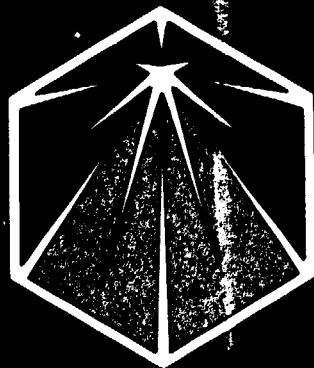


**DETERMINAÇÃO NUMÉRICA DE**  
**PROBABILIDADES DE TRANSMISSÃO**  
**APERFEIÇADAS EM REGIÕES**  
**CILÍNDRICAS ANULARES**

Sergio de Queiroz Bogado Leite

RELATÓRIO DE PESQUISA IEAv - 045/89 (Nov /89)

CTA - IEAV - RP - 045 / 89



### **RESUMO**

Métodos numéricos eficientes de cálculo de probabilidades de transmissão em geometria cilíndrica são apresentados. Erros relativos da ordem de  $10^{-5}$  ou menores são obtidos utilizando soluções analíticas e esquemas de integração com quadraturas de baixa ordem.

### **ABSTRACT**

Efficient methods for numerical calculation of transmission probabilities in cylindrical geometry are presented. Relative errors of the order of  $10^{-5}$  or smaller are obtained using analytical solutions and low order quadrature integration schemes.

**ÍNDICE**

1. INTRODUÇÃO .....	1
2. PROBABILIDADES DE TRANSMISSÃO CONVENCIONAIS .....	1
3. PROBABILIDADES DE TRANSMISSÃO APERFEIÇOADAS .....	7
4. EXEMPLOS E DISCUSSÃO .....	13
5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....	17

**ÍNDICE DE TABELAS**

<b>Tabela 1: Probabilidades de transmissão convencionais e erros relativos associados</b> <b>(<math>r_m = 1.0</math> cm) .....</b>	<b>14</b>
<b>Tabela 2: Probabilidades de transmissão aperfeiçoadas e erros relativos associados</b> <b>(<math>r_m = 1.0</math> cm) .....</b>	<b>15</b>
<b>Tabela 3: Probabilidades de transmissão convencionais por interpolações de valores</b> <b>pré-calculados .....</b>	<b>16</b>

**ÍNDICE DE FIGURAS**

Figura 1: Probabilidade de transmissão $T_m^{io}$ .....	3
Figura 2: Probabilidade de transmissão $T_m^{oo}$ .....	6
Figura 3: Probabilidade de transmissão $T_{m,n}^A$ .....	9
Figura 4: Probabilidade de transmissão $T_{m,n}^B(c_2 - c_1 < 0.46$ ou $\beta > 12)$ .....	11

## 1. INTRODUÇÃO

Num trabalho anterior, um conjunto de relações entre correntes de interface para cálculos de células cilíndricas unitárias de reatores foi desenvolvido, sem se utilizar a hipótese de fluxos isotrópicos nas superfícies das regiões em que se subdivide a célula /1/. A suspensão dessa hipótese resultou na definição de dois tipos de probabilidades de transmissão dependentes da região onde o nêutron foi gerado. A determinação eficiente dessas probabilidades (e das probabilidades de escape e transmissão convencionais), é de interesse para a rapidez e qualidade das correntes obtidas em códigos que utilizam o método das correntes de interface e é objeto do presente estudo. Uma análise dos parâmetros de que dependem as probabilidades de transmissão aperfeiçoadas, revela que a solução usual adotada para as probabilidades convencionais de se construir tabelas de valores pré-calculados para interpolações não deve ser adotada neste caso, em vista da grande quantidade de pontos necessária e da redução da qualidade das probabilidades interpoladas. Neste trabalho, métodos numéricos de obtenção das probabilidades de transmissão em regiões cilíndricas anulares são discutidos, com base na análise das propriedades matemáticas das funções de Bickley que aparecem nessas expressões.

## 2. PROBABILIDADES DE TRANSMISSÃO CONVENCIONAIS

As probabilidades de transmissão  $T_m^{io}$  ("inner to outer"),  $T_m^{oi}$  ("outer to inner") e  $T_m^{oo}$  ("outer to outer") através de uma região anular  $m$  qualquer (regiões numeradas a partir do centro), numa determinada energia, assumindo-se fontes de nêutrons uniformemente distribuídas e fluxos isotrópicos nas superfícies, se escrevem como /2/

$$T_m^{io} = \frac{4}{\pi} \int_0^1 dt K i_3 \left[ b \left( \sqrt{1 - a^2 t^2} - a \sqrt{1 - t^2} \right) \right] , \quad (1a)$$

$$T_m^{oi} = \frac{4}{\pi} \int_0^a dt K i_3 \left[ b \left( \sqrt{1 - t^2} - \sqrt{a^2 - t^2} \right) \right] , \quad (m > 1) \quad (1b)$$

$$T_m^{oo} = \frac{4}{\pi} \int_a^1 dt K i_3 \left( 2b \sqrt{1 - t^2} \right) , \quad (1c)$$

com  $b = \Sigma_m r_m$ ,  $r_m$  o raio externo da região  $m$ ,  $\Sigma_m$  a seção de choque macroscópica total da região  $m$  na energia em questão,  $a = r_{m-1}/r_m$  e as funções de Bickley\* de ordem  $n$ , de comportamento exponencial, definidas por

$$K i_n(x) = \int_0^{\pi/2} d\theta \operatorname{sen}^{n-1} \theta \exp(-x/\operatorname{sen} \theta) .$$

---

\* Uma forma de se obter  $K i_n(x)$  está descrita, por exemplo, na referência 3, pp 251 e 252.

Das equações acima, pode-se mostrar que

$$T_m^{oi} = aT_m^{io} \quad ,$$

de modo que as únicas integrais que precisamos considerar são aquelas nas Eqs. (1a) e (1c). A análise do comportamento matemático dessas funções foi objeto de um estudo feito por Hwang e Toppel /4/ e resultou num conjunto de expressões alternativas para  $T_m^{io}$  e  $T_m^{oo}$  e respectivas faixas de aplicação em função da espessura óptica  $z = \sum_m (r_m - r_{m-1})$  e da razão dos raios da região  $m$ . Uma delimitação possível das regiões de aplicação de cada expressão com o objetivo de se obter erros relativos para essas probabilidades da ordem de  $10^{-5}$  ou menores é apresentada a seguir. As expressões usadas são fornecidas sem demonstração, por já terem sido desenvolvidas na referência 4.

