 via difusão.

Nº de nodos	Ref. [12]			Sec. Prop. 4		
	K	$Erro_{TIMEX}$	$Erro_{TDA}$	K	$Erro_{TIMEX}$	$Erro_{TDA}$
114	0,991826	0,00837	0,00817	0,99389	0,00631	0,00611
228	0,992923	0,00727	0,00708	0,99385	0,00635	0,00615
456	0,993431	0,00677	0,00657	0,99390	0,00630	0,00610
912	0,993675	0,00652	0,00633	0,99394	0,00626	0,00606

O primeiro aspecto que destacamos da Tabela 5.3 é a diferença do estado da criticalidade obtido via transporte e via difusão. Em transporte, o resultado obtido pelo código TIMEX indicou um núcleo em estado supercrítico ($K = 1,000198$) e o código TDA um estado crítico ($K = 1,000000$). Entretanto, em difusão, os resultados indicam um estado subcrítico, tanto na ref. [12], quanto nos nossos resultados. Quando tomamos como referência os resultados obtidos via transporte, observamos que a nossa metodologia produziu resultados mais próximos (menores erros relativos) do que os resultados de Banfield. Por fim, ao comparar os resultados obtidos via difusão percebemos uma concordância de até três dígitos significativos, entretanto, para as malhas apresentadas, os nossos resultados fixaram um dígito a mais que a ref. [12].

Os gráficos das Figuras 5.2 e 5.3 trazem uma comparação entre os fluxos escalares determinados pela teoria de transporte e pela teoria da difusão. Como também trabalhamos com fluxos escalares médios, adotamos como referência de transporte os valores obtidos pelo código TDA [8]. Os gráficos referentes a difusão são obtidos com uma malha de 912 nodos.

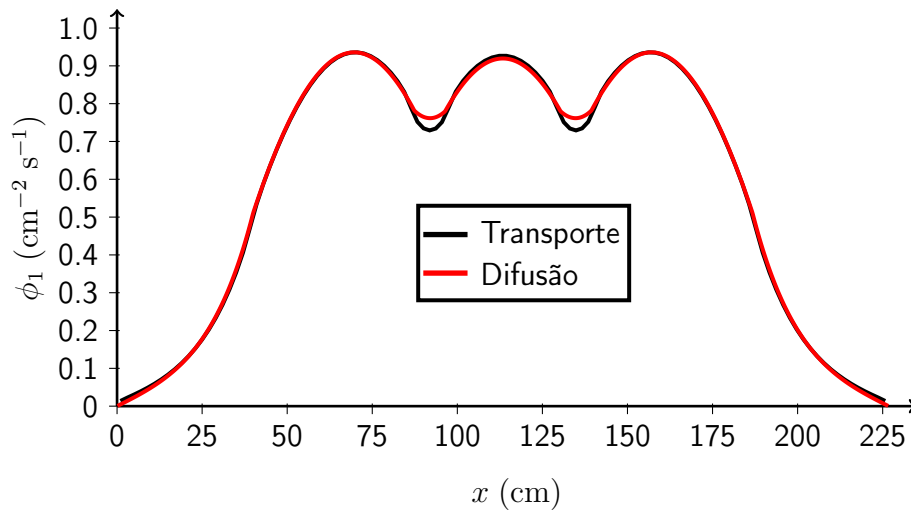


Figura 5.2: Fluxos escalares de nêutrons rápidos do Problema Teste 16-A1.

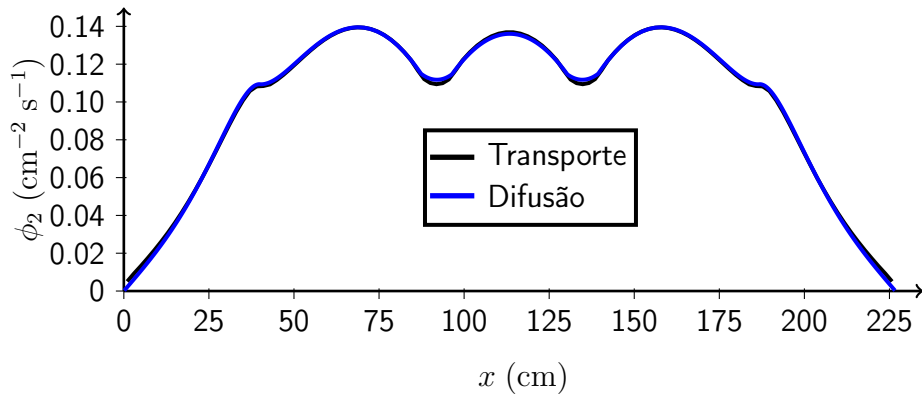


Figura 5.3: Fluxos escalares de nêutrons térmicos do Problema Teste 16-A1.

Nas Figuras 5.4 e 5.5, apresentamos o erro entre os fluxos determinados por transporte e por difusão. Para uma melhor visualização, nas figuras acrescentamos os limites de cada região material. O erro é determinado pela subtração dos fluxos determinados por transporte pelos fluxos determinados por difusão.

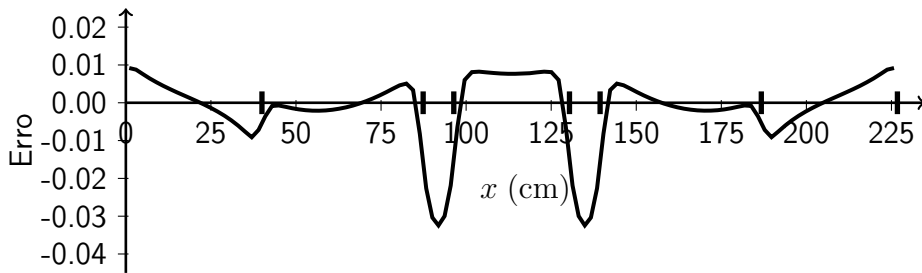


Figura 5.4: Erro dos fluxos escalares de nêutrons rápidos do Problema Teste 16-A1.

