

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

FORMULAÇÕES ESPECTRONDAIS EM CÁLCULOS NEUTRÔNICOS
MULTIDIMENSIONAIS

por

Camila Becker Picoloto

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, fevereiro de 2015

FORMULAÇÕES ESPECTRONODAIS EM CÁLCULOS NEUTRÔNICOS
MULTIDIMENSIONAIS

por

Camila Becker Picoloto
Mestre em Sistemas e Processos Industriais

Trabalho submetido ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Profa. Dra. Liliane Basso Barichello

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Ricardo Carvalho de Barros, UERJ/IPRJ

Prof. Dr. João Francisco Prolo Filho, FURG/IMEF

Prof. Dr. Rudnei Dias da Cunha, UFRGS/IM

Prof. Dr. Volnei Borges, UFRGS/PROMECC

Prof. Dr. Luiz Alberto Oliveira Rocha
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, fevereiro de 2015

*Aos meus pais, ao meu irmão
e ao meu amor Juliano.*

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço a Deus, origem, meio e fim de nossa jornada, por iluminar meu caminho.

Aos meus pais, Milton e Neuza, agradeço pelo exemplo de vida, carinho, amor, dedicação, incentivo incondicional e por muitas vezes abdicarem de seus sonhos em favor dos meus.

Ao meu irmão Carlos, agradeço pela amizade, pelo incentivo, pelo apoio e exemplo de que os sonhos podem ser alcançados com dedicação e esforço.

Ao meu amado esposo Juliano, agradeço pelo companheirismo, carinho, incentivo, pelas palavras de apoio e, principalmente, pela compreensão à falta de tempo e atenção.

Agradeço, em especial, a minha orientadora, Dra. Liliane Basso Barichello, pela oportunidade, pelo conhecimento compartilhado, pelas orientações, pelo amplo incentivo, dedicação e amizade.

Ao professor Dr. Rudnei Dias da Cunha, pelo amplo auxílio na realização deste trabalho.

Aos professores Dr. Ricardo Carvalho de Barros e Dr. Yousry Azmy, pelos ensinamentos compartilhados.

Ao professor Dr. Rubén Edgardo Panta Pazos, pelo incentivo recebido para dar esse passo.

A Universidade Federal do Rio Grande do Sul, em particular, ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, pela oportunidade recebida.

Aos colegas do grupo de pesquisa, pelo companheirismo e amizade.

A comissão de aperfeiçoamento de pessoal de nível superior (CAPES), pela concessão de bolsa de estudo, possibilitando a realização desta pesquisa.

A todos que contribuíram direta ou indiretamente para essa realização, os meus sinceros agradecimentos.

RESUMO

Neste trabalho, uma abordagem analítica é utilizada juntamente com esquemas nodais na resolução de problemas bidimensionais de transporte de nêutrons de fonte fixa, em geometria cartesiana, definidos em meio heterogêneo, com espalhamento anisotrópico. A metodologia proposta é desenvolvida a partir da versão em ordenadas discretas da equação de transporte bidimensional, juntamente com o esquema de quadratura simétrica de nível. As equações em ordenadas discretas são integradas transversalmente, originando equações unidimensionais para os fluxos angulares médios. Tais equações unidimensionais são resolvidas pelo método ADO (*Analytical Discrete Ordinates*). Expressões explícitas nas variáveis espaciais são derivadas para os fluxos angulares médios em cada região em que o domínio foi subdividido. A solução em cada região é acoplada às regiões vizinhas, para fornecer a solução no domínio todo, sem a utilização de métodos iterativos. Como usual em esquemas nodais, equações auxiliares são necessárias, recebendo neste estudo dois tratamentos distintos: um em que os fluxos desconhecidos nos contornos das regiões assumem relações de proporcionalidade, com os fluxos angulares médios; e, outro, em que esses fluxos são aproximados por polinômios de ordem zero sendo, nesse caso, incorporados ao termo fonte. Resultados numéricos obtidos e comparados com disponíveis na literatura mostram a viabilidade da formulação, mantendo a eficiência computacional já verificada no tratamento de outros problemas, com o uso do método ADO.

Palavras-chave: Problemas Bidimensionais de Transporte de Nêutrons, Ordenadas Discretas, Método ADO, Problemas de Fonte Fixa, Meio Heterogêneo, Espalhamento Anisotrópico.

ABSTRACT

In this work, an analytical approach is used along with nodal schemes for the solution of fixed source two-dimensional neutron transport problems, in Cartesian geometry, defined in heterogeneous medium, with anisotropic scattering. The methodology is developed from the discrete ordinates version of the two-dimensional transport equation along with the level symmetric angular quadrature set. One-dimensional equations for the averaged angular fluxes are obtained by transverse integration of the original problem. Such equations are solved by the ADO method. Explicit expressions in spatial variables are derived for averaged fluxes in each region in which the domain is subdivided. The solution in each region is coupled with that of its neighbouring regions to provide the solution in the whole domain, without resorting to using iterative methods. As usual in nodal schemes, auxiliary equations are needed. Here two different treatments were given to this issue: one based on relations between the unknown flows in the contours of the regions and the average angular fluxes, and another in which these flows are approximated by polynomials of order zero being in this case, incorporated into the source term. Numerical results were compared with available literature showing the solution preserve the computational efficiency which has been a good feature of the ADO method when applied to different problems.

Keywords: Two-dimensional Neutron Transport Problems, Discrete Ordinates, ADO Method, Fixed-Source Problems, Heterogeneous Media, Anisotropic Scattering.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
2	EQUAÇÃO BIDIMENSIONAL DE TRANSPORTE DE NÊUTRONS EM ORDENADAS DISCRETAS	9
2.1	A equação de transporte de nêutrons	9
2.2	Discretização das direções	10
2.3	Formulação em ordenadas discretas	12
2.4	Esquemas Nodais	13
3	EQUAÇÕES AUXILIARES NA FORMA DE POLINÔMIOS DE BAIXA ORDEM	18
3.1	Solução homogênea pelo método ADO na região r	18
3.2	Solução particular e geral	22
3.3	Resultados Numéricos	25
3.3.1	Meio homogêneo isotrópico	26
3.3.2	Meio heterogêneo isotrópico	27
3.3.3	Meio homogêneo com espalhamento linearmente anisotrópico	33
3.3.4	Meio heterogêneo com espalhamento linearmente anisotrópico	35
4	EQUAÇÕES AUXILIARES BASEADAS EM FLUXOS MÉDIOS	37
4.1	Solução homogênea pelo método ADO na região r	37
4.2	Meio homogêneo	41
4.2.1	Resultados numéricos	44
4.3	Meio heterogêneo	49
4.3.1	Resultados numéricos	52
5	SOLUÇÕES ELEMENTARES ANALÍTICAS	56
5.1	Formulação	56
5.2	Resultados numéricos e aspectos computacionais	58
6	CONSIDERAÇÕES FINAIS E TRABALHOS FUTUROS	63
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	65

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1	Representação das direções obtidas pela quadratura simétrica de nível para S_2, S_4 e S_6	11
Figura 2.2	Configuração dos pesos por octantes	12
Figura 2.3	Representação da divisão do domínio em regiões	13
Figura 2.4	Escolha do ordenamento das direções $\Psi_{yr}(x, \mathbf{\Omega}_i)$ e $N = 4$	14
Figura 2.5	Ordenamento das direções para $\Psi_{xr}(y, \mathbf{\Omega}_i)$ e $N = 4$	16
Figura 3.1	Representação do domínio para o primeiro problema	26
Figura 3.2	Representação do domínio para o segundo problema	28
Figura 3.3	Representação do domínio para o terceiro problema	31
Figura 3.4	Representação do domínio para o quarto problema	32
Figura 3.5	Representação do domínio para o quinto problema teste	34
Figura 3.6	Representação do domínio para o sexto problema	35
Figura 4.1	Representação geométrica do domínio do problema abordado	41
Figura 4.2	Representação da geometria do primeiro problema considerado	49
Figura 4.3	Representação da geometria do segundo problema considerado	54

LISTA DE TABELAS

Tabela 2.1	Conjunto de quadratura simétrica de nível	12
Tabela 3.1	Taxa de absorção para $\sigma_s = 0.99 \text{ cm}^{-1}$ e $N = 4$	27
Tabela 3.2	Fluxo escalar médio - Problema 2	29
Tabela 3.3	Resultados disponíveis na literatura - Problema 2	30
Tabela 3.4	Fluxo escalar médio - Problema 3	31
Tabela 3.5	Fluxo escalar médio - Problema 4	33
Tabela 3.6	Fluxo escalar médio - Problema 5	34
Tabela 3.7	Taxa de absorção - Problema 6	36
Tabela 4.1	Fluxo escalar $\phi(x, y)$ para $x = y = 0.5\text{cm}$	46
Tabela 4.2	Fluxo escalar $\phi(x, y)$ para $x = y = 0.7\text{cm}$	47
Tabela 4.3	Fluxo escalar $\phi(x, y)$ para $x = y = 0.98\text{cm}$	48
Tabela 4.4	Fluxos escalares médios para o primeiro problema	53
Tabela 4.5	Fluxos escalares médios para o segundo problema	55
Tabela 5.1	Fluxo escalar $\phi(x, y)$ para $x = y = 0.5\text{cm}$	60
Tabela 5.2	Fluxo escalar $\phi(x, y)$ para $x = y = 0.7\text{cm}$	61
Tabela 5.3	Fluxo escalar $\phi(x, y)$ para $x = y = 0.98\text{cm}$	62

LISTA DE ABREVIATURAS

ADO	Método de Ordenadas Discretas Analítico
CCN	Modelo nodal constante constante
LLN	Modelo nodal linear linear
SGF-CN	Modelo espectral nodal constante
SGF-LN	Modelo espectral nodal linear
DD	Método <i>Diamond Difference</i>
WDD	Método <i>Weighted Diamond Difference</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

$a_m, a_{m-1}, b_m, b_{m-1}$	divisões do domínio em x e y
$\mathbf{A}_{yr}, \mathbf{B}_{yr}, \mathbf{A}_{xr}, \mathbf{B}_{xr}, \mathbf{D}_{yr}, \mathbf{D}_{xr}$	matrizes associadas ao problema de autovalor
$A_{j,r}, A_{j+M/2,r}, B_{j,r}, B_{j+M/2,r}$	constantes relacionadas a solução homogênea
k_r^*, \tilde{k}_r, k	constantes de proporcionalidade
$K_{k,r}, W_{k,r}, I_{ri}$	soluções particulares
$\lambda_{yr}, \lambda_{xr}$	autovalores do problema homogêneo médio
M	número de direções
N	ordem da quadratura S_N
$\mathbf{M}, \mathbf{W}_r, \mathbf{S}_r, \mathbf{T}, \Xi_r$	matrizes auxiliares
ν_r, γ_r	constantes de separação
ω_i	pesos associados as direções Ω_i
$\Omega_i = (\mu_i, \eta_i)$	direção das partículas
$\Psi(x, y, \Omega_i)$	fluxo angular
$\Psi_{yr}(x, \Omega_i), \Psi_{xr}(y, \Omega_i)$	fluxo angular médio em y e x da região r
$\Psi_{yr}^H(x, \Omega_i), \Psi_{xr}^H(y, \Omega_i)$	solução homogênea média em y e x
$\Psi_{yr}^P(x, \Omega_i), \Psi_{xr}^P(y, \Omega_i)$	solução particular média em y e x
$\overline{\Psi}_r(\Omega_i)$	fluxo angular médio na região r
$\overline{\phi}_r$	fluxo escalar médio na região r
$\phi(x, y)$	fluxo escalar
$\phi_y(x), \phi_x(y)$	fluxo escalar médio em y e x
$\Phi_{yr}(\nu, \Omega_i), \Phi_{xr}(\nu, \Omega_i)$	autofunções do problema homogêneo
\overline{R}_r	taxa de absorção na região r

$Q(x, y)$	fonte isotrópica
$Q_y(x), Q_x(y)$	fonte isotrópica média em y e x
$Q_{yr}(x, \mathbf{\Omega}_i), Q_{xr}(y, \mathbf{\Omega}_i)$	termo fonte das equações nodais integradas transversalmente
$\hat{Q}_{yri}(x)$	termo fonte médio em y
r	indica a região considerada
σ_a^r	seção de choque de absorção, cm^{-1}
σ_t^r	seção de choque total, cm^{-1}
$\sigma_s^r, \sigma_{s0}^r, \sigma_{s1}^r$	seções de choque de espalhamento, cm^{-1}
$U_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i), U_{xr}(\gamma_r, \mathbf{\Omega}_i)$	vetores auxiliares
$V_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i), V_{xr}(\gamma_r, \mathbf{\Omega}_i)$	vetores auxiliares
x, y	caracterizam a posição das partículas, cm
$\hat{\mathbf{X}}_r, \hat{\mathbf{Y}}_r, \mathbf{z}, \mathbf{v}$	matrizes auxiliares

1 INTRODUÇÃO

O transporte de partículas é objeto de estudo em diversas aplicações. Sondas nucleares têm sido utilizadas para caracterizar a geologia do subsolo e métodos computacionais para simular a resposta dessas sondas e calibrar instrumentos nucleares usados na descoberta de poços subterrâneos (*oil-well logging*) (Badruzzaman e Chiaramonte, 1987; Chen et al., 2012; Ijasan et al., 2013; Mosher et al., 2010; Zhang et al., 1998). De outro lado, pesquisas relacionadas a reatores nucleares, que objetivam o controle da fissão nuclear ou determinar quantidades como fluxos escalares, taxa de absorção e corrente de nêutrons, relacionadas ao processo de transporte de nêutrons no núcleo, são consideradas em (Duderstadt e Hamilton, 1976; Günay et al., 2013; Hu et al., 2013; Mervin et al., 2013; Vyawahare e Nataraj, 2013; Su'ud, 2008). Aplicações relacionadas ao transporte de radiação são objeto de investigação no trabalho desenvolvido por Shultis e Myneni (1988) em que são determinadas as intensidades de radiação em vegetações, necessárias para calcular taxas de fotossíntese, e a radiação refletida, utilizada em aplicações de sensoriamento remoto. Nessa mesma linha de aplicação, tratamentos térmicos induzidos (hipertermia), que consistem na exposição de tecidos a altas temperaturas com o intuito de destruir células cancerígenas, se utilizam de estimativas da densidade de radiação (Dombrovsky et al., 2011; Maurente et al., 2013). Além disso, o transporte de radiação térmica em meios participantes, cuja análise é de grande importância na concepção de sistemas térmicos como caldeiras, fornos, queimadores, isoladores, entre outros, são considerados em Mishra et al. (2012b). Pesquisas relacionadas à tomografia óptica baseadas na equação de transporte de radiação são encontradas em (Klose et al., 2002; Klose e Hielscher, 2002; Klose e Larsen, 2006). Por outro lado, aplicações em microfluidos são consideradas em Büyükköçak et al. (2014) em que uma metodologia de simulação numérica para separação de partículas ultrassônicas é apresentada e avaliada.