#### A.) Probabilidade de transmissão $T_m^{io}$ (Fig. 1)

Região I:  $z \geq 20$

Nesta região considera-se  $T_m^{io} = 0$  e os erros relativos podem superar o estabelecido, mas os valores de  $T_m^{io}$  são tão pequenos que a precisão do resultado torna-se irrelevante sob o ponto de vista prático.

Região II: assintótica

A solução assintótica para a probabilidade de transmissão  $T_m^{io}$  é dada por

$$T_m^{io} = \frac{2}{\sqrt{a}} \left\{ E_3(z) + (d_1 - d_2 + d_3) \left[ E_3(z) - \frac{e^{-z}}{z} \right] - \frac{3e^{-z}}{z^2} \left( d_2 - d_3 + \frac{4d_3}{z} \right) \right\} + \frac{4}{\pi} Ki_3 [b(1+a)], \quad (2a)$$

com

$$d_1 = \frac{(1-a)^2}{8a}$$

$$d_2 = \frac{d_1}{32} \left[ 3 + \frac{5(1+a^2)}{2a} \right]$$

$$d_3 = \frac{d_1^2}{64} \left[ 3 + 7 \frac{(1+a+a^2)}{a} \right]$$

e  $E_3(z)$  a integral exponencial de ordem 3. Definindo  $\gamma = (1-a)/(1+a)$  e  $\alpha = z/\sqrt{\gamma}$ , a região de aplicação da solução assintótica de modo a produzir erros relativos nos limites desejados é delimitada por  $a > 0.55$  e  $\alpha > \zeta$ , com

$$\zeta = \begin{cases} 15.0, & \text{se } a < 0.99 \\ 4.25, & \text{se } a \geq 0.99 \end{cases}$$

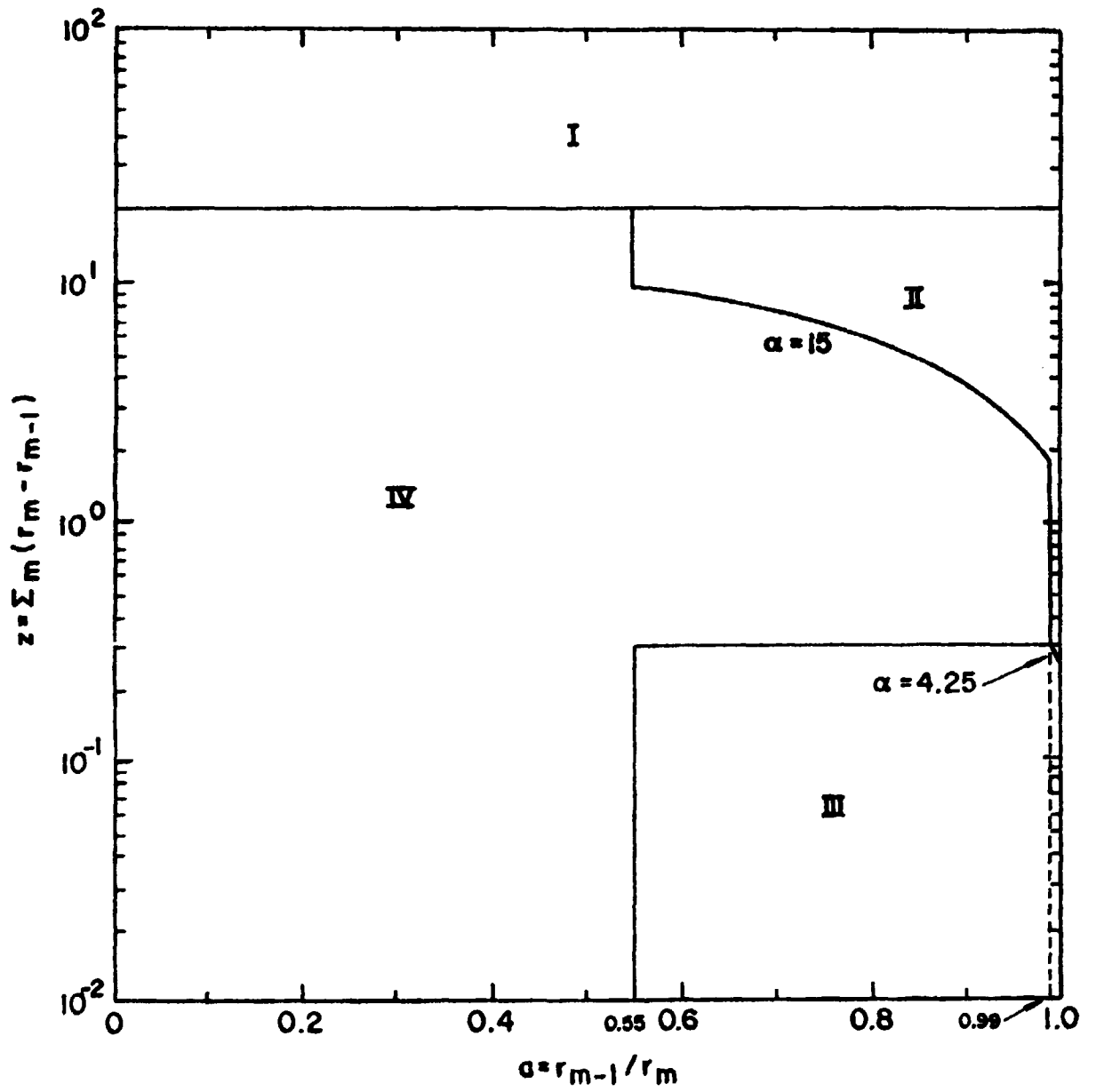


Figura 1: Probabilidade de transmissão  $T_m^{io}$



Região III:  $a > 0.55$  e  $z \leq 0.3$  (e  $\alpha \leq \zeta$ )