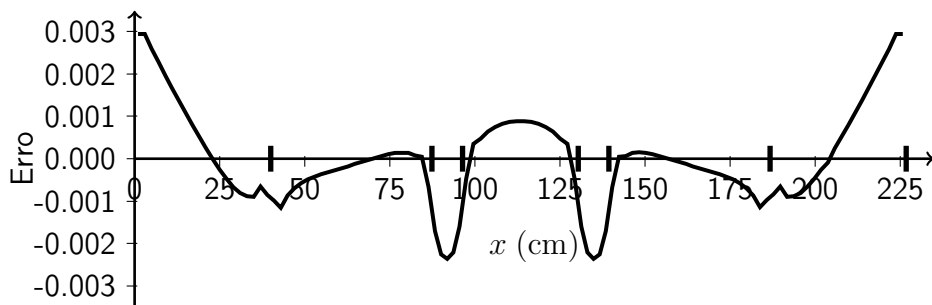


Figura 5.5: Erro dos fluxos escalares de nêutrons térmicos do Problema Teste 16-A1.

Nas Figuras 5.4 e 5.5, percebemos o erro introduzido pela aproximação da difusão, em particular nos limites dos materiais e nos materiais fortemente absorvedores (Regiões 3 e 5).

5.2 Problema da cinética espacial

O Problema Teste 16-A1 do ANL *Benchmark* é um *benchmark* de reator rápido unidimensional. Esse é um excelente problema para examinar o impacto das soluções de transporte versus difusão, pois ele é um dos poucos *benchmarks* de cinética espacial baseados em transporte disponíveis na literatura [12].

No tempo $t = 0s$ é feita uma perturbação instantânea nas densidades dos materiais das Regiões 2 e 6. A alteração consiste em um aumento de 5% da densidade na Região 2 e uma diminuição de 5% na Região 6, ou seja, uma alteração no número de núcleos por unidade de volume. Esta perturbação resulta em uma alteração nas seções de choque das Regiões 2 e 6 da Tabela 5.2. Apresentamos os demais parâmetros para o problema de cinética na Tabela 5.4.

Tabela 5.4: Parâmetros para cinética do Problema Teste 16-A1.

i	β_i	$\lambda_i(s^{-1})$	χ_i^d	$v_i(\text{cm s}^{-1})$
1	$0,810 \times 10^{-4}$	0,0129	1,0	$10^9/1,851$
2	$6,870 \times 10^{-4}$	0,0311	0,0	$10^8/1,088$
3	$6,120 \times 10^{-4}$	0,1340		
4	$1,138 \times 10^{-3}$	0,3310		
5	$5,120 \times 10^{-4}$	1,2600		
6	$1,700 \times 10^{-4}$	3,2100		

Fonte: American Nuclear Society (1985) [8].

Nas Figuras 5.6 e 5.7, os gráficos referentes ao método SIDK da ref. [12] foram extraídos das figuras apresentadas pelo autor através do App WebPlotDigitizer. Por outro lado, os gráficos referentes a solução via transporte (código TDA) são obtidos ao plotar os resultados tabelados apresentados na ref. [8].

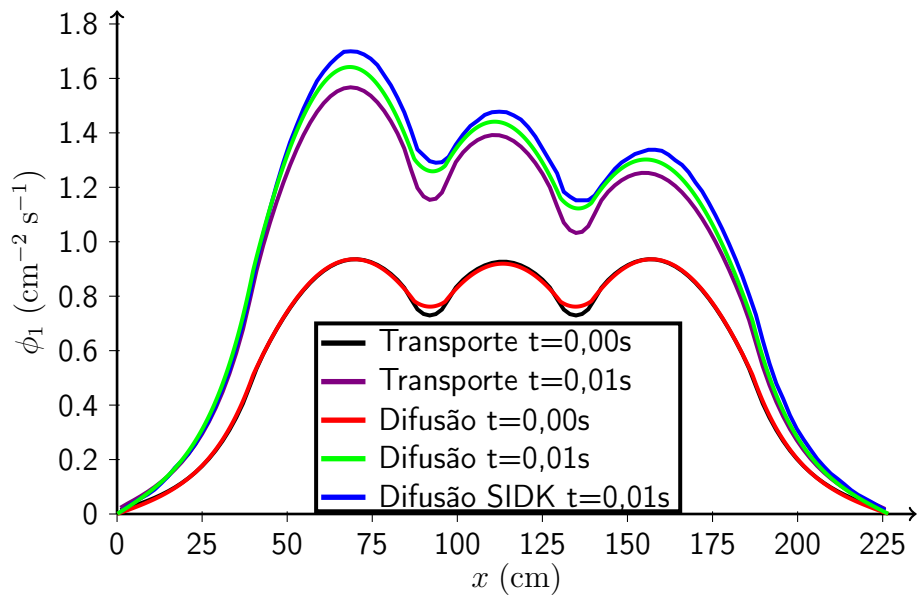


Figura 5.6: Fluxos escalares de nêutrons rápidos da perturbação do Problema Teste 16-A1.