Dentre essas aplicações, neste trabalho, será dada ênfase à modelagem do transporte de nêutrons, que é caracterizada pela descrição da migração de partículas neutras no interior de um meio material, juntamente com a probabilidade de interação com os núcleos dos átomos desse meio. Estudos relacionados a tal tema são de suma importância, em especial, em reatores nucleares onde é necessário o controle do processo de fissão nuclear, bem como em cálculo de blindagem, que é utilizada na proteção de pessoal, de equipamentos e do meio ambiente, em locais onde há a presença de material radioativo.

A descrição matemática da distribuição de partículas em um domínio pode ser feita através da equação de Boltzmann em sua versão linear, também chamada de equação de transporte. Proposta no fim do século XIX por Boltzmann (1872), durante seus estudos em teoria cinética dos gases, a equação linear de Boltzmann consiste em uma equação integro-diferencial que representa um balanço entre a produção e a perda de partículas “descrevendo de forma quantitativa a distribuição espacial, direcional, temporal e energética das partículas em meios materiais”, conforme Garcia (2002). A solução de tal equação tem motivado o estudo e o desenvolvimento de diversas metodologias. De forma geral, os métodos podem ter um enfoque probabilístico, como no caso dos métodos de Monte Carlo (Günay et al., 2013; Mervin et al., 2013), cujo objetivo é resolver aproximadamente o problema exato, ou determinístico, que busca resolver de forma exata uma formulação aproximada, como, os métodos de ordenadas discretas (Adamas e Larsen, 2002; Alves Filho et al., 2002; Badruzzaman, 1986; Barichello et al., 2009, 2011, 2000; Barichello e Siewert, 1999; Barros e Larsen, 1990, 1992; Barros et al., 1999, 2010, 2003, 1998; Brockmann, 1866; Cabrera, 2009; Chandrasekhar, 1950; Doicu e Trautmann, 2009; Duo et al., 2009; Duo e Azmy, 2009; Gonzáles et al., 2009; Hong, 2013; Lewis e Miller, 1984; Menezes et al., 2013; Prolo Filho, 2007, 2011; Vilhena et al., 2003; Walters e O’Dell, 1981), baseados na discretização da variável angular, e os métodos de elementos finitos (Hennart e Valle, 2010; Ju et al., 2007; Lewis et al., 1975; Walters, 1986; Schweiger et al., 1995) ou de diferenças finitas (Han et al., 2008) que discretizam a variável espacial.

Um importante resultado foi apresentado em 1960, por Case (Case e Zweifel, 1967) que propôs uma solução analítica para a equação de transporte na forma de uma expansão em um conjunto completo de autofunções. A proposta, denominada método das soluções elementares, aplicava-se apenas em casos idealizados, ou seja, geometria cartesiana unidimensional, meio homogêneo, um grupo de energia, espalhamento isotrópico e independente do tempo. Mika (1961) estendeu essa metodologia para problemas com espalhamento anisotrópico. Anteriormente, outros métodos tinham sido propostos como é o caso do método dos harmônicos esféricos (P_N), formulado por Jeans. Esse consiste em aproximar a dependência angular da função distribuição de partículas por um conjunto finito de harmônicos esféricos ou polinômios de Legendre (Bell e Glasstone, 1970; Wu et al., 2010). O método F_N , proposto por Siewert e seus colaboradores, também merece ser ressaltado. Tal método utiliza parcialmente a técnica de Case, com o objetivo de derivar um conjunto de equações singulares para as distribuições angulares nos contornos sendo, então, essas distribuições aproximadas por um polinômio de ordem N (Grandjean e Siewert, 1979; Siewert, 1978, 1979).

Na literatura, encontram-se outras abordagens como o estudo apresentado por Chen e Sheu (2004), em que foram utilizados métodos de gradiente conjugado generalizados combinados com dois pré-condicionadores e com o código TORT, na solução da equação de transporte tridimensional. Por outro lado, a metodologia empregada por Patra e Saha Ray (2014) consiste na solução da equação de transporte de nêutrons estacionária, em um meio homogêneo e isotrópico, utilizando o método de colocação wavelets Haar (HWCM), na solução da equação diferencial associada, após tratamento do termo integral. Mikata (2014) propôs uma solução analítica exata para a equação de transporte unidimensional de nêutrons independente do tempo, monoenergética e com fonte pontual. A solução da equação de transporte ocorre com o uso do método das características em (Azmy, 1992a; Ferrer e Azmy, 2009). Além disso, problemas de autovalor para a equação de transporte de nêutrons a uma velocidade com espalhamento isotrópico em um estado estacionário são analisados em (Suragan, 2013). Nesse estudo, as desigualdades de tipo Rayleigh-Faber-Krahn são demonstradas para autovalores de primeira ordem. Já o método da probabilidade de transmissão (TPM) é utilizado para resolver a equação de transporte integral de nêutrons em (Wang et al., 2013). Na pesquisa desenvolvida por Talamo (2013) são apresentados três algoritmos para resolver numericamente a equação de transporte de nêutrons dependente do tempo, pelo método das características com representação dos nêutrons atrasados. Redes Neurais, juntamente com o método de harmônico esféricos, são utilizadas na solução da equação de transporte de nêutrons independente do tempo, em geometria bidimensional (Pirouzmand e Hadad, 2011). Além disso, investigações relacionadas à discretização do domínio espacial têm sido objeto de pesquisa em (Abbassi et al., 2011; Avila et al., 2011; Baker et al., 2012, 2013) e a utilização de Wavelets na discretização de variáveis angulares e espaciais na equação de transporte de nêutrons é apresentada em (Zheng et al., 2012).

A equação de transferência radiativa também tem sido objeto de investigação em (Mishra et al., 2012a; Siewert, 2000; Zhao et al., 2013), em que são apresentadas propostas de solução. Nessa mesma linha de aplicação, no trabalho de Altaç e Tekkalmaz (2013), o método SK_N foi utilizado com o intuito de reduzir a complexidade da equação de transferência radiativa a um conjunto de equações diferenciais ordinárias acopladas, em problemas unidimensionais, ou a um conjunto de equações diferenciais parciais, em geometrias bidimensionais ou tridimensionais. Alguns estudos em geometrias alternativas são apresentados em (Lu et al., 2007; Mishra e Krishna, 2011; Prinsloo e Tomasevic, 2008; Wang et al., 2010; Zimin e Baturin, 2002).

O método de ordenadas discretas (S_N), proposto por Wick (1943) e Chandrasekhar (1950), é um dos métodos clássicos mais conhecidos e ainda hoje usado na solução da equação de transporte em diferentes aplicações. O referido método baseia-se na discretização da variável angular, sendo o termo integral aproximado por uma quadratura numérica, transformando a equação em um sistema de equações diferenciais, cuja solução pode ser obtida com o uso de abordagens numéricas e analíticas. Esse procedimento, também chamado de Método S_N , tem sido amplamente utilizado para resolver problemas de transporte unidimensionais e multidimensionais, em diferentes geometrias.

A solução proposta por Chandrasekhar caracteriza-se pela analiticidade das soluções nas variáveis espaciais. Algumas formulações alternativas, derivadas de solução analítica das equações de ordenadas discretas unidimensionais foram propostas, como é o caso dos métodos *SGF* (*Spectral Green's Function*) e LTS_N . O método SGF, proposto por Barros e Larsen (Barros e Larsen, 1992), tem por objetivo resolver numericamente problemas de ordenadas discretas (S_N), em geometria plana, sem erro de truncamento espacial (Barros et al., 2010; Militão et al., 2012). Esse método consiste em discretizar a variável espacial em malhas grossas e aproximar, por polinômios de baixa ordem, os termos de fuga transversal, sendo os termos relacionados à fonte de espalhamento tratados analiticamente. Já o método LTS_N , proposto por Vilhena e Barichello (1991), baseia-se na aplicação da transformada de Laplace na variável espacial do sistema de equações diferenciais ordinárias obtido pela aplicação do método de ordenadas discretas (Barichello, 1992; Borges et al., 2012; Vilhena et al., 1999).

Da forma como foi inicialmente proposto, o método de ordenadas discretas apresentou uma dificuldade numérica que correspondia à determinação de constantes de separação, obtidas pela solução de equações características, e também pelo uso de, em geral, um único tipo de esquema de quadratura. Todavia, mais recentemente, uma versão analítica do método de ordenadas discretas, denominada Método ADO (*Analytical Discrete Ordinates*) foi proposta por Barichello e Siewert (1999). Diferentemente da proposta de Chandrasekhar, nesta versão, o esquema de quadratura pode ser arbitrário e as constantes de separação são avaliadas a partir de um problema de autovalor e não como raízes de polinômios. Adicionalmente, os termos exponenciais da solução foram reescritos de modo a evitar problemas computacionais de *overflow*. Esse método tem-se mostrado uma ferramenta muito útil na resolução de problemas unidimensionais de transporte (Barichello et al., 2000; Barichello e Siewert, 1999; Prolo Filho, 2007; Scherer e Barichello, 2010; Scherer et al., 2009a,b; Siewert e Valougeorgis, 2002) como, por exemplo, em problemas de transferência radiativa (Barichello, 2011) e na dinâmica de gases

rarefeitos (Camargo, 2003; Garcia e Siewert, 2004; Scherer e Barichello, 2010; Scherer et al., 2009a,b; Siewert, 2005)

No tratamento de problemas multidimensionais, destacam-se os *Métodos Nodais* (Abreu, 2005; Azmy, 1988c; Badruzzaman, 1990, 1986; Barros e Larsen, 1992; Barros et al., 1999, 2010, 2003, 1998; Dominguez, 2006; Dominguez et al., 2010a, 2005, 2010b; Mello e Barros, 2002; Menezes et al., 2013; Walters, 1986), os quais são considerados uma classe muito precisa de métodos de malha grossa para problemas S_N , em geometria cartesiana (Badruzzaman, 1990). Tais métodos têm como objetivo resolver analiticamente as equações S_N integradas transversalmente usando aproximações para os termos de fuga transversal e para os termos de fonte (Barros et al., 1999). Tendo em vista que tais métodos discretizam as variáveis espaciais em malhas grossas, eles acarretam ganho de eficiência e precisão. Os métodos nodais podem ser divididos em dois grupos: os polinomiais (Azmy, 1988c; Badruzzaman, 1990; Walters e O'Dell, 1981; Walters, 1986) e os espectralnodais (Barros e Larsen, 1992; Barros et al., 1999, 2010, 2003, 1998; Dominguez, 2006; Dominguez et al., 2010a, 2005, 2010b; Mello e Barros, 2002; Menezes et al., 2013).

Os métodos nodais polinomiais aproximam tanto o termo de fuga transversal quanto o termo de fonte de espalhamento por polinômios de baixa ordem, onde o grau do polinômio utilizado na aproximação identifica-se o método nodal. Atualmente, destacam-se na literatura os métodos nodais constante-constante e linear (Dominguez, 2006).

Desenvolvido por Walters e O'Dell (1981) o método nodal constante-constante (CCN) aproxima os termos de fuga transversal e a fonte de espalhamento, utilizando polinômios de grau zero (constante). Trata-se do método nodal mais simples em que as aproximações utilizadas comprometem a precisão do método em malhas muito grossas (Dominguez, 2006).

Por sua vez, o método nodal linear linear (LLN), apresentado à comunidade científica por Walters (1986) e Badruzzaman (1990), utiliza uma aproximação linear para ambos os termos. Esse método tem resolvido de forma satisfatória problemas S_N em malhas grossas. No entanto, segundo Dominguez (2006), apresenta dificuldades na resolução de problemas com malhas muito grossas, tendo em vista o alto custo algébrico e computacional.

Em contraste com os métodos nodais polinomiais, na década de noventa, surgem os métodos espectralnodais. Esses métodos aproximam por polinômios de baixa ordem apenas os termos de fuga transversal, sendo os termos relacionados à fonte de espalhamento tratados analiticamente. De acordo com a aproximação utilizada nos termos de fuga transversal para problemas S_N de fonte fixa, os métodos espectralnodais são classificados como método

espectronodal constante (SGF-CN) e método espectronodal linear (SGF-LN). O método espectronodal constante (SGF-CN), desenvolvido por Barros e Larsen (1992), aproxima o termo de fuga transversal por uma constante (Dominguez et al., 2005; Menezes et al., 2013). Já o método espectronodal linear (SGF-LN), desenvolvido por Dominguez (2006), aproxima o termo de fuga transversal por um polinômio de primeira ordem. Esse método apresenta maior precisão e menor sensibilidade à malha quando comparado com os métodos nodais polinomiais e o SGF-CN (Dominguez, 2006).

O estudo e o desenvolvimento de técnicas analíticas, mesmo com a existência de códigos numéricos voltados para problemas multidimensionais de transporte, consistem em uma importante linha de investigação na busca por ganho computacional e por resultados *benchmark* (Capilla et al., 2012; Ganapol, 2008; Kobayashi e Sugimura, 2001; Oberkampf e Trucano, 2008; Sood et al., 2003; Williams, 2013). As ferramentas computacionais disponíveis para simulação na área de transporte multidimensional baseiam-se fortemente em abordagens numéricas e na abordagem probabilística associada ao Método de Monte Carlo (Wagner et al., 2011). Diferentes códigos computacionais como é o caso do ANDES (Lozano et al., 2008), que resolve a equação da difusão de nêutrons através do método de diferenças finitas em malha grossa; do CRX (Lee e Cho, 2006) e DeCART (Cho e Joo, 2006), que são baseados no método das características e utilizam o método de diferenças finitas para obter a solução da equação de transporte; do TWODANT (Kim et al., 2004), TWOTRAN (Lathrop, 1968) e THREEDANT (Kim et al., 2006), baseados no método de ordenadas discretas juntamente com esquema *Diamond* linear; do PARTISN (Alcouffe, 2001; Dahl, 2006), que utiliza a computação paralela para resolver problema de transporte em ordenadas discretas; do TORT (Bekar e Azmy, 2009; Klingensmith et al., 2006; Konno, 2001; Seubert et al., 2006) e DORT (Azmy, 2004; Pautz, 2004), os quais utilizam métodos nodais na solução das equações S_N de transporte; e diversos recursos computacionais, (Azmy, 1992b; Hall et al., 2013; Shulin e Weidong, 2004), têm sido amplamente utilizados. No entanto, o estudo de metodologias mais precisas e mais eficientes do ponto de vista computacional, particularmente com redução de tempo computacional, continua sendo forte objeto de investigação científica. Nesse contexto, as soluções analíticas permitem obter uma melhor performance, ou seja, possibilitam a redução do custo computacional de um programa, bem como não necessitam de procedimentos de controle de erro de discretizações.