Na região de espessuras ópticas pequenas, uma expressão para  $T_m^{io}$  pode ser obtida a partir da equação (1a) por transformação de variáveis e após soma e subtração de expansão em série de potências para  $Ki_3(x)$ , resultando em

$$T_m^{io} = \frac{2(1-a)}{\pi} \frac{1}{a} \int_1^{1/\sqrt{\gamma}} dx \frac{(1/\sqrt{\gamma} - x)}{\sqrt{x-1}} \cdot \frac{(1/\sqrt{\gamma} + x)(1 + \gamma x^2)}{x^2 \sqrt{x+1} \sqrt{1 - \gamma^2 x^2}} \cdot \left[ Ki_3(u) - \left( \frac{\pi}{4} - u + \frac{\pi}{4} u^2 \right) \right] + G, \quad (2b)$$

com  $u = zx$  e

$$G = 1 + b \left[ a - \frac{2}{\pi} \left( \sqrt{1-a^2} + \frac{\text{sen}^{-1} a}{a} \right) \right] + b^2 \left\{ 1 + \frac{a^2}{3} - \frac{2a}{3} \left[ E(a) \left( 1 + \frac{1}{a^2} \right) + K(a) \left( 1 - \frac{1}{a^2} \right) \right] \right\},$$

onde  $K(a)$  e  $E(a)$  são integrais elípticas completas de primeiro e segundo tipo. A integral na equação (2b) é calculada numericamente utilizando-se a fórmula de integração de Gauss-Jacobi,

$$\int_a^b (b-y)^\xi (y-a)^\eta f(y) dy \simeq \left( \frac{b-a}{2} \right)^{\xi+\eta+1} \sum_{i=1}^N w_i f(y_i),$$

onde

$$y_i = \left( \frac{b-a}{2} \right) x_i + \left( \frac{b+a}{2} \right)$$

e  $w_i$  e  $x_i$  são os pesos e abscissas associados aos zeros dos polinômios de Jacobi,  $P_N^{(\xi, \eta)}(x)$ , os quais podem ser obtidos, por exemplo, através de rotina na referência 5. O número de pontos de quadratura necessário varia na região com o valor de  $\alpha$  e para a precisão estabelecida escolhemos

$$N = \begin{cases} 3, & \text{para } \alpha \leq 0.5 \\ 5, & \text{para } 0.5 < \alpha \leq 1.5 \\ 7, & \text{para } \alpha > 1.5 \end{cases}$$

Região IV:  $a \leq 0.55$  ou ( $a > 0.55$  e  $z > 0.3$  e  $\alpha \leq \zeta$ )

Nesta região, as probabilidades de transmissão  $T_m^{io}$  são eficientemente obtidas pela integração numérica da equação

$$T_m^{io} = \frac{2(1+a)}{\pi} \frac{1}{a} \int_{\sqrt{\gamma}}^1 dx \frac{(x - \sqrt{\gamma})}{\sqrt{1-x}} \cdot \frac{(x + \sqrt{\gamma})(x^2 + \gamma)}{x^2 \sqrt{1+x} \sqrt{x^2 - \gamma^2}} Ki_3(z/x), \quad (2c)$$

por quadraturas de Gauss-Jacobi com 5 pontos de quadratura (ou 7 pontos, se  $a \geq 0.95$ ).

## B.) Probabilidade de transmissão $T_m^{oo}$ (Fig. 2)

Região I: assintótica

Para grandes valores de  $\alpha$ , a expressão para a probabilidade de transmissão  $T_m^{oo}$  se reduz ao cálculo da soma

$$T_m^{oo} \simeq \sum_{k=1}^4 \frac{(-1)^{k+1} (2k-1)!!}{k+1 (2k)!!} \cdot \frac{(4-1)(4-3^2)\dots[4-(2k-1)^2]}{(2b)^{2k}}, \quad (3a)$$

com a região de aplicação para essa solução delimitada por  $\alpha \geq \zeta$  e

$$\zeta = \begin{cases} 10, & \text{se } a \leq 0.7 \\ 7.5, & \text{se } a > 0.7 \end{cases}$$

Região II:  $a \leq 0.7$  (e  $\alpha < 10$ )

Por transformação de variáveis, equação (1c) pode também ser escrita como

$$T_m^{oo} = \frac{4}{\pi} \left\{ \int_0^1 dx \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} Ki_3(2bx) - a \int_0^1 dx \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} Ki_3 \left[ 2b\sqrt{(1-a^2)+a^2x^2} \right] \right\}. \quad (3b)$$

A primeira integral nesta equação é obtida analiticamente como

$$\frac{4}{\pi} \int_0^1 dx \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} Ki_3(2bx) = 1 - \frac{4b}{3} \{ [I_1(b)K_1(b) - 1] + 2b[I_0(b)K_1(b) - 1] + 2b^2[I_1(b)K_1(b) + I_0(b)K_0(b)] \},$$

onde  $I_n$  e  $K_n$  são funções de Bessel modificadas. A segunda integral naquela equação pode ser calculada numericamente com 3 pontos de quadratura pela fórmula /6/

$$\int_0^1 \frac{f(y)}{\sqrt{1-y}} dy \simeq \sum_{i=1}^N v_i f(y_i),$$

com

$$y_i = 1 - x_i^2; \quad v_i = 2w_i$$

e onde  $w_i$  e  $x_i$  são os pesos e abscissas associados aos zeros de  $P_{2N}(x)$ .

Região III:  $a > 0.7$  (e  $\alpha < 7.5$ )

A expressão utilizada neste caso para a probabilidade de transmissão  $T_m^{oo}$  é dada por

$$T_m^{oo} = G - \frac{4}{\pi} \int_0^{\sqrt{1-a^2}} dx x \left( 1 - \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} \right) Ki_3(2bx), \quad (3c)$$