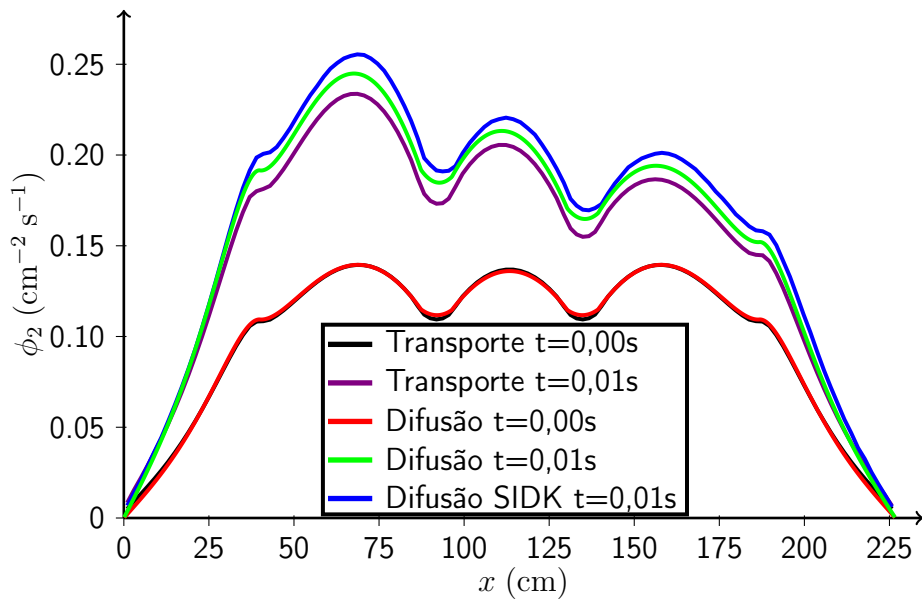


Figura 5.7: Fluxos escalares de nêutrons térmicos da perturbação do Problema Teste 16-A1.

Ao observar os gráficos das Figuras 5.6 e 5.7, percebemos que ambos os resultados (nossos e Banfield (2013)) obtidos via teoria da difusão possuem uma pequena variação para cima com relação aos resultados obtidos via teoria de transporte. Além disto, observamos que os nossos resultados para os fluxos em $t = 0,01s$ são mais próximos aos fluxos obtidos pela teoria de transporte do que os fluxos obtidos por Banfield (2013).

Na Tabela 5.5, apresentamos uma comparação entre os valores dos fluxos obtidos via transporte e via difusão, juntamente com o erro relativo. Ao observar a coluna dos erros relativos percebemos que os maiores erros se encontram nos nodos que fazem limites com os contornos. Este comportamento já era esperado, visto que este é um dos locais onde a aproximação por difusão é não satisfatória devido a Lei de Fick. Nos demais nodos obtivemos pequenos erros relativos, na ordem de 10^{-2} .

Tabela 5.5: Comparação dos fluxos escalares do Problema Teste 16-A1 no tempo 0,01s.

Nodo	ϕ_1^{Trans} ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)	ϕ_1^{Dif} ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)	Erro Rel.	ϕ_2^{Trans} ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)	ϕ_2^{Dif} ($\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$)	Erro Rel.
1	0,02294	0,00795	0,65334	0,00843	0,00368	0,56374
10	0,19025	0,19722	0,03668	0,07894	0,08179	0,03607
20	0,78486	0,83469	0,06348	0,18007	0,19105	0,06098
30	1,47690	1,55075	0,05001	0,22399	0,23508	0,04952
40	1,48072	1,54348	0,04238	0,21884	0,22873	0,04520
50	1,23444	1,30073	0,05370	0,18239	0,19139	0,04938
60	1,34930	1,39520	0,03402	0,19914	0,20643	0,03660
70	1,05702	1,13393	0,07276	0,15763	0,16665	0,05723
80	1,24768	1,29737	0,03983	0,18633	0,19380	0,04008
90	0,95046	0,98964	0,04123	0,15620	0,16318	0,04470
100	0,31208	0,32912	0,05461	0,10817	0,11335	0,04788
110	0,06540	0,06044	0,07578	0,02893	0,02732	0,05557
114	0,01836	0,00631	0,65603	0,00674	0,00292	0,56713

5.3 Conclusões sobre a comparação entre transporte e difusão

Com esta comparação, confirmamos a teoria que a aproximação por difusão introduz alguns erros na solução. No problema teste proposto, observamos os erros exatamente nos locais onde a teoria de difusão possui restrições, que é próximo aos contornos e em meios fortemente absorvedores. Esta pode ser a motivação para novas pesquisas, explorar modificações do modelo de difusão com o intuito de melhorar a aproximação da lei de Fick.

6 CONCLUSÕES

Nesta tese de doutorado, aplicamos uma técnica de integração nodal para o problema estacionário e transiente da teoria da difusão de nêutrons multigrupo. Juntamente com essa técnica, apresentamos novas aproximações para as densidades de correntes nas interfaces dos nodos. No caso estacionário, introduzimos o método da Secante para determinar o autovalor dominante e uma proposta adicional para calcular seu autovetor (fluxos escalares). No caso da cinética, a principal novidade que trazemos com este trabalho é o tratamento desacoplado e iterativo das equações dos fluxos e dos precursores. Além disto, introduzimos nos problemas da cinética espacial o método Schur-Parlett para avaliar as exponenciais matriciais presentes na solução analítica. Destacamos ainda, a avaliação dessas exponenciais pela aproximação de Padé juntamente com a técnica *scaling and squaring* em sistemas desacoplados.