Recentemente, o método ADO foi utilizado conjuntamente com esquemas nodais para o tratamento de problemas bidimensionais de fonte fixa (Barichello et al., 2011). Nesse caso, diferentemente da maioria dos métodos baseados em esquemas nodais (Badruzzaman, 1985;

Poursalehi et al., 2013), a equação unidimensional integrada transversalmente é resolvida pelo método de ordenadas discretas analítico (ADO) e sua solução é explícita em termos das variáveis espaciais. O referido método tem sido utilizado com sucesso na resolução de problemas bidimensionais de transporte de nêutrons, com fonte fixa, monoenergéticos, independentes do tempo, em meio homogêneo e com espalhamento isotrópico. Em tais problemas, abordagens distintas têm sido utilizadas para representar os fluxos desconhecidos nos contornos, que surgem pelo processo de integração, através de aproximações por polinômios de ordem zero (Prolo Filho e Barichello, 2013a; Tres et al., 2014b), por combinações de exponenciais (Prolo Filho e Barichello, 2013b, 2014) e relacionando os fluxos emergentes com os fluxos médios integrados (Barichello et al., 2011; Picoloto et al., 2013; Tres et al., 2013). Além disso, duas representações distintas têm sido empregadas para obter a solução particular. A primeira baseia-se nas funções de Green (Prolo Filho e Barichello, 2014; Tres et al., 2014a), e pode ser usada quando os termos não homogêneos são mais gerais; já a segunda fornece uma formulação mais simples, quando o termo fonte é definido como uma função constante (Picoloto et al., 2013; Tres et al., 2013, 2014b).

Com o objetivo fundamental de aprimorar essa formulação para o tratamento de problemas relacionados à modelagem física do transporte de nêutrons, o presente trabalho estuda modelos mais complexos, como os que incluem espalhamento anisotrópico, e estabelece a extensão da metodologia para o caso de meios heterogêneos, a partir de duas propostas diferenciadas. Adicionalmente, foram incorporadas condições de contorno reflexivas. Para esses problemas, comparativamente às abordagens disponíveis na literatura, espera-se contribuir significativamente sob o ponto de vista da formulação matemática e computacional, uma vez que a ordem dos problemas de autovalor associados será reduzida à metade do que usualmente considerado, reduzindo o tempo computacional e preservando a analiticidade na variável espacial.

Além disso, neste trabalho, os problemas de autovalores associados foram simplificados no caso isotrópico. A matriz associada ao problema de autovalor foi escrita como perturbação de uma matriz diagonal (Datta, 1995) que, por sua característica inerente, possibilita maior ganho e eficiência computacional, e as autofunções serão determinadas de forma explícita.

Dessa forma, no capítulo 2, apresenta-se a equação bidimensional de transporte de nêutrons em sua versão em ordenadas discretas juntamente com a discretização da variável angular utilizada. O domínio bidimensional foi dividido em r regiões, sendo que, em cada uma dessas regiões, considerou-se o meio homogêneo. Aplicando os métodos nodais, realiza-se a integração da equação na variável x e y , gerando um sistema de equações diferenciais

ordinárias unidimensionais. Considerando que ao realizar a integração, surgem termos desconhecidos relacionados à condição de contorno, serão necessárias equações auxiliares. Duas abordagens distintas foram utilizadas para representar esses termos desconhecidos. A primeira, baseada em polinômios de ordem zero, é apresentada no capítulo 3. Nesse caso, os problemas unidimensionais nas variáveis x e y são resolvidos de forma acoplada sem o uso de esquemas de varredura. Alguns problemas testes são apresentados e comparados com resultados existentes na literatura.

Outro tipo de equações auxiliares é descrito no capítulo 4. Em tal caso, os fluxos angulares nos contornos são considerados proporcionais aos fluxos angulares médios, permanecendo os problemas unidimensionais nas variáveis x e y desacoplados. Buscando a validação do método, resultados para problemas com espalhamento isotrópico em meios homogêneo e heterogêneo foram comparados com os publicados na literatura.

No capítulo 5, realiza-se a simplificação das matrizes associadas aos problemas de autovalores, obtidas a partir da solução de problemas bidimensionais de transporte de nêutrons, em meio homogêneo e com espalhamento isotrópico, rederivando o problema na forma de uma matriz perturbação de matriz diagonal. A estrutura da matriz é utilizada para reescrever o problema de maneira ainda mais simplificada, que por suas características inerentes, possibilita ainda maior ganho e eficiência computacional. Os resultados numéricos são comparados com já obtidos na literatura.

Finalmente, apresentam-se as considerações finais no capítulo 6 e, por fim, são listadas as referências bibliográficas citadas ao longo do trabalho.

2 EQUAÇÃO BIDIMENSIONAL DE TRANSPORTE DE NÊUTRONS EM ORDENADAS DISCRETAS

Com intuito de apresentar a formulação matemática utilizada no tratamento de problemas propostos neste trabalho, destina-se este capítulo a mostrar as técnicas utilizadas na abordagem analítica do método de ordenadas discretas *ADO*. Inicialmente, parte-se da equação de transporte e, na sequência, apresenta-se sua versão em ordenadas discretas para geometrias bidimensionais e espalhamento linearmente anisotrópico. Devido à discretização da variável angular, uma quadratura multidimensional é utilizada. Essa discretização ocorre de forma que certas propriedades de simetria sejam satisfeitas.

2.1 A equação de transporte de nêutrons

A equação de transporte, também conhecida como equação linear de Boltzmann, é deduzida a partir de um balanço de partículas envolvidas, no caso, de nêutrons, realizado no espaço de fase do problema. Nessas condições, a taxa de variação do número de nêutrons em um volume elementar dV será a resultante da diferença entre a taxa de produção de nêutrons e a perda de nêutrons, nesse elemento de volume (Garcia, 2002).

Conforme Lewis e Miller (1984), a equação de transporte em estado estacionário, em meio não-multiplicativo, geometria cartesiana tridimensional e considerando um grupo de energia é representada por

$$\left[\hat{\Omega} \cdot \nabla + \sigma_t(x, y, z) \right] \Psi(x, y, z, \hat{\Omega}) = Q(x, y, z, \hat{\Omega}) + \int_S d\hat{\Omega}' \sigma_s(x, y, z, \hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega}) \Psi(x, y, z, \hat{\Omega}'), \quad (2.1)$$

onde $\Psi(x, y, z, \hat{\Omega})$ é o fluxo angular de nêutrons, que representa o número provável de nêutrons por unidade de área e ângulo sólido $d\hat{\Omega}$; x, y e z caracterizam a posição espacial das partículas; $\hat{\Omega} = (\mu, \eta, \xi)$ caracteriza a direção das partículas na esfera unitária; $\sigma_t(x, y, z)$ é a seção de choque macroscópica total na posição x, y, z ; $\sigma_s(x, y, z, \hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega})$ é a seção de choque diferencial de espalhamento, que representa a probabilidade por unidade de comprimento que uma partícula na posição x, y, z , ao viajar na direção $\hat{\Omega}'$, irá espalhar em um ângulo sólido $d\hat{\Omega}$ sobre $\hat{\Omega}$; $Q(x, y, z, \hat{\Omega})$ representa a fonte externa e ∇ o operador gradiente.

A integral da equação (2.1) é avaliada sobre as direções $\hat{\Omega}$, na esfera unitária S . Para escrever a versão em ordenadas discretas da equação (2.1), necessita-se discretizar o conjunto de direções Ω , assunto que será abordado na próxima seção.

2.2 Discretização das direções

A discretização das direções Ω em um conjunto finito de direções discretas $\Omega_k = (\mu_k, \eta_k)$ ocorre a partir do uso de uma quadratura numérica, aproximando o termo integral por um somatório que relaciona as direções discretas a pesos ω_k . A precisão dessa aproximação dependerá, segundo Kock e Becker (2004), do número de direções discretas consideradas, dos pesos, da escolha e da relação entre eles.

De acordo com Jenal et al. (1977), as quadraturas podem ser classificadas como *completamente simétricas*, *semi-simétrica* e *não-simétrica*. O primeiro grupo é caracterizado por possuir vetores direção (no caso tridimensional esses vetores são compostos por (μ, η, ξ)) invariantes à rotação de $\pi/2$ sobre qualquer um dos eixos μ, η e ξ . Dessa forma, cada conjunto de coordenadas μ, η e ξ deve ser simétrico com relação à origem. Para uma quadratura ser *semi-simétrica* a invariância rotacional ocorre apenas sobre um eixo. Finalmente, as *quadraturas não-simétricas* são aquelas que satisfazem apenas $\mu^2 + \eta^2 + \xi^2 = 1$.

Com relação à escolha da quadratura angular, ela é arbitrária. No entanto, restrições às direções Ω_k e aos pesos ω_k podem ser feitas de forma que certas propriedades sejam preservadas como, por exemplo, é o caso da simetria (Modest, 1993). Além disso, a invariância rotacional das direções discretas ao redor do centro da esfera unitária, para o caso tridimensional, ou no centro do círculo unitário, para o caso bidimensional, é outro fator a ser observado, conforme Lewis e Miller (1984).

Um caso particular de quadraturas completamente simétrica é a *Quadratura simétrica de nível* (*Level Symmetric Quadrature - LQ_N*) (Carlson e Lee, 1961; Jenal et al., 1977; Lee, 1962; Lewis e Miller, 1984), no qual os pontos base são selecionados sobre a esfera unitária de tal forma que se preserve a simetria entre os oito octantes, com respeito à rotação de $\pi/2$ (Cacuci, 2010). O primeiro conjunto de quadratura simétrica de nível foi proposto por Carlson, em 1971, e é tal que a integral de uma função polinomial nos cossenos diretores ocorre com precisão máxima (Cacuci, 2010).

O conjunto de valores de cossenos diretores em cada eixo é representado por (Cacuci, 2010)

$$\mu_p^2 = \mu_1^2 + (p-1) \frac{2(1-3\mu_1^2)}{N-2}, \quad (2.2)$$

em que μ_1 é a projeção do primeiro ponto no intervalo $0 < \mu_1 \leq 1/3$ (Lewis e Miller, 1984). A escolha de μ_1 é arbitrária, exceto para o caso S_2 , quando o valor será $\mu_1 = 1/\sqrt{3}$.

Em uma esfera unitária, o número de direções, formadas pela combinação de cossenos diretores μ , η e ξ definidos a partir de (2.2), é equivalente a $M = N(N + 2)$, em que N representa a ordem da quadratura utilizada. Para o caso bidimensional, objeto de estudo deste trabalho, o número de direções é reduzido para a metade das direções da esfera unitária, ou seja, $M = N(N + 2)/2$. A redução no número de direções ocorre porque, em problemas bidimensionais, não se considera a dependência azimutal. Dessa forma, os pontos de quadratura são projetados sobre o plano x e y e os pontos pertencentes a $z > 0$ coincidem com os pontos pertencentes a $z < 0$ (Cacuci, 2010; Lewis e Miller, 1984). Na Figura 2.1, são representadas direções obtidas pela quadratura simétrica de nível para S_2 , S_4 e S_6 .

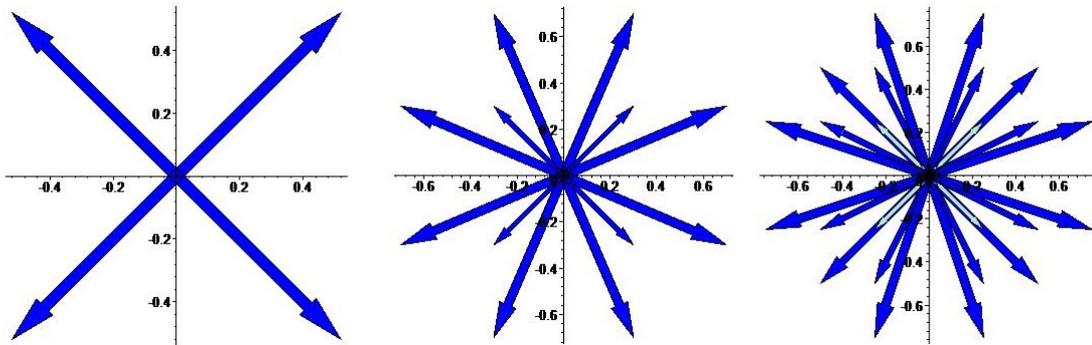


Figura 2.1: Representação das direções obtidas pela quadratura simétrica de nível para S_2 , S_4 e S_6

Nessa quadratura, os pesos são normalizados de forma que em cada quadrante

$$\sum_{k=1}^{N(N+2)/8} \omega_k = 1, \quad (2.3)$$

onde o índice k representa o conjunto de cossenos diretores $\{\mu_i, \eta_j\}$, com $i, j = 1, \dots, N/2$. Pesos associados a cada direção são sujeitos a certas restrições. Para $N = 2$, tem-se apenas uma direção por quadrante e um correspondente peso. Para $N = 4$, há três direções por quadrante que, por razões de simetria, terão o mesmo peso (Cacuci, 2010).

Os valores dos parâmetros, cossenos diretores e pesos da quadratura simétrica de nível para $N = 2$, $N = 4$, $N = 6$ e $N = 8$ são apresentados na Tabela (2.1). A configuração dos pesos para um quadrante, segundo Lewis e Miller (1984), considerando $N = 2$, $N = 4$, $N = 6$ e $N = 8$, estão representados na Figura 2.2.

Ao utilizar a aproximação do termo integral pelo esquema de quadratura simétrico de nível apresentado nesta seção, a equação (2.1) terá sua versão em ordenadas discretas, discutida na seção que segue.