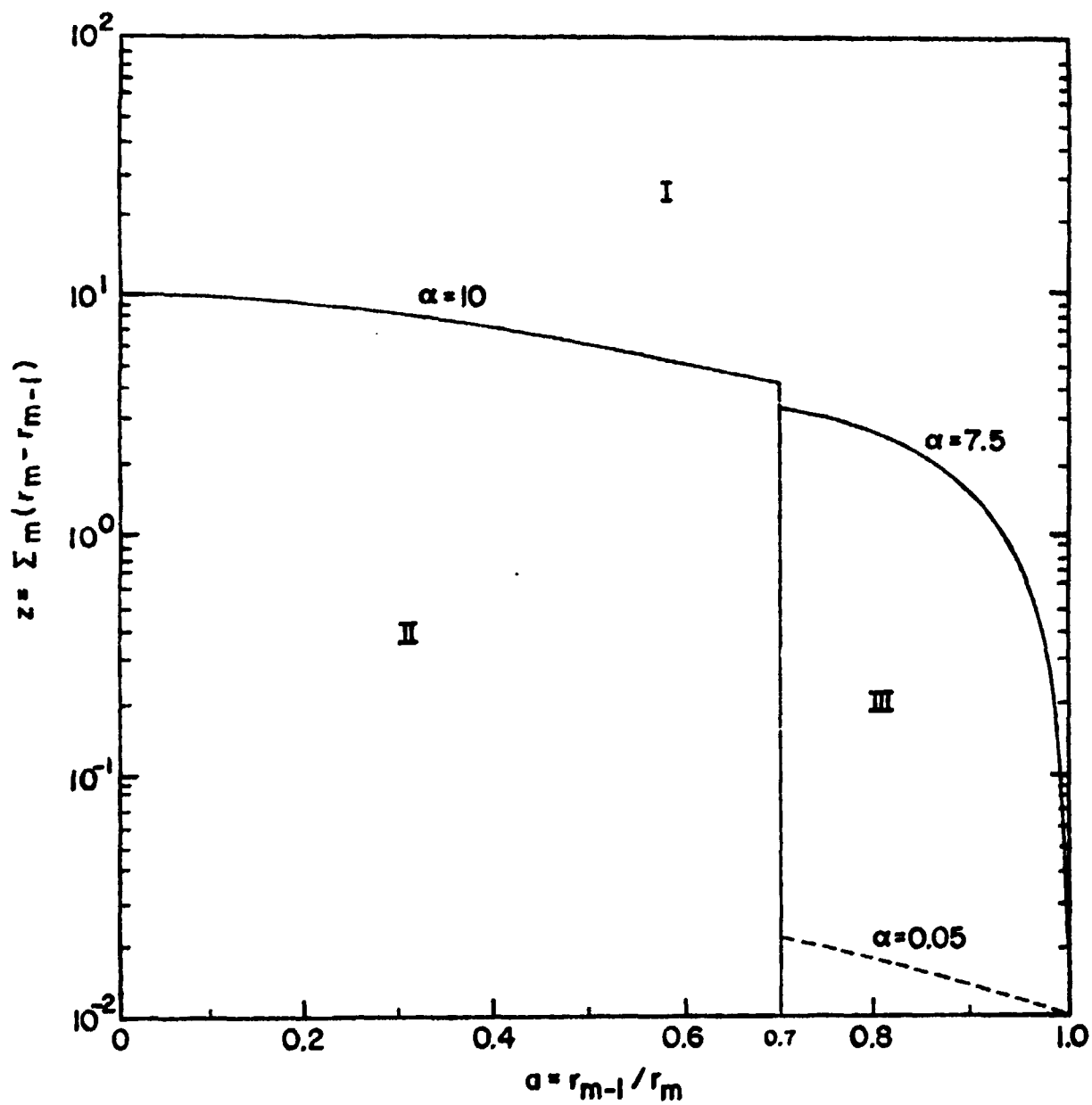


Figura 2: Probabilidade de transmissão  $T_m^{\infty}$

com a integral sendo calculada pela fórmula de Gauss-Legendre com 6 (se  $\alpha < 3.5$ ) ou 8 (se  $\alpha \geq 3.5$ ) pontos de quadratura de  $P_N(x)$ . A função  $G$ , para valores de  $\alpha \geq 0.05$ , por sua vez é dada por

$$G = \frac{4}{\pi} \int_0^{\sqrt{1-a^2}} dx x Ki_3(2bx) =$$

$$= \frac{1}{4b^2} \left\{ \frac{3}{4} - \frac{4}{\pi} [2\alpha Ki_4(2\alpha) + Ki_5(2\alpha)] \right\} .$$

Para valores de  $\alpha$  menores que 0.05 aproximadamente, observa-se perda de precisão ao se utilizar esta expressão. A solução é expandir  $Ki_3(x)$  em série na forma

$$Ki_3(x) = \frac{\pi}{4} - x + \frac{\pi}{4} x^2 + \left\{ \frac{1}{6} \left[ \gamma + \ell n \left( \frac{x}{2} \right) \right] - \frac{11}{36} \right\} x^3 + \dots ,$$

com  $\gamma$  a constante de Euler e integrar para obter uma expressão aproximada para  $G$  que forneça resultados melhores para pequenos valores de  $\alpha$ :

$$G \simeq \left\{ \frac{1}{2} - \frac{8\alpha}{3\pi} + \alpha^2 - \frac{16\alpha^3}{15\pi} \left[ \frac{61}{30} - \gamma - \ell n \alpha \right] \right\} (1 - a^2)$$

### 3. PROBABILIDADES DE TRANSMISSÃO APERFEIÇADAS

As novas probabilidades de transmissão, definidas a partir das suspensão da hipótese de fluxos isotrópicos nas interfaces das regiões anulares são dadas por /1/

$$T_{m,n}^A = \frac{4}{\pi} \left( \frac{r_{m-1}}{r_{n-1}} \right) \int_0^{\frac{r_{n-1}}{r_{m-1}}} dt Ki_3 \left[ b \left( \sqrt{1 - a^2 t^2} - a \sqrt{1 - t^2} \right) \right] \quad (4a)$$

e

$$T_{m,n}^B = \frac{4}{\pi} \left( \frac{r_{m-1}}{r_n - r_{n-1}} \right) \int_{\frac{r_{n-1}}{r_{m-1}}}^{\frac{r_n}{r_{m-1}}} dt Ki_3 \left[ b \left( \sqrt{1 - a^2 t^2} - a \sqrt{1 - t^2} \right) \right] \quad (4b)$$

e onde  $n$  é a região cujas superfícies determinam os ângulos limites de incidência para os nêutrons, na energia em questão. Uma comparação com a equação (1a) sugere que a análise feita para  $T_m^{io}$  pode ser em parte aproveitada na obtenção numérica de  $T_{m,n}^A$  e  $T_{m,n}^B$ . Expressões alternativas e regiões de aplicação para cada uma dessas probabilidades são apresentadas a seguir e em alguns casos aproveitam os resultados obtidos anteriormente para  $T_m^{io}$ . O maior valor permitido de  $a = r_{m-1}/r_m$  é de 0.9999, acima do qual verifica-se perda de precisão em algumas expressões utilizadas para  $T_{m,n}^A$  e  $T_{m,n}^B$ .

### A.) Probabilidade de transmissão $T_{m,n}^A$ (Fig. 3)

Região I:  $z \geq 20$

Nesta região, considera-se  $T_{m,n}^A = 0$  e vale o mesmo comentário feito para  $T_m^{io}$ .