Um dos objetivos deste trabalho era propor uma metodologia que pudesse resolver problemas estacionários gerais e ser aplicada na variável espacial dos problemas da cinética. Este objetivo atingimos com êxito, uma vez que os resultados obtidos estão de acordo com os resultados presentes na literatura e que essa mesma metodologia pode ser aplicada facilmente na dependência espacial dos problemas da cinética. Além disso, foi de fundamental importância obter uma solução precisa para os problemas estacionários, pois ela é a condição inicial para os problemas da cinética. Destacamos também os ganhos que obtivemos com a nossa metodologia que emprega o método da Secante. Essa metodologia, que determina o fator de multiplicação efetivo e os fluxos escalares se mostrou tão precisa quanto os métodos iterativos, que, em geral, são utilizados na literatura. Além disso, na maioria dos problemas testados, essa proposta que utiliza o método da Secante apresentou uma maior eficiência do ponto de vista computacional perante as outras duas propostas, porém, ainda necessita uma comprovação formal da convergência para o maior

autovalor em problemas gerais da criticalidade. Por fim, poderíamos ainda explorar a questão das aproximações das densidades de corrente, porém aproximações mais apuradas podem implicar em derivações mais extensas e/ou em maiores custos computacionais.

Com relação ao problema da cinética, constatamos que a nossa proposta de uma metodologia desacoplada e iterativa gerou resultados de acordo com os resultados presentes na literatura. A ideia de desacoplar os sistemas diferenciais dos fluxos e dos precursores propiciou um ganho computacional e um melhor condicionamento dos sistemas. Além disso, a proposta de tratar os sistemas de forma iterativa de fonte proporcionou uma melhor estabilidade numérica quando utilizamos malhas temporais muito finas.

A respeito do tratamento numérico ou analítico dos sistemas diferenciais dos fluxos, concluímos que o tratamento numérico gerou os resultados de forma mais eficiente do ponto de vista computacional do que o tratamento analítico, quando comparamos as mesmas malhas. No entanto, existem casos (por exemplo, o Problema Teste Homogêneo Bidimensional) em que tratamento analítico obteve a mesma precisão que o tratamento numérico, porém em malhas temporais mais grossas. Nesses casos, abordagem analítica demandou um menor custo computacional.

Entre as abordagens analíticas, em que temos a presença das exponenciais matriciais, destacamos a utilização da aproximação de Padé e da metodologia Schur-Parlett. Essas duas obtiveram uma excelente concordância entre si, porém, na questão do tempo custo computacional, não podemos ter uma opinião conclusiva sobre qual é mais eficiente. Podemos apenas concluir que, para problemas em que a técnica *scaling and squaring* exigir uma menor quantidade de potências, a aproximação de Padé tem um melhor desempenho.

Ainda dentro do tratamento analítico, em que propomos três formas de atualizar os termos fontes, constatamos que as fontes constantes são as mais

eficientes. Uma vez que o custo computacional para as propostas de fontes mista ou quase analítica é consideravelmente maior do que de fontes constantes. Entretanto, a precisão dos resultados para essas fontes que carregam mais informação (mista e quase analítica) é ligeiramente melhor em malhas temporais mais grossas, porém, em malhas finas, as três propostas obtiveram a mesma precisão.

Por fim, ressaltamos que todas as metodologias propostas nesta tese, tanto para os problemas estacionários como da cinética, podem ser aplicadas para problemas gerais em geometria cartesiana, por exemplo, tridimensionais. Elas também não impõem restrições quanto ao meio (homogêneo ou heterogêneo) nem quanto ao número de grupos de energia e de precursores. Como proposta de trabalhos futuros, pretendemos buscar soluções para o problema da cinética espacial na teoria de transporte, através do método analítico em ordenadas discretas. Explorando o estudo desenvolvido nesta tese para o tratamento da variável temporal.

Referências Bibliográficas

- [1] Aboanber, A. e Nahla, A. Solution of two-dimensional space-time multigroup reactor kinetics equations by generalized Padé and cut-product approximations. *Annals of Nuclear Energy*, 33(3):209 – 222, 2006. ISSN 0306-4549. doi: 10.1016/j.anucene.2005.11.003.
- [2] Aboanber, A. e Hamada, Y. M. Generalized Runge-Kutta method for two- and three-dimensional space-time diffusion equations with a variable time step. *Annals of Nuclear Energy*, 35:1024–1040, 06 2008. doi: 10.1016/j.anucene.2007.10.008.
- [3] Abreu, W. V. *Análise Numérica de Transientes em um Reator Slab Guiado por Fonte Externa*. Dissertação de mestrado, Instituto de Engenharia Nuclear, Comissão Nacional de Engenharia Nuclear, Rio de Janeiro, 2017.
- [4] Adomian, G. *Solving frontier problems of physics: the decomposition method*. Kluwer Academic Publishers, Boston, 1994.
- [5] Al-Mohy, A. e Higham, N. A new scaling and squaring algorithm for the matrix exponential. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 31:970–989, 2009. ISSN 1095-7162. doi: 10.1137/09074721X.
- [6] Al-Mohy, A. e Higham, N. Computing the action of the matrix exponential, with an application to exponential integrators. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 33:488–511, 2011. ISSN 1064-8275. doi: 10.1137/100788860.
- [7] American Nuclear Society. *Argonne Code Center: benchmark problem book. Numerical Determination of the Space, Time, Angle, or Energy Distribution of Particles in an Assembly*. ANL-7416, Suplemento 1, Illinois, 1972.
- [8] American Nuclear Society. *National Energy Software Center: benchmark problem book*. ANL-7416, Suplemento 3, Illinois, 1985. doi: 10.2172/6926543.