Tabela 2.1: Conjunto de quadratura simétrica de nível

Nível	n	μ_n	ω_n
S_2	1	0.5773502	1.0000000
S_4	1	0.3500212	0.3333333
	2	0.8688903	
S_6	1	0.2666355	0.1761263
	2	0.6815076	0.1572071
	3	0.9261808	
S_8	1	0.2182179	0.1209877
	2	0.5773503	0.0907407
	3	0.7867958	0.0925926
	4	0.9511897	

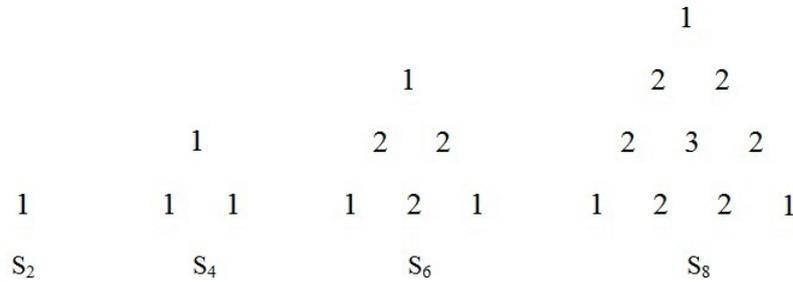


Figura 2.2: Configuração dos pesos por octantes

2.3 Formulação em ordenadas discretas

Desenvolvido por Wick (1943) e Chandrasekhar (1950), o método de ordenadas discretas tem sido amplamente utilizado como clássica aproximação para equação do transporte. A base da formulação em ordenadas discretas (S_N) consiste em discretizar as variáveis angulares (μ, η) em M direções, através de um conjunto de valores discretos (μ_i, η_i) e utilizar um conjunto de quadraturas angulares para aproximar o termo integral. Diversos estudos abordam sobre esquemas de quadraturas para o método S_N (Kock e Becker, 2004; Mishra et al., 2006; Park et al., 2012). Conforme já mencionado neste trabalho, na seção anterior, neste trabalho, utilizou-se o esquema de quadratura de nível simétrico, no qual os cossenos diretores, componentes das direções discretas Ω_i , são valores entre -1 e 1 , ou seja, $\mu_k, \eta_k \in [-1, 1]$ para $k = 1, \dots, N$.

Nesse contexto, reescreve-se a equação (2.1), considerando a geometria cartesiana bidimensional, espalhamento linearmente anisotrópico e fonte externa isotrópica de nêutrons, em ordenadas discretas, como

$$\mu_i \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \Omega_i) + \eta_i \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \Omega_i) + \sigma_t \Psi(x, y, \Omega_i) = Q(x, y) + \frac{\sigma_{s0}}{4} \sum_{k=1}^M \omega_k \Psi(x, y, \Omega_k) + \frac{3\sigma_{s1}}{4} \left[\mu_i \sum_{k=1}^M \mu_k \omega_k \Psi(x, y, \Omega_k) + \eta_i \sum_{k=1}^M \eta_k \omega_k \Psi(x, y, \Omega_k) \right], \quad (2.4)$$

em que $\Omega_i = (\mu_i, \eta_i)$ representa a direção associada com $i = 1, \dots, M$ e ω_k é o peso da quadratura angular associado à direção. Vale lembrar aqui que os pesos associados às direções foram considerados de acordo com Lewis e Miller (1984). Devido ao termo integral da equação (2.1) representar a integração sob os quatro quadrantes, o somatório da equação (2.4) aparece multiplicado por $1/4$, normalizando os pesos.

2.4 Esquemas Nodais

Com o intuito de obter dois sistemas de equações diferenciais ordinárias unidimensionais a partir do problema original, uma equação diferencial parcial bidimensional, utilizaram-se os fundamentos dos métodos nodais. Dessa forma, a partir da versão em ordenadas discretas, obtêm-se as equações nodais integradas transversalmente. Essas consistem em versões da equação (2.4) integradas nas variáveis espaciais x e y e definidas em termos de grandezas médias.

Com a meta de obter uma formulação que permita a aplicação em domínios constituídos de meios materiais distintos, subdividiu-se a placa bidimensional em $r = 1, \dots, R$ regiões retangulares, definidas como $x \in [a_{m-1}, a_m]$ e $y \in [b_{m-1}, b_m]$, com $0 \leq a_{m-1} < a_m \leq a$, $0 \leq b_{m-1} < b_m \leq b$ e m indicando o número de divisões em cada uma das variáveis espaciais, conforme representação na Figura 2.3. Assim, integra-se a equação (2.4) em $y \in [b_{m-1}, b_m]$, que representa o intervalo em y da região em que se pretende determinar o fluxo angular médio, resultando em um sistema de equações diferenciais ordinárias em termos de fluxos angulares médios Ψ_y e com dependência espacial da variável x

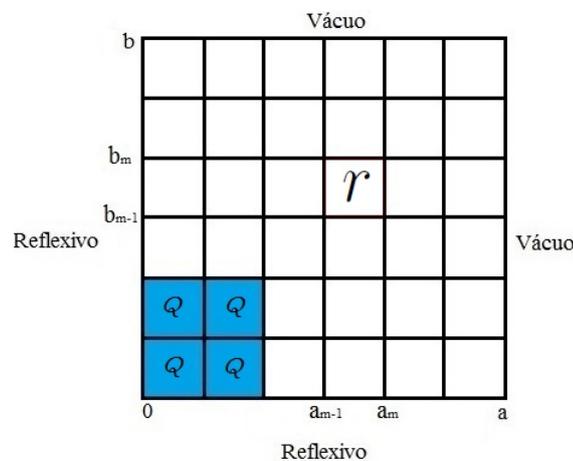


Figura 2.3: Representação da divisão do domínio em regiões

$$\mu_i \frac{d}{dx} \Psi_{yr}(x, \Omega_i) + \frac{\eta_i}{b_m - b_{m-1}} [\Psi_r(x, b_m, \Omega_i) - \Psi_r(x, b_{m-1}, \Omega_i)] + \sigma_t^r \Psi_{yr}(x, \Omega_i) = Q_{yr}(x) + \frac{\sigma_{s0}^r}{4} \sum_{k=1}^M \omega_k \Psi_{yr}(x, \Omega_k) + \frac{3\sigma_{s1}^r}{4} \left[\mu_i \sum_{k=1}^M \mu_k \omega_k \Psi_{yr}(x, \Omega_k) + \eta_i \sum_{k=1}^M \eta_k \omega_k \Psi_{yr}(x, \Omega_k) \right], \quad (2.5)$$

para $i = 1, \dots, M$ e $r = 1, \dots, R$, sendo

$$\Psi_{yr}(x, \Omega_i) = \frac{1}{b_m - b_{m-1}} \int_{b_{m-1}}^{b_m} \Psi_r(x, y, \Omega_i) dy \quad (2.6)$$

e

$$Q_{yr}(x) = \frac{1}{b_m - b_{m-1}} \int_{b_{m-1}}^{b_m} Q_r(x, y) dy. \quad (2.7)$$

O ordenamento das direções foi escolhido de forma a considerar que, para $i = 1, \dots, M/2$, os vetores Ω_i representassem as direções de fluxos incidentes e os vetores $\Omega_{i+M/2}$ representassem as direções de fluxos emergentes, em uma determinada fronteira.

Assim, no caso do problema integrado em y , optou-se por ordenar o conjunto de direções (ω_i, Ω_i) de modo que para os índices $i = 1, \dots, M/2$, as direções tenham a coordenada $\mu_i > 0$; e para os índices $i = M/2 + 1, \dots, M$, as direções tenham a coordenada $\mu_i < 0$, conforme está esboçado na Figura 2.4, seguindo (Barichello et al., 2009, 2011).

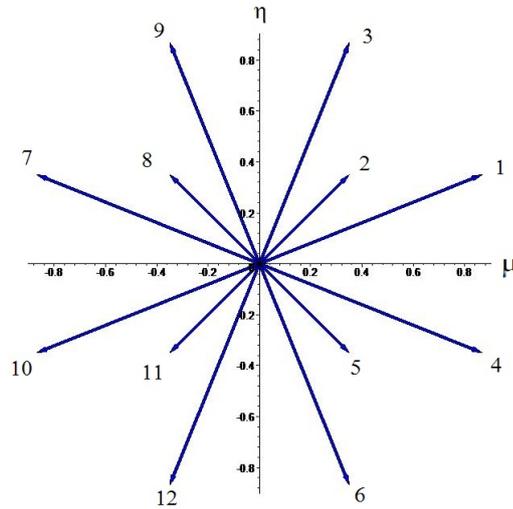


Figura 2.4: Escolha do ordenamento das direções $\Psi_{yr}(x, \Omega_i)$ e $N = 4$

Dessa forma, a equação (2.5) passou a ser assim considerada

$$\begin{aligned} \mu_i \frac{d}{dx} \Psi_{yr}(x, \Omega_i) + \frac{\eta_i}{b_m - b_{m-1}} [\Psi_r(x, b_m, \Omega_i) - \Psi_r(x, b_{m-1}, \Omega_i)] + \sigma_t^r \Psi_{yr}(x, \Omega_i) = \\ Q_{yr}(x) + \frac{\sigma_{s0}^r}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Psi_{yr}(x, \Omega_k) + \Psi_{yr}(x, \Omega_{k+M/2})] + \\ \frac{3\sigma_{s1}^r}{4} \left[\mu_i \sum_{k=1}^{M/2} \mu_k \omega_k [\Psi_{yr}(x, \Omega_k) - \Psi_{yr}(x, \Omega_{k+M/2})] + \eta_i \sum_{k=1}^{M/2} \eta_k \omega_k [\Psi_{yr}(x, \Omega_k) + \Psi_{yr}(x, \Omega_{k+M/2})] \right] \end{aligned} \quad (2.8)$$

e

$$\begin{aligned} - \mu_i \frac{d}{dx} \Psi_{yr}(x, \Omega_{i+M/2}) + \frac{\eta_{i+M/2}}{b_m - b_{m-1}} [\Psi_r(x, b_m, \Omega_{i+M/2}) - \Psi_r(x, b_{m-1}, \Omega_{i+M/2})] + \\ \sigma_t^r \Psi_{yr}(x, \Omega_{i+M/2}) = Q_{yr}(x) + \frac{\sigma_{s0}^r}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Psi_{yr}(x, \Omega_k) + \Psi_{yr}(x, \Omega_{k+M/2})] + \\ \frac{3\sigma_{s1}^r}{4} \left[-\mu_i \sum_{k=1}^{M/2} \mu_k \omega_k [\Psi_{yr}(x, \Omega_k) - \Psi_{yr}(x, \Omega_{k+M/2})] + \right. \\ \left. \eta_{i+M/2} \sum_{k=1}^{M/2} \eta_k \omega_k [\Psi_{yr}(x, \Omega_k) + \Psi_{yr}(x, \Omega_{k+M/2})] \right], \end{aligned} \quad (2.9)$$

para $i = 1, \dots, M/2$ e $r = 1, \dots, R$.

Da mesma forma, para obter um sistema de equações diferenciais ordinárias em termos de fluxos angulares médios Ψ_x e com dependência espacial da variável y , integra-se a equação (2.4) em $x \in [a_{m-1}, a_m]$, que representa o intervalo em x da região em que se pretende determinar o fluxo angular médio, resultando em

$$\begin{aligned} \eta_i \frac{d}{dy} \Psi_{xr}(y, \Omega_i) + \frac{\mu_i}{a_m - a_{m-1}} [\Psi_r(a_m, y, \Omega_i) - \Psi_r(a_{m-1}, y, \Omega_i)] + \sigma_t^r \Psi_{xr}(y, \Omega_i) = \\ Q_{xr}(y) + \frac{\sigma_{s0}^r}{4} \sum_{k=1}^M \omega_k \Psi_{xr}(y, \Omega_k) + \frac{3\sigma_{s1}^r}{4} \left[\mu_i \sum_{k=1}^M \mu_k \omega_k \Psi_{xr}(y, \Omega_k) + \eta_i \sum_{k=1}^M \eta_k \omega_k \Psi_{xr}(y, \Omega_k) \right], \end{aligned} \quad (2.10)$$

para $i = 1, \dots, M$ e $r = 1, \dots, R$, com

$$\Psi_{xr}(y, \Omega_i) = \frac{1}{a_m - a_{m-1}} \int_{a_{m-1}}^{a_m} \Psi_r(x, y, \Omega_i) dx \quad (2.11)$$

e

$$Q_{xr}(y) = \frac{1}{a_m - a_{m-1}} \int_{a_{m-1}}^{a_m} Q_r(x, y) dx. \quad (2.12)$$

Analisando, agora, o sistema de equações diferenciais médias em x , a escolha da ordenação do conjunto de direções (ω_i, Ω_i) ocorre de forma que, para os índices $i = 1, \dots, M/2$, as direções tenham a coordenada $\eta_i > 0$; e para os índices $i = M/2 + 1, \dots, M$, as direções tenham a coordenada $\eta_i < 0$, conforme está representado na Figura 2.5. A importância da escolha do ordenamento dos conjuntos de direções ficará mais evidente, no decorrer do trabalho.

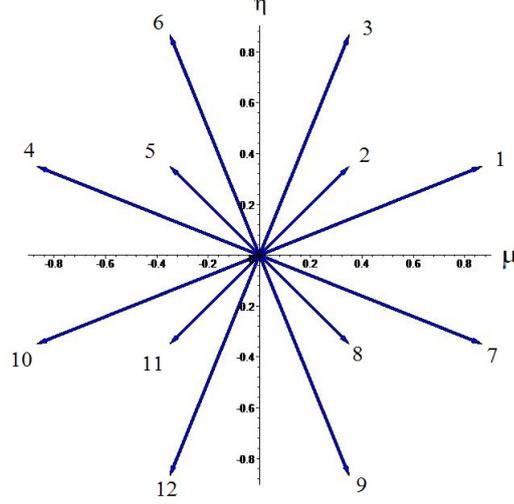


Figura 2.5: Ordenamento das direções para $\Psi_{xr}(y, \Omega_i)$ e $N = 4$

Com o uso dessa escolha de enumeração, a equação (2.10) será reescrita como

$$\begin{aligned} \eta_i \frac{d}{dy} \Psi_{xr}(y, \Omega_i) + \frac{\mu_i}{a_m - a_{m-1}} [\Psi_r(a_m, y, \Omega_i) - \Psi_r(a_{m-1}, y, \Omega_i)] + \sigma_t^r \Psi_{xr}(y, \Omega_i) = \\ Q_{xr}(y) + \frac{\sigma_{s0}^r}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Psi_{xr}(y, \Omega_k) + \Psi_{xr}(y, \Omega_{k+M/2})] + \\ \frac{3\sigma_{s1}^r}{4} \left[\mu_i \sum_{k=1}^{M/2} \mu_k \omega_k [\Psi_{xr}(y, \Omega_k) + \Psi_{xr}(y, \Omega_{k+M/2})] + \eta_i \sum_{k=1}^{M/2} \eta_k \omega_k [\Psi_{xr}(y, \Omega_k) - \Psi_{xr}(y, \Omega_{k+M/2})] \right] \end{aligned} \quad (2.13)$$

e

$$\begin{aligned} -\eta_i \frac{d}{dy} \Psi_{xr}(y, \Omega_{i+M/2}) + \frac{\mu_{i+M/2}}{a_m - a_{m-1}} [\Psi_r(a_m, y, \Omega_{i+M/2}) - \Psi_r(a_{m-1}, y, \Omega_{i+M/2})] + \\ \sigma_t^r \Psi_{xr}(y, \Omega_{i+M/2}) = Q_{xr}(y) + \frac{\sigma_{s0}^r}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Psi_{xr}(y, \Omega_k) + \Psi_{xr}(y, \Omega_{k+M/2})] + \\ \frac{3\sigma_{s1}^r}{4} \left[\mu_{i+M/2} \sum_{k=1}^{M/2} \mu_k \omega_k [\Psi_{xr}(y, \Omega_k) + \Psi_{xr}(y, \Omega_{k+M/2})] \right. \\ \left. - \eta_i \sum_{k=1}^{M/2} \eta_k \omega_k [\Psi_{xr}(y, \Omega_k) - \Psi_{xr}(y, \Omega_{k+M/2})] \right], \end{aligned} \quad (2.14)$$

com $i = 1, \dots, M/2$.