Região II:  $c_2 < 0.54$  e  $\beta(\equiv z/c_2) > \zeta$

A equação (4a) pode também ser escrita como

$$T_{m,n}^A = \left( \frac{r_{m-1}}{r_{n-1}} \right) \left[ T_m^{io} - \frac{2(1+a)}{\pi a} \int_{\sqrt{\gamma}}^{c_2} dx (x - \sqrt{\gamma}) \frac{(x + \sqrt{\gamma})(x^2 + \gamma)}{x^2 \sqrt{1-x^2} \sqrt{x^2 - \gamma^2}} K i_3(z/x) \right], \quad (5a)$$

com\*

$$c_2 = \frac{(r_m - r_{m-1})}{\sqrt{r_m^2 - r_{n-1}^2} - \sqrt{r_{m-1}^2 - r_{n-1}^2}}$$

e pode ser eficientemente calculada se integrada pela fórmula de Gauss-Jacobi com  $\xi = 0$ ,  $\eta = 1$  e sete pontos de quadratura, na região  $c_2 < 0.54$  e  $\beta > \zeta$  onde

$$\zeta = \begin{cases} 15.0, & \text{se } c_2 > 0.2 \\ 1.5, & \text{se } c_2 \leq 0.2 \end{cases}$$

A expressão utilizada para  $T_{m,n}^A$  nesta região, como subtração de dois termos, um deles previamente calculado, é justificada pelo fato de que expressões alternativas com integrações diretas no intervalo  $(c_2, 1.0)$  ou equivalentes, requerem um número maior de pontos de quadratura para a precisão estipulada, além de não se observar perdas de precisão apreciáveis na subtração da equação (5a), na região em questão.

Região III:  $c_2 < 0.54$  e  $z \leq 0.3$  (e  $\beta \leq \zeta$ )

Para espessuras ópticas pequenas, seguindo um procedimento análogo ao utilizado na expressão para  $T_m^{io}$ , obtém-se

$$T_{m,n}^A = \left( \frac{r_{m-1}}{r_{n-1}} \right) \left\{ \frac{2(1-a)}{\pi a} \int_1^{1/c_2} \frac{dx}{\sqrt{x-1}} \cdot \frac{(1-\gamma^2 x^4)}{\gamma x^2 \sqrt{x+1} \sqrt{1-\gamma^2 x^2}} \cdot \left[ K i_3(u) - \left( \frac{\pi}{4} - u + \frac{\pi}{4} u^2 \right) \right] + G \right\}, \quad (5b)$$

com  $u = zx$  e

---

\* O cálculo de  $c_2$  é feito em dupla precisão, para minimizar efeitos de perda de precisão ao se utilizar essa expressão.

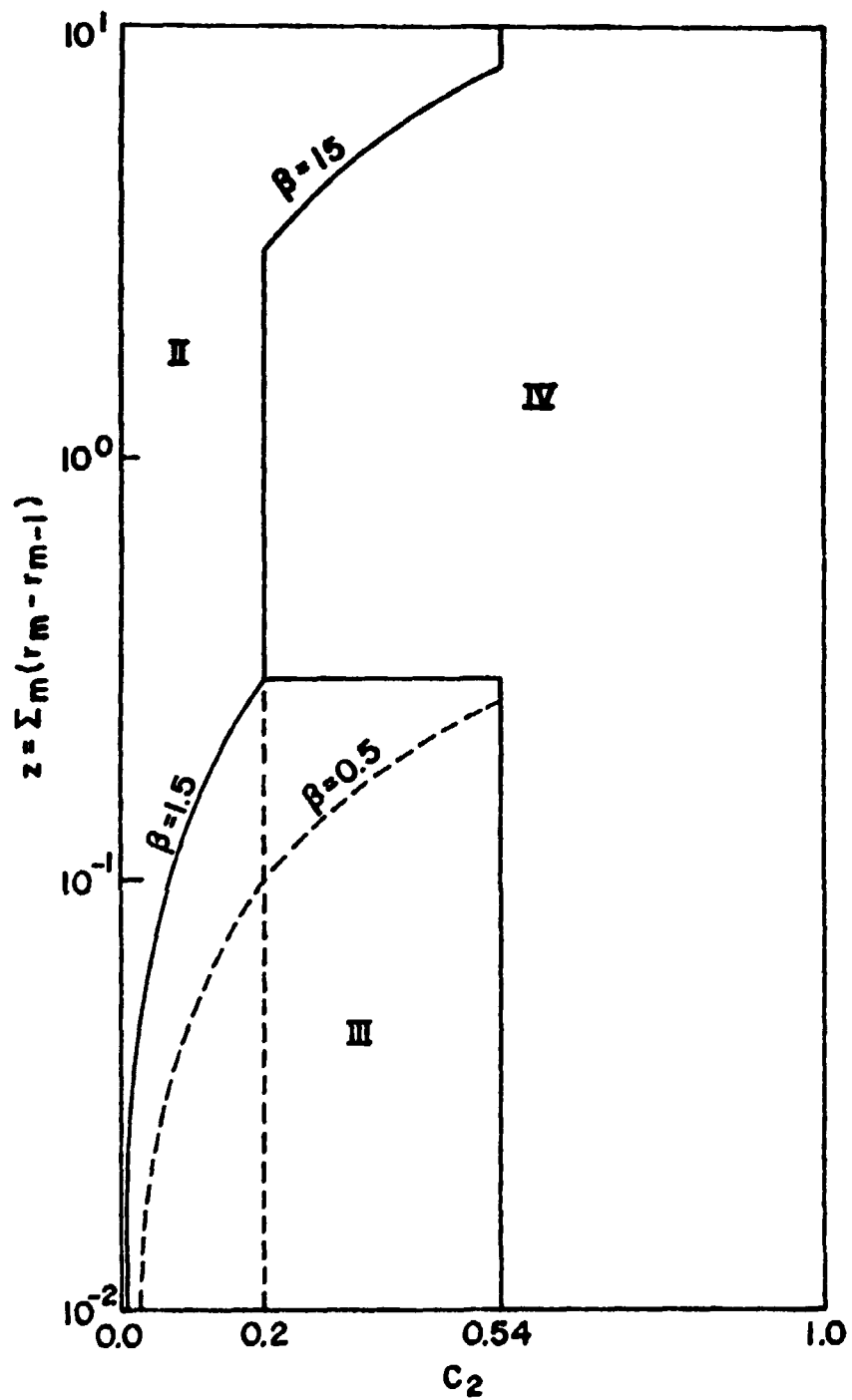


Figura 3: Probabilidade de transmissão  $T_{m,n}^A$

$$G = c + \frac{2}{\pi} b \left[ ac \left( \sqrt{1-c^2} + \frac{\text{sen}^{-1}c}{c} \right) - c \left( \sqrt{1-(ac)^2} + \frac{\text{sen}^{-1}(ac)}{ac} \right) \right] \\ + b^2 \left\{ c(1+a^2) - \frac{2c}{3}(ac)^2 - \frac{2a}{3} \left[ \left( E(a) - E(\theta, a) \right) \left( 1 + \frac{1}{a^2} \right) \right. \right. \\ \left. \left. + \left( K(a) - F(\theta, a) \right) \left( 1 - \frac{1}{a^2} \right) + \chi \right] \right\} ,$$