- [9] Anderson, E., Bai, Z., Bischof, C., Blackford, S., Demmel, J., Dongarra, J., Du Croz, J., Greenbaum, A., Hammarling, S., McKenney, A., e Sorensen, D. *LAPACK Users' guide*. SIAM, Philadelphia, 1999.
- [10] Arioli, M., Codenotti, B., e Fassino, C. The Padé method for computing the matrix exponential. *Linear Algebra and its Applications*, 240:111 – 130, 1996. ISSN 0024-3795. doi: 10.1016/0024-3795(94)00190-1.
- [11] Aviles, B. N., Sutton, T. M., e Kelly III, D. J. *A Variable timestep generalized Runge-Kutta method for the numerical integration of the space-time diffusion equations*. Relatório técnico, KAPL-4731. Knolls Atomic Power Lab., Schenectady, NY, 1991.
- [12] Banfield, J. E. *Semi-Implicit Direct Kinetics Methodology for Deterministic, Time-Dependent, Three-Dimensional, and Fine-Energy Neutron Transport Solutions*. Tese de doutorado, University of Tennessee, Knoxville, 2013.
- [13] Bergamaschi, L. e Vianello, M. Efficient computation of the exponential operator for large, sparse, symmetric matrices. *Numerical Linear Algebra with Applications*, 7:27–45, 2000. doi: 10.1002/(SICI)1099-1506(200001/02)7:1<27::AID-NLA185>3.0.CO;2-4.
- [14] Boffie, J. e Pounders, J. M. An adaptive time step control scheme for the transient diffusion equation. *Annals of Nuclear Energy*, 116:280 – 289, 2018. ISSN 0306-4549. doi: 10.1016/j.anucene.2018.02.044.
- [15] Bru, R., Genstar, D., Marin, J., Verdú, G., Mas, J., e Manteuffel, T. Iterative schemes for the neutron diffusion equation. *Computers & Mathematics with Applications*, 44(10):1307 – 1323, 2002. ISSN 0898-1221. doi: 10.1016/S0898-1221(02)00258-4.

- [16] Buckner, M. R. e Stewart, J. W. Multidimensional space-time nuclear-reactor kinetics studies-part I: Theoretical. *Nuclear Science and Engineering*, 59(4): 289–297, 1976. doi: 10.13182/NSE59-289.
- [17] Burden, R. L. e Faires, J. D. *Numerical Analysis*. 7 ed. Books & Cole Publishing, Pacific Grove, 2001.
- [18] Caliari, M., Vianello, M., e Bergamaschi, L. Interpolating discrete advection-diffusion propagators at Leja sequences. *Journal of Computational and Applied Mathematics*, 172(1):79 – 99, 2004. ISSN 0377-0427. doi: 10.1016/j.cam.2003.11.015.
- [19] Caliari, M., Kandolf, P., Ostermann, A., e Rainer, S. Comparison of software for computing the action of the matrix exponential. *BIT Numerical Mathematics*, 54:113–128, 2014. doi: 10.1007/s10543-013-0446-0.
- [20] Caliari, M., Kandolf, P., Ostermann, A., e Rainer, S. The Leja method revisited: Backward error analysis for the matrix exponential. *SIAM Journal on Scientific Computing*, 38, 06 2015. doi: 10.1137/15M1027620.
- [21] Camiciola, P., Cundari, D., e Montagnini, B. A coarse-mesh method for 1-D reactor kinetics. *Annals of Nuclear Energy*, 13(11):629–636, 1986. ISSN 0306-4549. doi: 10.1016/0306-4549(86)90022-8.
- [22] Carreño, A., Vidal-Ferràndiz, A., Ginestar, D., e Verdú, G. Modal methods for the neutron diffusion equation using different spatial modes. *Progress in Nuclear Energy*, 115:181 – 193, 2019. ISSN 0149-1970. doi: 10.1016/j.pnucene.2019.03.040.
- [23] Ceolin, C., Schramm, M., Vilhena, M. T., e Bodmann, B. E. On the neutron multi-group kinetic diffusion equation in a heterogeneous slab: An exact solution on a finite set of discrete points. *Annals of Nuclear Energy*, 76:271 – 282, 2015. ISSN 0306-4549. doi: 10.1016/j.anucene.2014.09.038.

- [24] Ceolin, C., Vilhena, M. T., Leite, S. B., e Petersen, C. Z. An analytical solution of the one-dimensional neutron diffusion kinetic equation in cartesian geometry. Em: *International Nuclear Atlantic Conference - INAC*. Rio de Janeiro, Brasil, 27 de Setembro a 2 de Outubro, 2009. ISBN: 978-85-99141-03-8.
- [25] Corno, S. E. e Ravetto, P. A rigorous analytical solution to one-group diffusion equations for the reflected reactor dynamics. *Report PT IN-FR*, 93, 1976.
- [26] Corno, S., Dulla, S., Picca, P., e Ravetto, P. Analytical approach to the neutron kinetics of the non-homogeneous reactor. *Progress in Nuclear Energy*, 50(8): 847 – 865, 2008. ISSN 0149-1970. doi: 10.1016/j.pnucene.2008.02.001.
- [27] Datta, B. N. *Numerical Linear Algebra and Applications*. 2 ed. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, USA, 2010. ISBN 0898716853, 9780898716856.
- [28] Davies, P. e Higham, N. A Schur-Parlett algorithm for computing matrix functions. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 25(2):464–485, 2003. doi: 10.1137/S0895479802410815.
- [29] Dieci, L. e Papini, A. Padé approximation for the exponential of a block triangular matrix. *Linear Algebra and its Applications*, 308(1):183 – 202, 2000. ISSN 0024-3795. doi: 10.1016/S0024-3795(00)00042-2.
- [30] Druskin, V. On monotonicity of the Lanczos approximation to the matrix exponential. *Linear Algebra and its Applications*, 429(7):1679 – 1683, 2008. ISSN 0024-3795. doi: 10.1016/j.laa.2008.04.046.
- [31] Duderstadt, J. J. e Hamilton, L. J. *Nuclear Reactor Analysis*. John Wiley, New York, 1976.
- [32] Ehiwario, J. Comparative study of Bisection, Newton-Raphson and Secant methods of root-finding problems. *IOSR Journal of Engineering*, 4:01–07, 2014. doi: 10.9790/3021-04410107.