Vale ressaltar que, apesar de usar a mesma notação para as componentes das direções, μ_i e η_i , e ao peso ω_i associado a cada direção, isso não indica que a direção Ω_i de um problema corresponde à direção Ω_i do outro. Como indicado anteriormente, cada problema unidimensional segue um ordenamento diferente (conforme as Figuras 2.4 e 2.5) que contribuirá para a obtenção das soluções homogêneas.

Observando as equações (2.8), (2.9), (2.13) e (2.14), verifica-se que termos relacionados aos contornos das regiões surgem do processo de integração. No entanto, esses fluxos angulares nos contornos podem ser conhecidos nas fronteiras do domínio para as direções incidentes. Como usual em esquemas nodais, equações auxiliares são necessárias para aproximar os fluxos angulares desconhecidos nas fronteiras.

Neste trabalho, duas abordagens foram utilizadas para representar tais fluxos. Na primeira, que será detalhada no próximo capítulo, os termos relativos aos contornos são aproximados por constantes dependentes da direção, sendo esses termos agrupados ao termo fonte. Com esse tipo de aproximações, foram obtidas expressões para as soluções particulares que, juntamente com as soluções homogêneas, construiu-se um sistema no qual todos os coeficientes foram determinados, não sendo qualquer parâmetro determinado empiricamente. A outra proposta consiste em aproximar os fluxos desconhecidos nos contornos por relações com os fluxos médios integrados. Com o uso desse tipo de expressões, as aproximações são incorporadas à parte homogênea dos problemas integrados e, conseqüentemente, traz certa contribuição no problema de autovalores e na obtenção das constantes de separação. Contudo, nesse caso, é necessário definir *a priori* os coeficientes de proporcionalidade entre os fluxos angulares desconhecidos nos contornos e os fluxos médios integrados. O uso dessa abordagem será detalhada no capítulo 4.

3 EQUAÇÕES AUXILIARES NA FORMA DE POLINÔMIOS DE BAIXA ORDEM

No capítulo anterior, foram geradas equações unidimensionais a partir da aplicação de esquemas nodais na equação bidimensional de transporte em ordenadas discretas, possibilitando o uso do método ADO para a sua resolução. Neste capítulo, aproximações por polinômios de ordem zero, dependentes da direção, são empregadas para representar os fluxos desconhecidos nos contornos das regiões. Essas equações auxiliares são agrupadas ao termo fonte, e os problemas nas direções x e y resolvidos de forma acoplada por meio de um sistema linear. Além disso, a formulação desenvolvida permite a resolução de problemas com espalhamento linearmente anisotrópico e a divisão do domínio em um número maior de regiões, o que possibilita a solução de problemas mais complexos.

3.1 Solução homogênea pelo método ADO na região r

O uso de esquemas nodais na equação bidimensional de transporte permitiu que obtivéssemos um sistema de equações unidimensionais integradas transversalmente, equações (2.8) e (2.9), as quais serão resolvidas utilizando o método ADO. As soluções homogêneas, obtidas através desse método, são construídas em termos de constantes de separação e autofunções, definidas através de expressões que envolvem autovalores e autovetores.

Nesse quadro, à região r , propõem-se soluções para o problema homogêneo com $i = 1, \dots, M$, na forma

$$\Psi_{yr}^H(x, \Omega_i) = \Phi_{yr}(\nu_r, \Omega_i)e^{-x/\nu_r}, \quad (3.1)$$

com $r = 1, \dots, R$, em que ν_r é a constante de separação da região r , associada à autofunção $\Phi_{yr}(\nu_r, \Omega_i)$. Ao substituir a equação (3.1) nas versões homogêneas das equações (2.8) e (2.9), obtém-se

$$\begin{aligned} -\frac{\mu_i}{\nu_r}\Phi_{yr}(\nu_r, \Omega_i) + \sigma_t^r\Phi_{yr}(\nu_r, \Omega_i) &= \frac{\sigma_{s0}^r}{4}\sum_{k=1}^{M/2}\omega_k[\Phi_{yr}(\nu_r, \Omega_k) + \Phi_{yr}(\nu_r, \Omega_{k+M/2})] + \\ &\frac{3\sigma_{s1}^r}{4}\left[\mu_i\sum_{k=1}^{M/2}\mu_k\omega_k[\Phi_{yr}(\nu_r, \Omega_k) - \Phi_{yr}(\nu_r, \Omega_{k+M/2})] + \right. \\ &\left. \eta_i\sum_{k=1}^{M/2}\eta_k\omega_k[\Phi_{yr}(\nu_r, \Omega_k) + \Phi_{yr}(\nu_r, \Omega_{k+M/2})] \right] \quad (3.2) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\mu_i}{\nu_r} \Phi_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) + \sigma_t^r \Phi_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) &= \frac{\sigma_{s0}^r}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Phi_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_k) + \Phi_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_{k+M/2})] + \\ &\frac{3\sigma_{s1}^r}{4} \left[-\mu_i \sum_{k=1}^{M/2} \mu_k \omega_k [\Phi_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_k) - \Phi_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_{k+M/2})] + \right. \\ &\left. \eta_{i+M/2} \sum_{k=1}^{M/2} \eta_k \omega_k [\Phi_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_k) + \Phi_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_{k+M/2})] \right], \quad (3.3) \end{aligned}$$

para $i = 1, \dots, M/2$. Baseado nas equações (3.2) e (3.3), verifica-se que a solução do problema homogêneo passa a depender basicamente da solução de um problema de autovalores. Assim, considerando as definições

$$U_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_i) = \Phi_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_i) + \Phi_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) \quad (3.4)$$

e

$$V_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_i) = \Phi_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_i) - \Phi_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) \quad (3.5)$$

e adicionando as equações (3.2) e (3.3), considerando de acordo com o esquema de quadratura utilizado $\eta_i = \eta_{i+M/2}$, obtém-se, para $i = 1, \dots, M/2$,

$$-\frac{\mu_i}{\nu_r} V_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_i) + \sigma_t^r U_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_i) = \frac{\sigma_{s0}^r}{2} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k U_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_k) + \frac{3\sigma_{s1}^r}{2} \eta_i \sum_{k=1}^{M/2} \eta_k \omega_k U_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_k). \quad (3.6)$$

Por outro lado, subtraindo as equações (3.2) e (3.3), lembrando as definições (3.4) e (3.5),

$$-\frac{\mu_i}{\nu_r} U_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_i) + \sigma_t^r V_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_i) = \frac{3\sigma_{s1}^r}{2} \mu_i \sum_{k=1}^{M/2} \mu_k \omega_k V_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_k). \quad (3.7)$$

As equações (3.6) e (3.7) relacionam U_{yr} e V_{yr} . Finalmente, ao substituir a equação (3.7) em (3.6) deriva-se o seguinte problema de autovalores

$$[\mathbf{A}_{yr} \mathbf{B}_{yr}] \mathbf{U}_{yr} = \lambda_{yr} \mathbf{U}_{yr}, \quad (3.8)$$

com

$$\lambda_{yr} = \frac{1}{\nu_r^2}, \quad (3.9)$$

em que \mathbf{A}_{yr} e \mathbf{B}_{yr} são matrizes de ordem $M/2 \times M/2$, definidas como

$$\mathbf{A}_{yr}(i, j) = \begin{cases} \frac{3\sigma_{s1}^r}{2} \mu_j \omega_j - \frac{\sigma_t^r}{\mu_i}, & \text{se } i = j, \\ \frac{3\sigma_{s1}^r}{2} \mu_j \omega_j, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (3.10)$$

e os elementos da matriz \mathbf{B}_{yr} são expressos por

$$\mathbf{B}_{yr}(i, j) = \begin{cases} \frac{\sigma_{s0}^r}{2\mu_i}\omega_j + \frac{3\sigma_{s1}^r}{2\mu_i}\eta_i\eta_j\omega_j - \frac{\sigma_i^r}{\mu_i}, & \text{se } i = j, \\ \frac{\sigma_{s0}^r}{2\mu_i}\omega_j + \frac{3\sigma_{s1}^r}{2\mu_i}\eta_i\eta_j\omega_j, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (3.11)$$

para $i = 1, \dots, M/2$, $j = 1, \dots, M/2$ e $r = 1, \dots, R$.

Com isso, observa-se que, a partir de um problema que envolvia M equações, chega-se a um problema de autovalores de dimensão $M/2 \times M/2$. Isso ocorre devido à escolha do ordenamento das direções feita no capítulo 2, que contribui para a construção de um problema de autovalores menor, fornecendo as constantes de separação aos pares $(\pm\nu)$. Essa técnica passa a ser mais relevante quando se tem uma grande quantidade de direções.

Da solução do problema de autovalores, equação (3.8), obtém-se λ_{jr}, U_{jr} para $j = 1, \dots, M/2$ e, assim, as constantes de separação a partir da equação (3.9). Posteriormente, a partir da equação (3.7), determina-se V e usam-se as equações (3.4) e (3.5) para definir as autofunções do problema homogêneo

$$\Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) = \frac{U_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) + V_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i)}{2} \quad (3.12)$$

e

$$\Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \frac{U_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) - V_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i)}{2} \quad (3.13)$$

e, assim, estabelecer a solução para o problema homogêneo. Baseado no que foi desenvolvido e levando-se em consideração que as constantes de separação ocorrem aos pares, a solução homogênea na região r pode ser escrita do seguinte modo

$$\Psi_{yr}^H(x, \mathbf{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^{M/2} \left[A_{j,r} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(x-a_{m-1})/\nu_{jr}} + A_{j+M/2,r} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(a_m-x)/\nu_{jr}} \right], \quad (3.14)$$

$$\Psi_{yr}^H(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} \left[A_{j,r} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(x-a_{m-1})/\nu_{jr}} + A_{j+M/2,r} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(a_m-x)/\nu_{jr}} \right], \quad (3.15)$$

para $i = 1, \dots, M/2$, $x \in [a_{m-1}, a_m]$, $A_{j,r}$ e $A_{j+M/2,r}$ representam os coeficientes da solução relativos a região r .

Processo análogo é utilizado para o desenvolvimento da solução na direção y e, assim, escreve-se a solução na forma

$$\Psi_{xr}^H(y, \mathbf{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^{M/2} \left[B_{j,r} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(y-b_{m-1})/\gamma_{jr}} + B_{j+M/2,r} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(b_m-y)/\gamma_{jr}} \right], \quad (3.16)$$

$$\Psi_{xr}^H(y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} \left[B_{j,r} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(y-b_{m-1})/\gamma_{jr}} + B_{j+M/2,r} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(b_m-y)/\gamma_{jr}} \right], \quad (3.17)$$

para $i = 1, \dots, M/2$, $y \in [b_{m-1}, b_m]$. Aqui $B_{j,r}$ e $B_{j+M/2,r}$ representam os coeficientes da solução relativos à região r e às constantes de separação γ_{jr} que são obtidas da solução do seguinte problema de autovalor, similar à equação (3.8),

$$[\mathbf{A}_{xr} \mathbf{B}_{xr}] \mathbf{U}_{xr} = \lambda_{xr} \mathbf{U}_{xr}, \quad (3.18)$$

com $\lambda_{xr} = 1/\gamma_r^2$. As matrizes \mathbf{A}_{xr} e \mathbf{B}_{xr} de ordem $M/2 \times M/2$, são definidas como

$$\mathbf{A}_{xr}(i, j) = \begin{cases} \frac{3\sigma_{s1}^r}{2} \eta_j \omega_j - \frac{\sigma_t^r}{\eta_i}, & \text{se } i = j, \\ \frac{3\sigma_{s1}^r}{2} \eta_j \omega_j, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (3.19)$$

e os elementos da matriz \mathbf{B}_{xr}

$$\mathbf{B}_{xr}(i, j) = \begin{cases} \frac{\sigma_{s0}^r}{2\eta_i} \omega_j + \frac{3\sigma_{s1}^r}{2\eta_i} \mu_i \mu_j \omega_j - \frac{\sigma_t^r}{\eta_i}, & \text{se } i = j, \\ \frac{\sigma_{s0}^r}{2\eta_i} \omega_j + \frac{3\sigma_{s1}^r}{2\eta_i} \mu_i \mu_j \omega_j, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (3.20)$$

para $i = 1, \dots, M/2$, $j = 1, \dots, M/2$ e $r = 1, \dots, R$.

Novamente, verifica-se que, a partir de um conjunto de M direções, os problemas de autovalores associados são de ordem $M/2$, a qual representa uma importante redução em comparação com outras aproximações nodais, que também utilizam ordenadas discretas.

Resolvidos os problemas de autovalores e obtidas as expressões para as soluções homogêneas na região r , o próximo passo será obter as soluções particulares. Além da fonte externa de nêutrons, as soluções particulares dos problemas nodais possuem os termos relacionados às fronteiras da região r , que não são conhecidos em todas as direções discretas, sendo, portanto, necessárias equações auxiliares.