onde  $c = r_{n-1}/r_{m-1}$ ,  $\theta = \text{sen}^{-1}v$ ,  $\chi = c[2 + a^2(1-c^2)]v$ ,  
com

$$v = \sqrt{\frac{1-c^2}{1-(ac)^2}} ,$$

e  $F(\theta, a)$  e  $E(\theta, a)$  são integrais elípticas parciais de primeiro e segundo tipo, respectivamente e podem ser calculadas com boa precisão, por exemplo, por transformações de Landen descendentes /6/.

A integral na equação (5b) é calculada pela fórmula de Gauss-Jacobi com número variável de pontos de quadratura:

$$N = \begin{cases} 3, & \text{para } \beta \leq 0.5 \\ 5, & \text{para } 0.5 < \beta \leq 1.5 \end{cases}$$

Região IV:  $c_2 \geq 0.54$  ou ( $c_2 < 0.54$  e  $z > 0.3$  e  $\beta \leq \zeta$ )

Uma expressão para esta região, similar à equação (2c) para a probabilidade de transmissão convencional, é dada por

$$T_{m,n}^A = \left( \frac{r_{m-1}}{r_{n-1}} \right) \frac{2(1+a)}{\pi a} \int_{c_2}^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x}} \cdot \frac{(x^4 - \gamma^2)}{x^2 \sqrt{1+x} \sqrt{x^2 - \gamma^2}} K i_3(z/x) , \quad (5c)$$

que pode ser eficientemente calculada com 5 pontos de quadratura pela fórmula de Gauss-Jacobi.

## B.) Probabilidade de transmissão $T_{m,n}^B$ (Fig. 4)

Região I:  $\beta \geq 20$

Nesta região, tal como nos casos anteriores de  $T_m^{i\alpha}$  e  $T_{m,n}^A$ , considera-se  $T_{m,n}^B = 0$ .

Região II:  $c_2 > 0.95$  ou  $[(c_2 - c_1) > 0.46$  e  $\beta \leq 12]$

A probabilidade de transmissão  $T_{m,n}^B$  neste caso pode ser obtida pela diferença de duas probabilidades de transmissão tipo A, uma delas já calculada anteriormente e a outra com

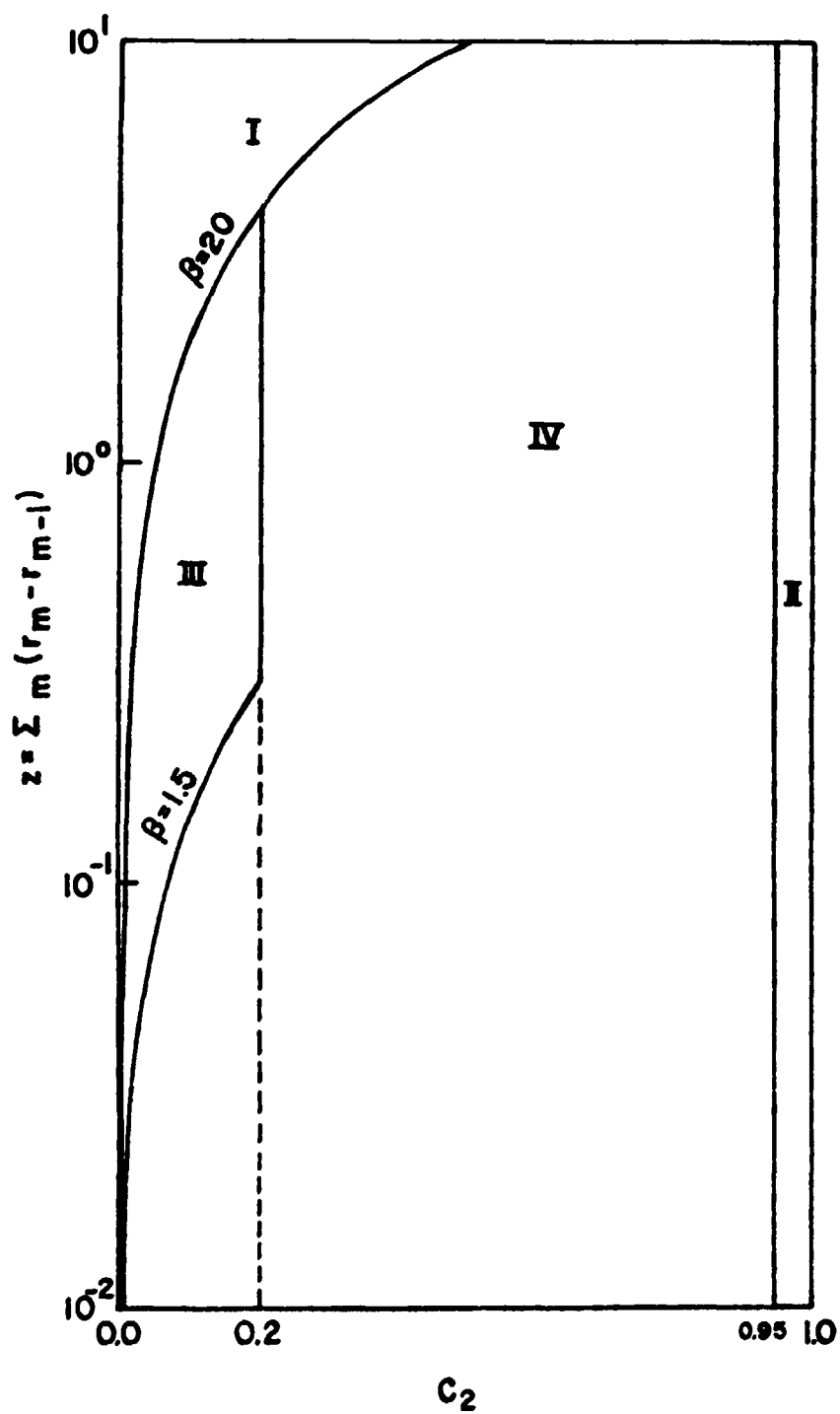


Figura 4: Probabilidade de transmissão  $T_{m,n}^B$  ( $c_2 - c_1 < 0.46$  ou  $\beta > 12$ )