- [33] Eletrobras-Eletronuclear. *Energia Nuclear*. Disponível em: <<https://www.eletronuclear.gov.br/Sociedade-e-Meio-Ambiente/Espaco-do-Conhecimento/Paginas/Energia-Nuclear>>. Acesso em: 10 de mar. de 2020.
- [34] Epstein, I. J. Conditions for a matrix to commute with its integral. *Proceedings of the American Mathematical Society*, 14(2):266 – 270, 1963. ISSN 00029939, 10886826. doi: 10.2307/2034625.
- [35] Evard, J.-C. On matrix functions which commute with their derivative. *Linear Algebra and its Applications*, 68:145 – 178, 1985. ISSN 0024-3795. doi: 10.1016/0024-3795(85)90212-5.
- [36] Fernandes, J., Vilhena, M., e Bodmann, B. On a comparative analysis of the solutions of the kinetic neutron diffusion equation by the hankel transform formalism and the spectral method. *Progress in Nuclear Energy*, 69:71–76, 11 2013. doi: 10.1016/j.pnucene.2013.05.009.
- [37] Figueira, A. J. *Cinética Espacial para Modelar Transientes em Reatores ADS*. Tese de doutorado, Instituto de Engenharia Nuclear, COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2015.
- [38] Fischer, T. On the stability of some algorithms for computing the action of the matrix exponential. *Linear Algebra and its Applications*, 443:1–20, 02 2014. doi: 10.1016/j.laa.2013.11.003.
- [39] Fischer, T. On the algorithm by al-mohy and higham for computing the action of the matrix exponential: A posteriori roundoff error estimation. *Linear Algebra and its Applications*, 531:141–168, 05 2017. doi: 10.1016/j.laa.2017.05.042.
- [40] Ginestar, D., Verdú, G., Vidal, V., Bru, R., Marín, J., e Muñoz-Cobo, J. High order backward discretization of the neutron diffusion equation. *Annals of*

- Nuclear Energy*, 25(1):47 – 64, 1998. ISSN 0306-4549. doi: 10.1016/S0306-4549(97)00046-7.
- [41] Hackemack, M. W. e Pounders, J. M. Implementation of an a priori time step estimator for the multigroup neutron diffusion equation in asynchronously coupled RELAP5-3D. Em: *Proceedings of PHYSOR*. Kyoto, Japão, 28 de Setembro a 3 de Outubro, 2014.
- [42] Hansen, K. F. e Johnson, S. R. GAKIN, a one dimensional multigroup kinetics code. Em: *USAEC Report GA-7543, General Atomic Division, General Dynamics Corporation*. Agosto, 1967.
- [43] Hansen, K. F. e Mason, J. H. GAKIN II: a one-dimensional multigroup diffusion theory reactor kinetics code. *Massachusetts Institute of Technology*, (1):1–204, 1973. doi: 10.2172/4454114.
- [44] Hébert, A. A simplified presentation of the multigroup analytic nodal method in 2-D cartesian geometry. *Annals of Nuclear Energy*, 35(11):2142 – 2149, 2008. ISSN 0306-4549. doi: 10.1016/j.anucene.2008.06.007.
- [45] Hébert, A. Development of the nodal collocation method for solving the neutron diffusion equation. *Annals of Nuclear Energy*, 14:527–541, 12 1987. doi: 10.1016/0306-4549(87)90074-0.
- [46] Higham, N. J. *Functions of Matrices: Theory and Computation*. SIAM, Philadelphia, 2008.
- [47] Higham, N. The scaling and squaring method for the matrix exponential revisited. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications*, 26(4):1179–1193, 2005. doi: 10.1137/04061101X.
- [48] Hindmarsh, A. C. LSODE and LSODI, two new initial value ordinary differential equation solvers. *SIGNAL Newsl.*, 15(4):10–11, 1980. ISSN 0163-5778. doi: 10.1145/1218052.1218054.