3.2 Solução particular e geral

Com o objetivo de validar o método proposto, procurou-se resolver determinados problemas que apresentam algumas características em comum como, por exemplo, a presença de fonte fixa, constante e isotrópica. Devido a isso, uma solução particular deve ser definida. Para a construção da solução particular, duas abordagens distintas têm sido utilizadas: a primeira, na qual se faz uso das funções de Green, pode ser usada quando os termos não homogêneos são mais gerais e, a segunda diz respeito a propostas simplificadas, usadas quando o termo de fonte é definido com uma função constante.

Considera-se a presença de uma fonte unitária isotrópica de nêutrons na região 1, de forma que o termo fonte é representado por

$$Q(x, y) = \begin{cases} 1, & \text{para } x \in [0, a_1] \text{ e } y \in [0, b_1] \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (3.21)$$

e considerando as equações (2.7) e (2.12), tem-se, respectivamente, que

$$Q_{yr}(x) = Q_{xr}(y) = \begin{cases} 1, & \text{para } r = 1 \\ 0, & \text{para as demais regiões.} \end{cases} \quad (3.22)$$

Além disso, de acordo com as equações (2.8), (2.9), (2.13) e (2.14), o termo fonte depende dos valores dos fluxos angulares dos contornos, os quais em algumas direções, são conhecidos pelas condições de contorno do problema. Como usual em esquemas nodais, equações auxiliares são introduzidas. Os fluxos desconhecidos foram, neste caso, aproximados por constantes dependentes da direção como

$$\Psi_r(x, b_m, \Omega_i) = C_{m,r,i}, \quad (3.23)$$

$$\Psi_r(x, b_{m-1}, \Omega_i) = C_{m-1,r,i}, \quad (3.24)$$

$$\Psi_r(a_m, y, \Omega_i) = D_{m,r,i} \quad (3.25)$$

e

$$\Psi_r(a_{m-1}, y, \Omega_i) = D_{m-1,r,i}, \quad (3.26)$$

para $i = 1, \dots, M$ e $r = 1, \dots, R$.

Nesse contexto, considerando as equações (3.23)-(3.26), o termo fonte passa a ser considerado

$$Q_{yr}(x, \Omega_i) = \begin{cases} 1 - \frac{\eta_i}{b_m - b_{m-1}} [C_{m,r,i} - C_{m-1,r,i}], & \text{para } r = 1 \\ -\frac{\eta_i}{b_m - b_{m-1}} [C_{m,r,i} - C_{m-1,r,i}], & \text{para as demais regiões.} \end{cases} \quad (3.27)$$

e

$$Q_{xr}(y, \mathbf{\Omega}_i) = \begin{cases} 1 - \frac{\mu_i}{a_m - a_{m-1}} [D_{m,r,i} - D_{m-1,r,i}], & \text{para } r = 1 \\ -\frac{\mu_i}{a_m - a_{m-1}} [D_{m,r,i} - D_{m-1,r,i}], & \text{para as demais regiões.} \end{cases} \quad (3.28)$$

em que $i = 1, \dots, M$, $r = 1, \dots, R$. A partir do uso de aproximações constantes, juntamente com equação (3.22), a forma final do termo não-homogêneo também será constante. Assim, para $i = 1, \dots, M$, propõe-se

$$\Psi_{yr}^P(x, \mathbf{\Omega}_i) = K_{i,r} \quad (3.29)$$

e

$$\Psi_{xr}^P(y, \mathbf{\Omega}_i) = W_{i,r}, \quad (3.30)$$

com $r = 1, \dots, R$ indicando a região analisada. Substituindo as equações (3.29) e (3.30) nas equações (2.8)-(2.9) e (2.13)-(2.14), obtém-se que $K_{i,r}$ e $W_{i,r}$ devem satisfazer, respectivamente, os seguintes sistemas lineares $M \times M$,

$$\sigma_t^r K_{i,r} - \frac{\sigma_{s0}^r}{4} \sum_{k=1}^M \omega_k K_{k,r} - \frac{3\sigma_{s1}^r}{4} \left[\mu_i \sum_{k=1}^M \mu_k \omega_k K_{k,r} + \eta_i \sum_{k=1}^M \eta_k \omega_k K_{k,r} \right] = Q_{yr}(x, \mathbf{\Omega}_i) \quad (3.31)$$

e

$$\sigma_t^r W_{i,r} - \frac{\sigma_{s0}^r}{4} \sum_{k=1}^M \omega_k W_{k,r} - \frac{3\sigma_{s1}^r}{4} \left[\mu_i \sum_{k=1}^M \mu_k \omega_k W_{k,r} + \eta_i \sum_{k=1}^M \eta_k \omega_k W_{k,r} \right] = Q_{xr}(y, \mathbf{\Omega}_i), \quad (3.32)$$

para $i = 1, \dots, M$, $y \in [b_{m-1}, b_m]$ e $x \in [a_{m-1}, a_m]$. As soluções particulares, juntamente com os coeficientes relacionados a parte homogênea, serão determinados em sistema linear que será detalhado na sequência.

Estabelecidas as expressões que representam as soluções homogêneas e particulares para as equações unidimensionais integradas transversalmente, a saber, as equações (2.8)-(2.9) e (2.13)-(2.14), a solução geral para o fluxo angular integrado na região r e direção x pode então ser escrita para $i = 1, \dots, M/2$ e $r = 1, \dots, R$, como

$$\Psi_{yr}(x, \mathbf{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^{M/2} [A_{j,r} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(x-a_{m-1})/\nu_{jr}} \quad (3.33)$$

$$+ A_{j+M/2,r} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(a_m-x)/\nu_{jr}}] + K_{i,r}, \quad (3.34)$$

$$\Psi_{yr}(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} [A_{j,r} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(x-a_{m-1})/\nu_{jr}} \quad (3.35)$$

$$+ A_{j+M/2,r} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(a_m-x)/\nu_{jr}}] + K_{i+M/2,r} \quad (3.36)$$

para $x \in [a_{m-1}, a_m]$ e

$$\Psi_{xr}(y, \Omega_i) = \sum_{j=1}^{M/2} [B_{j,r} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \Omega_i) e^{-(y-b_{m-1})/\gamma_{jr}} \quad (3.37)$$

$$+ B_{j+M/2,r} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \Omega_{i+M/2}) e^{-(b_m-y)/\gamma_{jr}}] + W_{i,r}, \quad (3.38)$$

$$\Psi_{xr}(y, \Omega_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} [B_{j,r} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \Omega_{i+M/2}) e^{-(y-b_{m-1})/\gamma_{jr}} \quad (3.39)$$

$$+ B_{j+M/2,r} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \Omega_i) e^{-(b_m-y)/\gamma_{jr}}] + W_{i+M/2,r} \quad (3.40)$$

para $y \in [b_{m-1}, b_m]$.

As expressões (3.33)-(3.39) envolvem, em cada região, $4M$ coeficientes arbitrários para expressar os fluxos angulares integrados nas direções x e y : $2M$ oriundos das soluções homogêneas; e $2M$ relacionados às soluções particulares. Para resolver totalmente o problema, os $4RM$ coeficientes, com R representando o número de regiões, necessitam ser determinados. As incógnitas das equações (3.33)-(3.39) serão determinados a partir de um sistema linear formado pelas expressões para as soluções particulares (3.31)-(3.32), pela condição de continuidade nas interfaces e pelas versões integradas das condições de contorno do problema considerado e das equações auxiliares. Assim, as equações auxiliares (3.23)-(3.26), integradas para todo $y \in [b_{m-1}, b_m]$ ou para $x \in [a_{m-1}, a_m]$, são escritas na forma

$$\Psi_{xr}(b_m, \Omega_i) = C_{m,r,i}, \quad (3.41)$$

$$\Psi_{xr}(b_{m-1}, \Omega_i) = C_{m-1,r,i}, \quad (3.42)$$

$$\Psi_{yr}(a_m, \Omega_i) = D_{m,r,i} \quad (3.43)$$

e

$$\Psi_{yr}(a_{m-1}, \Omega_i) = D_{m-1,r,i}, \quad (3.44)$$

onde o lado esquerdo das equações (3.41)-(3.44) é escrito em termos da solução geral.

Escritas as constantes utilizadas para representar os fluxos desconhecidos nos contornos em termos da solução geral do problema, realiza-se, então, a substituição nas equações (3.31) e (3.32). É nessa etapa do processo que ocorre o acoplamento dos problemas integrados nas variáveis x e y e, por esse motivo, é necessária atenção na associação das direções Ω_i entre os dois problemas.

As expressões para os fluxos angulares médios nas R regiões, em que o domínio foi subdividido, explícitas em termos das variáveis espaciais, ficam assim determinadas podendo ser usadas para avaliação de quantidades de interesse relativas ao fluxo de nêutrons em meio bidimensional, como discutido, através de casos teste, na próxima seção.

3.3 Resultados Numéricos

Nesta seção, apresentam-se os resultados obtidos na resolução de alguns problemas clássicos de transporte de nêutrons em geometria bidimensional, com espalhamento isotrópico e anisotrópico, em meio homogêneo e heterogêneo, cuja formulação, baseada no método ADO, foi desenvolvida neste capítulo. Todos os resultados foram obtidos através de programas implementados na linguagem FORTRAN, em um computador Intel Core I7, 2.4GHz, 6Gb(RAM), que apresenta desempenho de $412m\text{flop/s}$. As rotinas foram desenvolvidas com o auxílio de subrotinas do pacote LAPACK (Anderson et al., 1999), a saber: DGEEV para solução dos problemas de autovalores; DGETRF e DGETRS para a solução dos sistemas lineares. Além disso, o programa computacional foi desenvolvido utilizando precisão dupla e de forma que a escolha do número de divisões do domínio é arbitrária. Observa-se, no entanto, que a escolha do número de regiões e ordem de quadratura estão, neste trabalho, limitadas a uma certa ordem do sistema linear. Técnicas alternativas para a solução de sistemas lineares de grande porte (da Cunha et al., 2015) não foram aqui objeto de estudo. As compilações ocorreram de forma não otimizada.

Conforme mencionado no capítulo 2, o domínio bidimensional foi subdividido em $r = 1, \dots, R$ regiões retangulares, definidas como $x \in [a_{m-1}, a_m]$ e $y \in [b_{m-1}, b_m]$, com $0 \leq a_{m-1} < a_m \leq a$, $0 \leq b_{m-1} < b_m \leq b$ e m indicando o número de divisões em cada uma das variáveis espaciais.

As quantidades de interesse analisadas são o fluxo escalar médio na região r que, de acordo com a formulação aqui desenvolvida, é avaliado como

$$\overline{\phi}_r = \frac{1}{4(a_m - a_{m-1})} \int_{a_{m-1}}^{a_m} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_{yr}(x, \Omega_k) + \Psi_{yr}(x, \Omega_{k+M/2})] dx \quad (3.45)$$

ou

$$\overline{\phi}_r = \frac{1}{4(b_m - b_{m-1})} \int_{b_{m-1}}^{b_m} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_{xr}(y, \Omega_k) + \Psi_{xr}(y, \Omega_{k+M/2})] dy, \quad (3.46)$$

e a taxa de absorção

$$\overline{R}_r = \int_{a_{m-1}}^{a_m} \sigma_a^r \phi_y(x) dx \quad (3.47)$$

ou

$$\overline{R}_r = \int_{b_{m-1}}^{b_m} \sigma_a^r \phi_x(y) dy, \quad (3.48)$$

onde σ_a^r é a seção de choque de absorção da região r .

Em todos os casos testes considerados, os resultados obtidos pelas equações (3.45) e (3.46) são coincidentes. Comportamento análogo ocorreu com os resultados das equações (3.47) e (3.48). A fim de validar a metodologia proposta, alguns problemas testes foram considerados, sendo estes apresentados e discutidos na sequência.

3.3.1 Meio homogêneo isotrópico

Proposto por Barros e Larsen (1991), o primeiro caso teste consiste em uma placa homogênea quadrada de tamanho $a = b = 20.0 \text{ cm}$, com uma fonte isotrópica fixa $Q(x, y) = 1.0$, na região $[0, 1] \times [0, 1]$, e com espalhamento isotrópico, conforme representação na Figura 3.1. A seção de choque macroscópica total é $\sigma_t = 1.0 \text{ cm}^{-1}$ e a seção de choque de espalhamento 0.99 cm^{-1} .

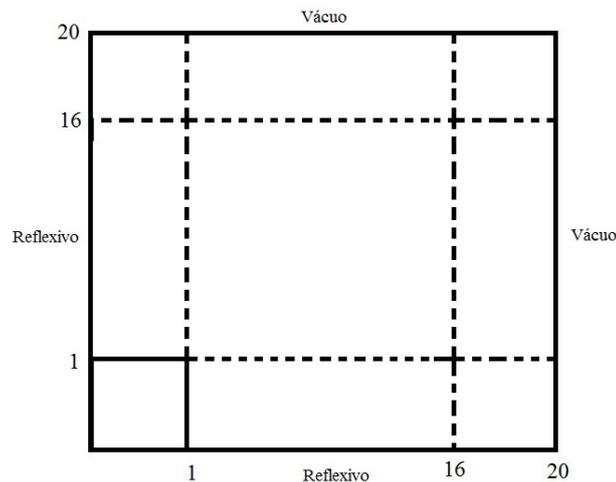


Figura 3.1: Representação do domínio para o primeiro problema

A quantidade de interesse a ser analisada é a taxa de absorção na região $[16, 20] \times [16, 20]$, que foi determinada através da equação (3.47) ou (3.48). Os resultados obtidos são apresentados na tabela 3.1. Nessa tabela, apresentam-se diversas divisões do domínio em sub-regiões da forma $g_1 \times g_2 \times g_3$, em que g_k indica o número de nodos considerados na k -ésima seção para a coordenada x e y da estrutura representada na Figura 3.1, para $k = 1, 2, 3$.