$c_2$  substituído por  $c_1$  e denotada por  $T'_{m,n}{}^A$ :

$$T_{m,n}^B = \left( \frac{r_{n-1}}{r_n - r_{n-1}} \right) \left( T'_{m,n}{}^A - T_{m,n}^A \right) \quad , \quad (6a)$$

com

$$T'_{m,n}{}^A = \left( \frac{r_{m-1}}{r_{n-1}} \right) \frac{2(1+a)}{\pi a} \int_{c_1}^1 \frac{dx}{\sqrt{1-x}} \cdot \frac{(x^4 - \gamma^2)}{x^2 \sqrt{1+x} \sqrt{x^2 - \gamma^2}} Ki_3(z/x)$$

e\*

$$c_1 = \frac{(r_m - r_{m-1})}{\sqrt{r_m^2 - r_n^2} - \sqrt{r_{m-1}^2 - r_n^2}} \quad .$$

A probabilidade de transmissão  $T_{m,n}^B$  pode desta forma ser calculada aproveitando-se o resultado obtido para  $T_{m,n}^A$  e calculando-se numericamente a integral acima, por um dos procedimentos anteriormente examinados na obtenção de  $T_{m,n}^A$ . A possível perda de precisão na subtração dos termos da equação (6a) nos casos em que  $c_2 > 0.95$  e  $c_1$  próximo de  $c_2$  é compensada pela melhoria na qualidade da integração numérica na região IV de  $T_{m,n}^A$  para  $c_2$  próximo de 1.0, de modo que os resultados ficam dentro da precisão estabelecida nos casos em que  $(r_{n-1}/r_n) < 0.9999$ .

Região III:  $c_2 < 0.2$  e  $\beta > 1.5$

Nesta região, a probabilidade  $T_{m,n}^B$  pode ser calculada como a diferença entre probabilidades do tipo A, região II. Para isso basta calcular a integral que aparece na equação (5a) com  $c_2$  substituído por  $c_1$  e subtrair do valor daquela integral, armazenado por ocasião do cálculo de  $T_{m,n}^A$ . A perda de precisão na subtração é também compensada pela qualidade da integração numérica nos intervalos considerados.

Região IV: demais situações

Incluem-se nesta região os casos em que  $[(c_2 - c_1) < 0.46$  ou  $\beta > 12]$  e  $c_2 \leq 0.95$  e  $(c_2 \geq 0.2$  ou  $\beta \leq 1.5)$ . Nestes casos a probabilidade de transmissão  $T_{m,n}^B$  pode ser obtida por integração direta da expressão

$$T_{m,n}^B = \left( \frac{r_{m-1}}{r_n - r_{n-1}} \right) \frac{2(1+a)}{\pi a} \int_{c_1}^{c_2} dx \frac{(x^4 - \gamma^2)}{x^2 \sqrt{1-x^2} \sqrt{x^2 - \gamma^2}} Ki_3(z/x) \quad , \quad (6b)$$

pela fórmula de Gauss-Legendre com 8 pontos de quadratura.

---

\* Tal como em  $c_2$ , a obtenção de  $c_1$  é feita em dupla precisão.

#### 4. EXEMPLOS E DISCUSSÃO

Para ilustrar a qualidade das probabilidades de transmissão calculadas, as expressões apresentadas nas seções anteriores foram implementadas e testadas num computador CDC CYBER 170/750 e os resultados comparados com valores considerados exatos, obtidos pela subdivisão dos intervalos de integração em número crescente de subintervalos e com grande número de pontos de quadratura em cada subintervalo, até atingir convergência. As Tabelas 1 e 2 apresentam as probabilidades de transmissão e os erros relativos associados para conjuntos selecionados de valores de  $\Sigma_m$ ,  $r_{m-1}$ ,  $r_n$  e  $r_{n-1}$ , cobrindo algumas das regiões analisadas. A Tabela 3 mostra probabilidades de transmissão convencionais obtidas pelo método de interpolações em tabelas de valores pré-calculados utilizado pelo código HAMMER (subrotinas GEOM e ESCAPE), para os mesmos casos da Tabela 1. Em todos os exemplos assumiu-se  $r_m = 1.0$  cm.

Uma comparação das Tabelas 1 e 3 revela que, em geral, os erros relativos nas probabilidades de transmissão obtidas por interpolação aumentam com o aumento da espessura óptica da região, chegando a produzir, em alguns casos, valores negativos para  $T_m^{oo}$ . Por outro lado, o tempo necessário para se obter os valores da Tabela 1 foi quase 10 vezes superior ao tempo da Tabela 3 (19.1 ms para a Tabela 1 contra 2.1 ms para a Tabela 3). Mesmo assim, quando inseridos em código de cálculo de células unitárias, esses algoritmos produzirão aumento muito pequeno no tempo total de solução de um problema típico de transporte pelo método das correntes de interface, de modo que sua utilização é plenamente justificável. Os algoritmos aqui apresentados e as novas relações entre correntes de interface encontram-se atualmente implementados no código BCG.