- [49] Hindmarsh, A. C. *ODEPACK, a systematized collection of ODE solvers*. Em: Scientific Computing - Applications of Mathematics and Computing to the Physical Sciences. Stepleman, R. S. et al. (Eds.), North-Holland Publishing Company, Amsterdam, 1983, pp. 55-64.
- [50] Inanc, F. A coarse mesh nodal method for one-dimensional spatial kinetics calculations. *Annals of Nuclear Energy*, 24(4):257 – 265, 1997. ISSN 0306-4549. doi: 10.1016/S0306-4549(96)00028-X.
- [51] Jagannathan, V. Application of the finite-element-synthesis model to multidimensional reactor transient problems without feedback. *Annals of Nuclear Energy*, 12(11):583 – 591, 1985. ISSN 0306-4549. doi: 10.1016/0306-4549(85)90011-8.
- [52] Kaps, P. e Rentrop, P. Generalized Runge-Kutta methods of order four with stepsize control for stiff ordinary differential equations. *Numerische Mathematik*, 33(1):55–68, 1979. doi: 10.1007/bf01396495.
- [53] Kinard, M. e Allen, E. Efficient numerical solution of the point kinetics equations in nuclear reactor dynamics. *Annals of Nuclear Energy*, 31:1039–1051, 2004. doi: 10.1016/j.anucene.2003.12.008.
- [54] Kobayashi, K. Rigorous derivation of multi-point reactor kinetics equations with explicit dependence on perturbation. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 29(2):110–120, 1992. doi: 10.1080/18811248.1992.9731503.
- [55] Lamarsh, J. R. *Introduction to Nuclear Reactor Theory*. Wesley publishing company, New York, 1966.
- [56] Lawrence, R. D. e Dorning, J. J. A nodal Green's function method for multidimensional neutron diffusion calculations. *Nuclear Science and Engineering*, 76 (2):218–231, 1980. doi: 10.13182/NSE80-A19452.

- [57] Lewis, E. E. *Fundamentals of Nuclear Reactor Physics*. Elsevier's Science and Technology, Oxford, 2008.
- [58] Li, H., Chen, W., Zhang, F., e Chen, Z. A new formula of neutron multiplication during startup of pwr. *Progress in Nuclear Energy*, 52:321–326, 2010. doi: 10.1016/j.pnucene.2009.07.003.
- [59] Li, H., Shang, X., e Chen, W. An accurate solution of point kinetics equations of one-group delayed neutrons and an extraneous neutron source for step reactivity insertion. *Chinese Science Bulletin*, 55:4116–4119, 2010. doi: 10.1007/s11434-010-4220-2.
- [60] Li, M., Chen, W., e Hao, J. A quasi-static orthogonal method for solving spatial-time neutron kinetics equations in non-steady processes. *Progress in Nuclear Energy*, 120:103229, 2020. doi: 10.1016/j.pnucene.2019.103229.
- [61] Lima, Z. R., Silva, F. C., e Alvim, A. C. M. Use of pseudo-harmonics method coupled with finite differences coarse mesh in the solution of fixed source problems. *Annals of Nuclear Energy*, 32:1366–1376, 08 2005. doi: 10.1016/j.anucene.2005.03.009.
- [62] Lima, Z. R., Silva, F. C., e Alvim, A. C. M. Solution of the spatial kinetic equations using the expansion in pseudo-harmonics. Em: *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2011)*. Rio de Janeiro, Brasil, 8 a 12 de Maio, 2011. ISBN 978-85-63688-00-2.
- [63] Lima, Z. R. *Aplicação do método dos pseudo-harmônicos à cinética multi-dimensional*. Tese de doutorado, Instituto de Engenharia Nuclear, COPPE, Universidade Federal do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro, 2005.
- [64] Miró, R., Ginestar, D., Verdú, G., e Hennig, D. A nodal modal method for the neutron diffusion equation. application to BWR instabilities analysis. *Annals of*

- Nuclear Energy*, 29(10):1171 – 1194, 2002. ISSN 0306-4549. doi: 10.1016/S0306-4549(01)00103-7.
- [65] Moler, C. e Van Loan, C. Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix. *SIAM Review*, 20(4):801–836, 1978. doi: 10.1137/1020098.
- [66] Moler, C. e Van Loan, C. Nineteen dubious ways to compute the exponential of a matrix, twenty-five years later. *SIAM Review*, 45(1):3–49, 2003. doi: 10.1137/S0036144502418.
- [67] Moore, G. Orthogonal polynomial expansions for the matrix exponential. *Linear Algebra and its Applications*, 435(3):537 – 559, 2011. ISSN 0024-3795. doi: 10.1016/j.laa.2010.09.021.
- [68] Nagaya, Y. e Kobayashi, K. Solution of 1-D multi-group time-dependent diffusion equations using the coupled reactors theory. *Annals of Nuclear Energy*, 22(7):421 – 440, 1995. ISSN 0306-4549. doi: 10.1016/0306-4549(94)00083-Q.
- [69] Nahla, A., Al-Malki, F., Rokaya, M., Nahla, A., Al-Malki, F., e Rokaya, M. Numerical techniques for the neutron diffusion equations in the nuclear reactors. *Advanced Studies in Theoretical Physics*, 6(14):649 – 664, 2012.
- [70] Oliveira, F. R. *Solução da equação de cinética de difusão de nêutrons em geometria cilíndrica tridimensional*. Tese de doutorado, Instituto de Matemática e Estatística, PPGMAp, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2017.
- [71] Parlett, B. N. e Ng, K. C. Development of an accurate algorithm for $\exp(Bt)$. Relatório técnico PAM-294, Center for Pure and Applied Mathematics, University of California, Berkeley, CA, 1985.
- [72] Parlett, B. A recurrence among the elements of functions of triangular matrices. *Linear Algebra and its Applications*, 14(2):117 – 121, 1976. ISSN 0024-3795. doi: 10.1016/0024-3795(76)90018-5.