Os resultados obtidos apresentam boa concordância com os da literatura. Comparando-se o mesmo número de subdivisões do domínio, por exemplo $1 \times 3 \times 1$, o erro relativo é de aproximadamente 1.6%, com o método $SGF - CN$, o qual utiliza o mesmo tipo de aproximação para os termos de fuga transversal que a considerada neste capítulo, no método ADO. Dito de outro modo, aproxima os termos de fuga transversal por constantes. Esse erro passa a ser, aproximadamente, 4% em comparação com o método $SGF - ExpN$, que utiliza aproximações de tipo exponencial para os termos de fuga transversal. Cabe destacar que os resultados obtidos

Tabela 3.1: Taxa de absorção para $\sigma_s = 0.99 \text{ cm}^{-1}$ e $N = 4$

Neste trabalho		Barros e Larsen (1991)		
Divisões do domínio	Taxa de absorção	Malha espacial	SGF-CN	SGF-ExpN
$1 \times 3 \times 1$	0.8724×10^{-3}	$1 \times 3 \times 1$	0.85814×10^{-3}	0.83512×10^{-3}
$1 \times 7 \times 2$	0.7151×10^{-3}	$1 \times 7 \times 2$	0.71735×10^{-3}	0.71319×10^{-3}
$1 \times 10 \times 2$	0.6999×10^{-3}	$1 \times 15 \times 4$	0.69690×10^{-3}	0.69537×10^{-3}
$1 \times 11 \times 2$	0.6973×10^{-3}	$2 \times 30 \times 8$	0.69225×10^{-3}	0.69169×10^{-3}
$1 \times 12 \times 2$	0.6953×10^{-3}	$4 \times 60 \times 16$	0.69102×10^{-3}	

pelo método ADO apresentam baixo custo computacional, visto que os mesmos foram gerados com tempo computacional menor que 46 segundos. Verifica-se, também, que para obter dois dígitos significativos, mesmo número de dígitos que os resultados da literatura apresentam, uma quantidade menor de subdivisões no domínio foram necessárias. Neste trabalho, o estudo desse caso homogêneo foi apresentado por ser o primeiro problema em que foi considerada a subdivisão do domínio em regiões.

3.3.2 Meio heterogêneo isotrópico

Apresentado por Azmy (1988a), o segundo problema teste considerado consiste em um domínio heterogêneo com espalhamento isotrópico definido em uma região quadrada $a = b = 10.0 \text{ cm}$, com a presença de uma fonte $Q(x, y) = 1.0$, na região $[0, 5.0] \times [0, 5.0]$, conforme representa a Figura 3.2. Na região 1, a seção de choque total será $\sigma_t^1 = 1.0 \text{ cm}^{-1}$ e a seção de choque de espalhamento $\sigma_s^1 = 0.5 \text{ cm}^{-1}$. Nas demais regiões, considerou-se a seção de choque total $\sigma_t^2 = 2.0 \text{ cm}^{-1}$ e a seção de choque de espalhamento $\sigma_s^2 = 0.1 \text{ cm}^{-1}$.

A quantidade de interesse considerada é o fluxo escalar médio na região que foi determinado através de (3.45) ou (3.46). Os resultados obtidos para as regiões 1, 2 e 4 são apresentados na tabela 3.2 e, os disponíveis na literatura para diferentes malhas espaciais e $N = 4$, nas tabelas 3.2 e 3.3. Os resultados para os fluxos médios na região 3 não são apresentados, pois, devido a simetria do problema, são iguais aos fluxos médios na região 2.

A análise dos resultados permitiu verificar que considerando a mesma ordem do esquema de quadratura mencionado em (Azmy, 1988a,c; Mello e Barros, 2002), $N = 4$, o erro relativo entre os fluxos escalares médios que, para o domínio dividido em quatro nodos, é menor que 0.8% nas regiões 1 e 2, reduziu para menor do que 0.3% nas mesmas regiões, e para a região 4, o erro relativo que era menor que 2% passou para aproximadamente 0.6%. A divisão do domínio em 16 regiões (4×4) ocorreu da forma $3 + 1 \times 3 + 1$, ou seja, $g_1 + g_2 \times g_1 + g_2$ em

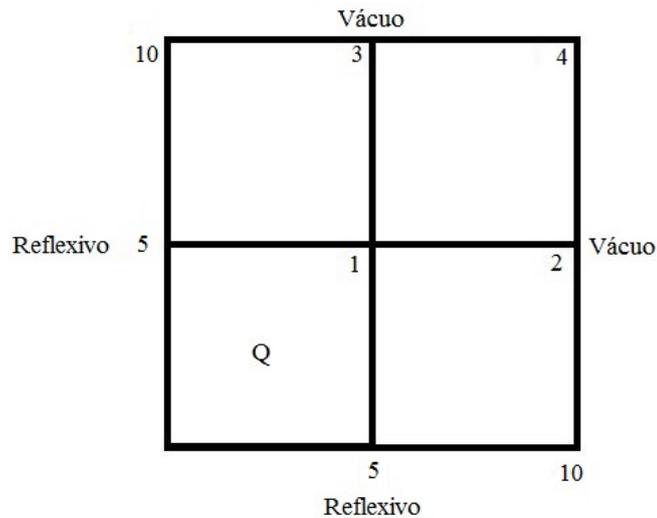


Figura 3.2: Representação do domínio para o segundo problema

que g_k indica o número de nodos considerados na k -ésima seção da estrutura representada na Figura 3.2, para $k = 1, 2$. Percebeu-se que dividindo a região da fonte em um número maior de nodos, ocorre a representação de forma mais significativa da influência dessa região no domínio do problema. Para a divisão do domínio em quatro nodos (2×2), que já obteve resultados satisfatórios, o tempo computacional é de 0.01 segundos, enquanto que para 4×4 , é de 0.09 segundos, para o mesmo número de pontos de quadratura considerado na literatura, $N = 4$. Além disso, com o aumento dos pontos de quadratura, verifica-se que os resultados obtidos pelo método ADO apresentam concordância de 2 a 3 dígitos significativos. O método ADO, utilizando aproximações constantes para os fluxos desconhecidos nos contornos, gerou resultados satisfatórios e apresentou uma importante redução na quantidade de nodos necessários para a determinação dos fluxos médios nas regiões, quando comparado com os métodos nodais clássicos baseados em distintas representações para os fluxos desconhecidos.

Tabela 3.2: Fluxo escalar médio - Problema 2

Região	N	Neste trabalho		Método LN (Azmy, 1988a)			Método WDD ordem zero (Azmy, 1988c)		
		2 × 2	4 × 4	10 × 10	20 × 20	40 × 40	32 × 32	64 × 64	128 × 128
1	2	1.655	1.654						
	4	1.678	1.677	1.676	1.676	1.676	1.675	1.676	1.676
	6	1.682	1.681						
	8	1.684	1.683						
	12	1.685	1.684						
	16	1.686	1.685						
2	2	0.4389×10^{-1}	0.4415×10^{-1}						
	4	0.4128×10^{-1}	0.4147×10^{-1}	0.4170×10^{-1}	0.4160×10^{-1}	0.4159×10^{-1}	0.4180×10^{-1}	0.4165×10^{-1}	0.4160×10^{-1}
	6	0.4085×10^{-1}	0.4102×10^{-1}						
	8	0.4064×10^{-1}	0.4081×10^{-1}						
	12	0.4049×10^{-1}	0.4066×10^{-1}						
	16	0.4042×10^{-1}	0.4059×10^{-1}						
4	2	0.2745×10^{-2}	0.2674×10^{-2}						
	4	0.2031×10^{-2}	0.1980×10^{-2}	0.1986×10^{-2}	0.1990×10^{-2}	0.1992×10^{-2}	0.2010×10^{-2}	0.1996×10^{-2}	0.1993×10^{-2}
	6	0.1926×10^{-2}	0.1877×10^{-2}						
	8	0.1879×10^{-2}	0.1831×10^{-2}						
	12	0.1844×10^{-2}	0.1797×10^{-2}						
	16	0.1829×10^{-2}	0.1783×10^{-2}						

Tabela 3.3: Resultados disponíveis na literatura - Problema 2

Região	N	Método SGF-CN (Mello e Barros, 2002)			Método SGF-ExpN (Mello e Barros, 2002)		
		10 × 10	20 × 20	40 × 40	10 × 10	20 × 20	40 × 40
1	2						
	4	1.676	1.676	1.676	1.676	1.676	1.676
	6						
	8						
	12						
	16						
2	2						
	4	0.4290×10^{-1}	0.4165×10^{-1}	0.4163×10^{-1}	0.4169×10^{-1}	0.4161×10^{-1}	0.4161×10^{-1}
	6						
	8						
	12						
	16						
4	2						
	4	0.2850×10^{-2}	0.2019×10^{-2}	0.2000×10^{-2}	0.2000×10^{-2}	0.1995×10^{-2}	0.1993×10^{-2}
	6						
	8						
	12						
	16						

Com o intuito de verificar o comportamento do método ADO em dimensões maiores, considerou-se como terceiro problema teste um problema heterogêneo, com espalhamento isotrópico e domínio de configuração semelhante ao problema anterior. Nesse caso, a região quadrada passou a ser $a = b = 30.0 \text{ cm}$, com a fonte externa $Q(x, y) = 1.0$, na região $[0, 10.0] \times [0, 10.0]$, conforme mostra a Figura 3.3. Todos os demais parâmetros e números de regiões foram mantidos iguais ao problema anterior ($\sigma_t^1 = 1.0 \text{ cm}^{-1}$, $\sigma_s^1 = 0.5 \text{ cm}^{-1}$, $\sigma_t^2 = 2.0 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_s^2 = 0.1 \text{ cm}^{-1}$).

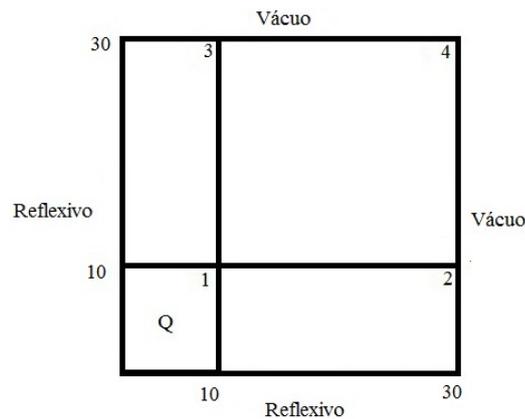


Figura 3.3: Representação do domínio para o terceiro problema

Assim como no problema anterior, a quantidade de interesse determinada é o fluxo escalar médio obtido através de (3.45) ou (3.46), cujos resultados estão expressos na tabela 3.4.

Tabela 3.4: Fluxo escalar médio - Problema 3

Região	N	Neste trabalho			Azmy (2014)		
		2×2	6×6	15×15	15×15	30×30	60×60
1	2	1.819	1.819	1.819	1.829	1.831	1.831
	4	1.832	1.832	1.832			
	6	1.835	1.834				
	8	1.836	1.835				
	12	1.836					
	16	1.837					
2	2	0.117×10^{-1}	0.117×10^{-1}	0.117×10^{-1}	0.110×10^{-1}	0.109×10^{-1}	0.109×10^{-1}
	4	0.109×10^{-1}	0.109×10^{-1}	0.109×10^{-1}			
	6	0.107×10^{-1}	0.108×10^{-1}				
	8	0.107×10^{-1}	0.107×10^{-1}				
	12	0.106×10^{-1}					
	16	0.106×10^{-1}					
4	2	0.180×10^{-3}	0.181×10^{-3}	0.177×10^{-3}	0.126×10^{-3}	0.124×10^{-3}	0.124×10^{-3}
	4	0.134×10^{-3}	0.134×10^{-3}	0.131×10^{-3}			
	6	0.127×10^{-3}	0.127×10^{-3}				
	8	0.124×10^{-3}	0.124×10^{-3}				
	12	0.121×10^{-3}					
	16	0.120×10^{-3}					

Verifica-se que um número maior de nodos representou, de forma mais adequada, o fluxo escalar médio na região 4, uma vez que para a mesma ordem do esquema de quadratura considerado em Azmy (2014) $N = 4$, o erro relativo reduziu de 8% para aproximadamente 5,5%. No entanto, nas demais regiões, o erro relativo se manteve o mesmo, ou seja, inferior a 0,05%. Vale ressaltar que os fluxos desconhecidos nos contornos, no método ADO, foram aproximados por constantes, enquanto que, neste caso, o código AHOT (Azmy, 2014) utilizou aproximações lineares. O método ADO mostrou-se eficiente computacionalmente, necessitando de uma malha 2×2 para reproduzir os resultados de modo satisfatório. Considerando a mesma ordem do esquema de quadratura, enquanto o tempo computacional de execução do código AHOT (Azmy, 2014) foi 0.43 segundo, para malha 30×30 , o programa baseado no método ADO necessitou de 0.01 segundo, o que representa uma significativa redução no tempo computacional de aproximadamente 97%. Em problemas em que as dimensões do domínio sejam maiores, essa redução representará ganho computacional mais notório.

Com relação aos resultados obtidos pelo método ADO, observa-se comportamento semelhante ao ocorrido no caso anterior, pois com o aumento dos pontos de quadratura considerados, verifica-se que os resultados apresentam concordância de 2 a 3 dígitos significativos.

Proposto por Azmy (1988b), o quarto problema considerado consiste em um domínio heterogêneo definido em $a = b = 100.0\text{cm}$, com uma fonte fixa $Q(x, y) = 1.0$, na região $[0, 40] \times [0, 40]$ e com espalhamento isotrópico. Determinaram-se os fluxos escalares médios nas regiões, obtidos através de (3.45) ou (3.46), esboçadas na Figura 3.4. Os parâmetros nucleares da região 1 são $\sigma_t = 1\text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0.5\text{ cm}^{-1}$; da região 2 são $\sigma_t = 0.1\text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0.01\text{ cm}^{-1}$; da região 3 são $\sigma_t = 0.3\text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0.1\text{ cm}^{-1}$; e, finalmente, da região 4 são $\sigma_t = 0.1\text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0.01\text{ cm}^{-1}$. Os resultados estão representados na tabela 3.5.