Tabela 1: Probabilidades de transmissão convencionais e erros relativos associados ( $r_m = 1.0$  cm)

$r_{m-1}$ (cm)	$\Sigma_m$ (cm <sup>-1</sup> )	$T_m^{i\circ}$	erro <sup>a</sup>	$T_m^{o\circ}$	erro
0.15	0.01	0.98889	6.0(-09) <sup>b</sup>	0.83401	4.6(-09)
	0.10	0.89525	5.8(-09)	0.70599	3.8(-10)
	1.00	0.34866	4.3(-09)	0.17089	1.0(-09)
	10.00	0.74127(-4)	3.1(-10)	0.18871(-2)	3.7(-09)
0.5	0.02	0.98577	1.6(-07)	0.48468	1.2(-09)
	0.20	0.86802	1.3(-07)	0.37048	3.5(-09)
	2.00	0.26503	1.5(-08)	0.47427(-1)	6.6(-08)
	20.00	0.98423(-5)	5.6(-09)	0.46949(-3)	3.2(-07)
0.7	0.10	0.95532	1.5(-11)	0.26529	9.7(-09)
	1.00	0.64351	5.2(-11)	0.10051	6.2(-06)
	10.00	0.20966(-1)	1.5(-08)	0.18871(-2)	2.1(-07)
	60.00	0.17399(-8)	6.2(-08)	0.52092(-4)	1.2(-11)
0.99	1.00	0.98141	2.2(-08)	0.79361(-2)	2.2(-07)
	10.00	0.83566	8.4(-07)	0.15340(-2)	1.1(-08)
	100.00	0.22048	1.4(-09)	0.18751(-4)	5.2(-12)
	300.00	0.17951(-1)	1.6(-09)	0.20833(-5)	1.1(-11)
0.999	10.00	0.98076	3.2(-07)	0.50162(-3)	1.5(-08)
	100.00	0.83298	4.8(-07)	0.18737(-4)	8.1(-10)
	1000.00	0.21949	1.7(-10)	0.18750(-6)	1.1(-11)
	2000.00	0.60297(-1)	1.7(-09)	0.46875(-7)	1.1(-11)

<sup>a</sup> erro = 1 - C/E; C = calculado; E = exato

<sup>b</sup> números entre parêntesis representam potências de 10

Tabela 2: Probabilidades de transmissão aperfeiçoadas e erros relativos associados  
( $r_m = 1.0$  cm)

$r_{m-1}$ (cm)	$r_n$ (cm)	$r_{n-1}$ (cm)	$\Sigma_m$ (cm <sup>-1</sup> )	$T_{m,n}^A$	erro	$T_{m,n}^B$	erro
0.15	0.149	0.145	0.01	0.98893	5.9(-10)	0.98787	3.4(-11)
			0.10	0.89557	5.7(-10)	0.88619	3.4(-11)
			1.00	0.34979	4.2(-10)	0.31715	3.3(-11)
			10.00	0.75669(-4)	2.7(-11)	0.30432(-4)	3.1(-11)
0.5	0.0011	0.001	0.02	0.98737	3.2(-10)	0.98737	1.8(-08)
			0.20	0.88177	3.2(-10)	0.88177	1.8(-08)
			2.00	0.30283	3.2(-10)	0.30283	1.8(-08)
			20.00	0.20026(-4)	3.2(-10)	0.20026(-4)	1.8(-08)
0.7	0.699	0.3	0.10	0.96184	1.7(-13)	0.95051	1.3(-12)
			1.00	0.68424	1.4(-13)	0.61341	9.7(-13)
			10.00	0.30379(-1)	9.5(-14)	0.13940(-1)	7.3(-11)
			60.00	0.37125(-8)	2.2(-13)	0.26114(-9)	8.1(-06)
0.99	0.989	0.98	1.00	0.98217	2.7(-09)	0.91101	5.9(-11)
			10.00	0.84013	1.9(-08)	0.41341	4.3(-11)
			100.00	0.22272	1.4(-09)	0.52821(-3)	1.5(-10)
			300.00	0.18134(-1)	1.6(-09)	0.12077(-8)	2.0(-08)
0.999	0.998	0.99	10.00	0.98184	6.0(-09)	0.87772	1.7(-10)
			100.00	0.83804	7.1(-08)	0.30242	6.6(-11)
			1000.00	0.22149	1.7(-10)	0.79181(-4)	1.2(-07)
			2000.00	0.60845(-1)	1.7(-09)	0.24480(-7)	1.2(-06)

**Tabela 3: Probabilidades de transmissão convencionais por interpolações de valores pré-calculados**

$r_{m-1}$ (cm)	$\Sigma_m$ ( $\text{cm}^{-1}$ )	$T_m^{io}$	$T_m^{oo}$
0.15	0.01	0.98890	0.83403
	0.10	0.89522	0.70644
	1.00	0.34828	0.16923
	10.00	0.86628(-4)	0.24197(-2)
0.5	0.02	0.98580	0.48472
	0.20	0.86805	0.37123
	2.00	0.26462	0.47636(-1)
	20.00	0.13574(-4)	-0.16435(-2)
0.7	0.10	0.95551	0.26546
	1.00	0.64277	0.10012
	10.00	0.22449(-1)	-0.31734(-2)
	60.00	0.26082(-8)	-0.75579(-3)
0.99	1.00	0.98145	0.80085(-2)
	10.00	0.83509	0.28094(-2)
	100.00	0.22034	0.33578(-3)
	300.00	0.18163(-1)	-0.22845(-3)
0.999	10.00	0.98083	0.41837(-3)
	100.00	0.83294	0.55401(-4)
	1000.00	0.21949	0.45902(-4)
	2000.00	0.60841(-1)	-0.31592(-5)

## 5. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] S. Bogado Leite, "Utilização de Probabilidades de Transmissão Aperfeiçoadas no Cálculo de Células Unitárias pelo Método das Correntes de Interface", IEAv-RP-041/89, 1989.
- [2] S. Jabbawi, J. Karni, W. Rothenstein and S. Velner, "Water-Moderated Reactor Analysis with ENDF/B Data", in Proc. Symposium on Applications of Nuclear Data in Science and Technology, Paris, March 12-16, 1973, IAEA-SM-170/8, International Atomic Energy Agency, Vienna, 1973.
- [3] H. Henryson II, B.J. Toppel and C.G. Stenberg, "MC<sup>2</sup>-2: A Code to Calculate Fast Neutron Spectra and Multigroup Cross Sections", ANL-8144, Argonne National Laboratory, Ill., 1976.
- [4] R.N. Hwang and B.J. Toppel, "Mathematical Behavior and Computation of Transmission Probabilities for Annular Regions", in Proc. of the ANS Topical Meeting on Computational Methods in Nuclear Engineering, Williamsburg, Virginia, April 23-25, 1979.
- [5] A.H. Stroud and D. Secrest, Gaussian Quadrature Formulas, Prentice-Hall Inc., Englewood Cliffs, N.J., 1966.
- [6] M. Abramowitz and I.A. Stegun, Handbook of Mathematical Functions, Dover Publications, Inc., New York, N.Y., 1970.