- [73] Petersen, C. Z., Vilhena, M. T., Bodmann, B., Dulla, S., e Ravetto, P. On the analytical solution of the multigroup neutron kinetics diffusion equation in homogeneous parallelepiped. Em: *International Nuclear Atlantic Conference - INAC*. Belo Horizonte, Brasil, 24 a 28 de Outubro, 2011. ISBN: 978-85-99141-04-5.
- [74] Petersen, C. Z., Vilhena, M. T., Bodmann, B., Dulla, S., e Ravetto, P. On the exact solution for the multi-group kinetic neutron diffusion equation in a rectangle. Em: *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2011)*. Rio de Janeiro, Brasil, 8 a 12 de Maio, 2011. ISBN 978-85-63688-00-2.
- [75] Picca, P., Furfaro, R., e Ganapol, B. A highly accurate technique for the solution of the non-linear point kinetics equations. *Annals of Nuclear Energy*, 58:43–53, 2013. doi: 10.1016/j.anucene.2013.03.004.
- [76] Pollard, J. P. *AUS Diffusion Module POW Checkout - 1- and 2- Dimensional Kinetics Calculations*. Australian Atomic Energy Commission AAEC/387, 1977.
- [77] Pusa, M. e Leppänen, J. Computing the matrix exponential in burnup calculations. *Nuclear science and engineering: the journal of the American Nuclear Society*, 164:140–150, 02 2010. doi: 10.13182/NSE09-14.
- [78] Quintero-Leyva, B. Numerical solution of the integro-differential equation of the point kinetics of nuclear reactors as an ODE. *Annals of Nuclear Energy*, 36:1280–1284, 08 2009. doi: 10.1016/j.anucene.2009.05.008.
- [79] Quintero-Leyva, B. The multi-group integro-differential equations of the neutron diffusion kinetics. solutions with the progressive polynomial approximation in multi-slab geometry. *Annals of Nuclear Energy*, 37(5):766 – 770, 2010. ISSN 0306-4549. doi: 10.1016/j.anucene.2010.02.005.

- [80] Reed, W. H. e Hansen, K. F. Alternating direction methods for the reactor kinetics equations. *Nuclear Science and Engineering*, 41(3):431–442, 1970. doi: 10.13182/NSE41-431.
- [81] Sánchez, J. On the numerical solution of the point reactor kinetics equations by generalized Runge-Kutta methods. *Nuclear Science and Engineering*, 103(1):94–99, 1989. doi: 10.13182/NSE89-A23663.
- [82] Schramm, M. *An Algorithm for Multi-Group Two-Dimensional Neutron Diffusion Kinetics in Nuclear Reactor Cores*. Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica - PROMEC, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2016.
- [83] Sekimoto, H. *Nuclear Reactor Theory*. Tokyo Institute of Technology Press, Tokyo, 2007.
- [84] Silva, A. C., Martinez, A. S., e Gonçalves, A. C. Reconstruction of the neutron flux in a slab reactor. *World Journal of Nuclear Science and Technology*, 2:181–186, 2012. doi: 10.4236/wjnst.2012.24028.
- [85] Smith, K. S. *An Analytic Nodal Method for Solving the Two-group, Multidimensional, Static and Transient Neutron Diffusion Equations*. Massachusetts Institute of Technology, Department of Nuclear Engineering, 1979.
- [86] Song, J.-W. e Kim, J.-K. An efficient nodal method for transient calculations in light water reactors. *Nuclear Technology*, 103(2):157–167, 1993. doi: 10.13182/NT93-A34840.
- [87] Stacey, W. M. *Nuclear Reactor Physics*. John Wiley & Sons, New York, 2001.
- [88] Sutton, T. M. e Aviles, B. N. Diffusion theory methods for spatial kinetics calculations. *Progress in Nuclear Energy*, 30(2):119 – 182, 1996. ISSN 0149-1970. doi: 10.1016/0149-1970(95)00082-U.

- [89] Tavares, M. G. *Solução das Equações de Cinética Espacial da Teoria Multigrupo de Difusão de Nêutrons em Geometria Cartesiana por um Método Iterativo de Fonte*. Dissertação de mestrado, Universidade Federal de Pelotas, Pelotas, 2018.
- [90] Thomé, Z., Carvalho da Silva, F., e Alvim, A. Application of local basis pseudo-harmonics method. *Annals of Nuclear Energy*, 24:955–963, 08 1997. doi: 10.1016/S0306-4549(96)00090-4.
- [91] Tumelero, F., Bodmann, B., Vilhena, M. T., e Lapa, C. M. On the solution of the neutron diffusion kinetic equation in planar geometry free of stiffness with convergence analysis. *Annals of Nuclear Energy*, 125:272 – 282, 2019. ISSN 0306-4549. doi: 10.1016/j.anucene.2018.11.024.
- [92] Verdú, G., Ginestar, D., Vidal, V., e Muñoz-Cobo, J. A consistent multidimensional nodal method for transient calculations. *Annals of Nuclear Energy*, 22 (6):395 – 410, 1995. ISSN 0306-4549. doi: 10.1016/0306-4549(94)00067-0.
- [93] Vidal-Ferràndiz, A., Fayez, R., Verdú, G., e Ginestar, D. Solving the time-dependent neutron diffusion equation using moving meshes. Em: *Joint International Conference on Mathematics and Computation (M&C), Supercomputing in Nuclear Applications (SNA) and the Monte Carlo (MC) Method - ANS MC2015*. Nashville, Estados Unidos da América, 19 a 23 de Abril, 2015.
- [94] Ward, R. C. Numerical computation of the matrix exponential with accuracy estimate. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 14(4):600–610, 1977. ISSN 00361429. doi: 10.1137/0714039.
- [95] Yasinsky, J. B. e Henry, A. F. Some numerical experiments concerning space-time reactor kinetics behavior. *Nuclear Science and Engineering*, 22(2):171–181, 1965. doi: 10.13182/NSE65-A20236.
- [96] Zill, D. e Cullen, M. *Differential Equations with Boundary-Value Problems*. 2 ed. Cengage Learning, 2008.