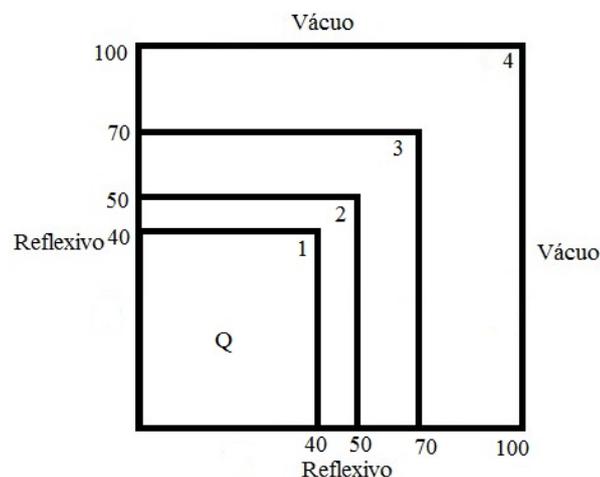


Figura 3.4: Representação do domínio para o quarto problema

Tabela 3.5: Fluxo escalar médio - Problema 4

Região	N	Neste trabalho		Método LL (Azmy, 1988b)			
		4×4	8×8	10×10	20×20	40×40	80×80
1	2	1.954	1.954				
	4	1.957	1.957	1.953	1.955	1.957	1.957
	6	1.958	1.958				
	8	1.958	1.958				
	12	1.958					
	16	1.958					
2	2	0.374	0.374				
	4	0.333	0.333	0.3651	0.3504	0.3388	0.3339
	6	0.325	0.325				
	8	0.322	0.321				
	12	0.320					
	16	0.319					
3	2	0.137×10^{-1}	0.138×10^{-1}				
	4	0.148×10^{-1}	0.149×10^{-1}	0.1623×10^{-1}	0.1556×10^{-1}	0.1516×10^{-1}	0.1504×10^{-1}
	6	0.152×10^{-1}	0.154×10^{-1}				
	8	0.154×10^{-1}	0.155×10^{-1}				
	12	0.155×10^{-1}					
	16	0.155×10^{-1}					
4	2		0.259×10^{-4}				
	4	0.243×10^{-4}	0.266×10^{-4}	0.2376×10^{-4}	0.2727×10^{-4}	0.2696×10^{-4}	0.2682×10^{-4}
	6	0.238×10^{-4}	0.262×10^{-4}				
	8	0.238×10^{-4}	0.262×10^{-4}				
	12	0.238×10^{-4}					
	16	0.238×10^{-4}					

Os resultados obtidos para esse problema, quando comparados com os publicados na literatura, mostram-se satisfatórios, pois apresentam, em todas as regiões, erro relativo menor do que 1% para o mesmo número de pontos de quadratura. Enquanto que na literatura uma malha de 80×80 foi necessária para representar os resultados, o método ADO necessitou de 8×8 divisões no domínio. Mesmo em um domínio de grande dimensão como o considerado, 100 cm, o método ADO apresentou comportamento coerente e resultados fisicamente coesos. Com relação ao tempo computacional, para 8×8 divisões e $N = 4$, este foi de aproximadamente 2.5 segundos.

Com o aumento dos pontos de quadratura considerados, verificou-se que os resultados obtidos pelo método ADO apresentam concordância de 2 a 4 dígitos significativos.

3.3.3 Meio homogêneo com espalhamento linearmente anisotrópico

Como quinto problema teste, considerou-se um domínio homogêneo com espalhamento linearmente anisotrópico, definido em uma região quadrada $a = b = 1.0$ cm, com a presença de uma fonte $Q(x, y) = 1.0$, na região $[0, 0.5] \times [0, 0.5]$, conforme representado na Figura 3.5. Os

parâmetros físicos foram considerados $\sigma_t = 0.8 \text{ cm}^{-1}$, e as seções de choque de espalhamento são $\sigma_{s0} = 0.4 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_{s1} = 0.2 \text{ cm}^{-1}$.

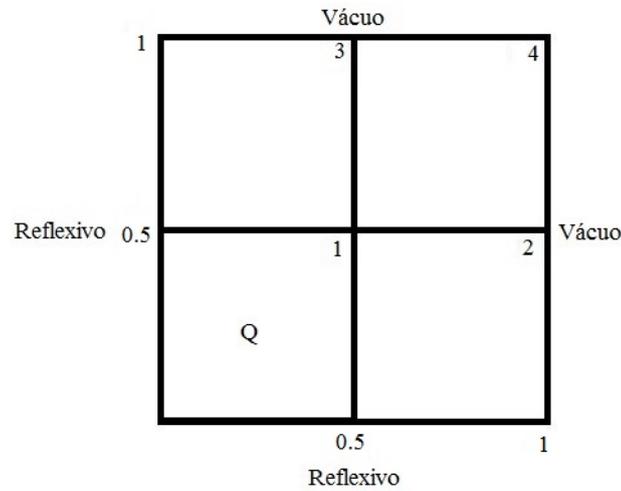


Figura 3.5: Representação do domínio para o quinto problema teste

A quantidade de interesse considerada é o fluxo escalar médio na região que foi determinado através de (3.45) ou de (3.46). Buscando comparar os resultados, um programa baseado em um método numérico clássico de malha fina, método *Diamond Difference* (DD), estável e confiável, foi desenvolvido. Nesse programa, considerou-se o desvio relativo da ordem de 10^{-6} como critério de parada. Os resultados obtidos são apresentados na tabela 3.6.

Tabela 3.6: Fluxo escalar médio - Problema 5

Região	N	Neste trabalho				Método <i>DD</i>				
		2 × 2	4 × 4	6 × 6	8 × 8	2 × 2	4 × 4	10 × 10	50 × 50	100 × 100
1	2	0.496	0.507	0.509	0.509	0.489	0.506	0.509	0.509	0.509
	4	0.557	0.559	0.559	0.559	0.550	0.556	0.559	0.559	0.559
	6	0.565	0.566	0.567	0.567	0.560	0.563	0.566	0.567	0.567
	8	0.570	0.571	0.571	0.571	0.565	0.568	0.571	0.571	0.571
	12	0.573	0.574			0.569	0.571	0.574	0.574	0.574
	16	0.574	0.575			0.570	0.572	0.575	0.575	0.575
2	2	0.212	0.203	0.202	0.201	0.215	0.203	0.201	0.200	0.200
	4	0.225	0.218	0.216	0.215	0.230	0.219	0.215	0.215	0.215
	6	0.225	0.218	0.216	0.216	0.231	0.219	0.216	0.216	0.216
	8	0.225	0.217	0.216	0.216	0.231	0.218	0.216	0.216	0.216
	12	0.224	0.217			0.230	0.217	0.216	0.216	0.216
	16	0.224	0.217			0.229	0.217	0.216	0.216	0.216
4	2	0.189	0.200	0.201	0.202	0.206	0.205	0.203	0.203	0.203
	4	0.153	0.152	0.152	0.152	0.174	0.157	0.153	0.152	0.152
	6	0.139	0.140	0.140	0.139	0.159	0.145	0.140	0.139	0.139
	8	0.134	0.135	0.134	0.134	0.152	0.139	0.134	0.134	0.134
	12	0.130	0.131			0.146	0.134	0.130	0.130	0.130
	16	0.128	0.129			0.143	0.132	0.129	0.128	0.128

A análise da tabela 3.6 permite verificar que os resultados obtidos pelo método ADO concordam com os encontrados pelo método DD. As lacunas presentes nessa tabela ocorrem devido a limitação do tamanho do sistema linear na implementação computacional desenvolvida. Os resultados obtidos pelo método ADO e pelo DD apresentam comportamento semelhante, pois, com o aumento dos pontos de quadratura considerados, os resultados concordam de 2 a 3 dígitos significativos. O método ADO necessitou de um menor número de divisões do domínio para obter a convergência. No entanto, para as divisões em 6×6 e 8×8 regiões e maiores pontos de quadratura, o sistema linear envolvido torna-se de grande porte e podem ser altamente esparsos o que requer o uso de técnicas alternativas para a solução (da Cunha et al., 2015), que não foram investigadas neste trabalho. Além disso, enquanto o tempo computacional de execução do método ADO foi inferior a 2 segundos, para todos os pontos de quadratura, o método DD necessitou em torno de 3 horas de execução para atingir a convergência para pontos de quadratura maiores. Ambos os programas foram executados no mesmo computador.

3.3.4 Meio heterogêneo com espalhamento linearmente anisotrópico

Descrito por Barros e Larsen (1992), o sexto problema considerado consiste em um domínio definido em $a = b = 50 \text{ cm}$, com a presença de uma fonte de nêutrons isotrópica unitária, $Q(x, y) = 1$, na região $[0, 1] \times [0, 1]$ e espalhamento linearmente anisotrópico. Os parâmetros nucleares para a região 1 são $\sigma_t = 0.8 \text{ cm}^{-1}$, $\sigma_{s0} = 0.4 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_{s1} = 0.2 \text{ cm}^{-1}$; já para a região 2 são $\sigma_t = 1.0 \text{ cm}^{-1}$, $\sigma_{s0} = 0.95 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_{s1} = 0.5 \text{ cm}^{-1}$.

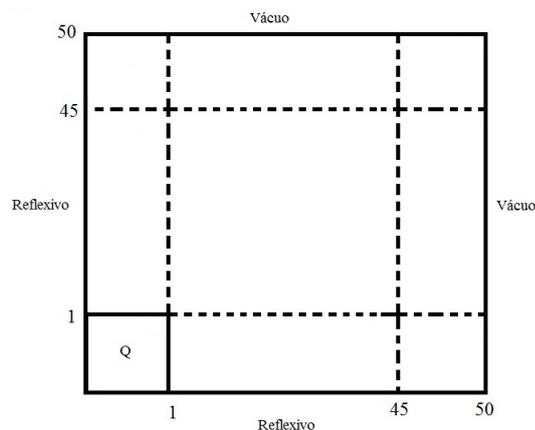


Figura 3.6: Representação do domínio para o sexto problema

Nesse problema, investiga-se a taxa de absorção na região $[45, 50] \times [45, 50]$, que foi determinada através da equação (3.47) ou (3.48). Os resultados obtidos são apresentados na tabela 3.7. Nessa tabela, os resultados obtidos pelo método ADO são apresentados para algumas

divisões do domínio na forma $g_1 \times g_2 \times g_3$ em que g_k indica o número de nodos considerados na k -ésima seção, da estrutura representada na Figura (3.6), para $k = 1, 2, 3$.

Tabela 3.7: Taxa de absorção - Problema 6

N	Neste trabalho			Barros e Larsen (1992)	
	$1 \times 10 \times 1$	$1 \times 12 \times 1$	$1 \times 13 \times 1$	LN + SI (150×150)	SGF + NBI (50×50)
2	0.6002×10^{-8}	0.4421×10^{-8}	0.4002×10^{-8}	0.24661×10^{-8}	0.24895×10^{-8}
4	0.4386×10^{-8}	0.3449×10^{-8}	0.3176×10^{-8}	0.20170×10^{-8}	0.19758×10^{-8}

Nesse caso, um número maior de subdivisões será necessário para representar de forma mais adequada os resultados. Verifica-se que há indicação de que a subdivisão do domínio em número maior de regiões, conforme formulação geral desenvolvida neste trabalho, leva a maior concordância com resultados disponíveis na literatura. No entanto, ao efetuar mais divisões nos domínios, o sistema linear envolvido resulta de grande porte e podem ser altamente esparsos. Dessa forma, técnicas alternativas para a solução do sistema linear devem ser implementadas (da Cunha et al., 2015). Porém, neste trabalho, isso não foi objeto de estudo.

A análise dos resultados obtidos permitiu verificar que a metodologia empregada é viável para resolver problemas em meios homogêneos e heterogêneos. As soluções obtidas são explícitas para as variáveis espaciais. A divisão em sub-regiões, que pode ocorrer de forma diferenciada em cada região do domínio, além de permitir a aplicação da metodologia que combina o método ADO com esquemas nodais em problemas cujo domínio é composto por meios materiais distintos, melhora a qualidade dos resultados, principalmente em problemas definidos em grandes dimensões. Diferentemente de abordagens anteriores, a divisão em sub-regiões, realizada neste trabalho, de regiões compostas pelo mesmo material indica melhora nos resultados. Com relação a aspectos computacionais, verificou-se que os sistemas lineares obtidos são todos bem condicionados. Além disso, o método é versátil, podendo ser aplicado a diferentes classes de problemas. Todavia, a divisão em um número muito grande de regiões pode acarretar em um problema computacional (sistema linear de grande porte) que ainda requer maior investigação científica.

No próximo capítulo, os fluxos desconhecidos nos contornos são aproximados por meio de relações de proporcionalidade com os fluxos médios integrados. Os resultados numéricos serão apresentados para problemas definidos em meios homogêneos, já estudados em Picoloto (2013), e domínios constituídos de materiais distintos.

4 EQUAÇÕES AUXILIARES BASEADAS EM FLUXOS MÉDIOS

No capítulo 2, problemas unidimensionais foram obtidos a partir da equação de transporte bidimensional, permitindo o emprego do método ADO para a sua solução. Diferentemente da proposta utilizada no capítulo anterior, apresenta-se, nesta seção, outro tratamento para os fluxos desconhecidos nos contornos, que surgem da aplicação de esquemas nodais, aproximados por relações com os fluxos médios integrados. O uso desse tipo de aproximação resulta na incorporação das equações auxiliares na parte homogênea do problema e, conseqüentemente, tem uma certa contribuição no problema de autovalores e na obtenção das constantes de separação, conforme será detalhado na continuidade deste estudo.

4.1 Solução homogênea pelo método ADO na região r

Neste capítulo, derivam-se soluções explícitas $\Psi_{yr}(x, \Omega_i)$ para as equações unidimensionais integradas transversalmente na variável y , considerando o espalhamento isotrópico. No entanto, procedimento semelhante pode ser realizado com base nas equações (2.13) e (2.14), para obter as soluções explícitas na forma $\Psi_{xr}(y, \Omega_i)$.

Observando as equações (2.8) e (2.9), verifica-se que, devido ao processo de integração, surgem termos desconhecidos dos contornos do domínio ou das interfaces das regiões. Em algumas direções, esses termos podem ser estimados com base nas condições de contorno do problema. Os demais fluxos desconhecidos serão, aqui, considerados proporcionais ao fluxo angular médio da região (ou seja, equações auxiliares na forma $\Psi_r(x, b_m, \Omega_i) = \hat{k}\Psi_{yr}(x, \Omega_i)$). Com o intuito de simplificar a formulação, nesse ponto, esses parâmetros são representados de forma geral por k_r^* e \tilde{k}_r que, posteriormente, serão definidos. Assim, utilizando equações auxiliares desse tipo nas equações (2.8)-(2.9),

$$\mu_i \frac{d}{dx} \Psi_{yr}(x, \Omega_i) + [\sigma_t^r + k_r^* \eta_i] \Psi_{yr}(x, \Omega_i) = \hat{Q}_{yri}(x) + \frac{\sigma_s^r}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Psi_{yr}(x, \Omega_k) + \Psi_{yr}(x, \Omega_{k+M/2})], \quad (4.1)$$

$$\begin{aligned} \mu_{i+M/4} \frac{d}{dx} \Psi_{yr}(x, \Omega_{i+M/4}) + [\sigma_t^r + \tilde{k}_r \eta_{i+M/4}] \Psi_{yr}(x, \Omega_{i+M/4}) \\ = \hat{Q}_{yri+M/4}(x) + \frac{\sigma_s^r}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Psi_{yr}(x, \Omega_k) + \Psi_{yr}(x, \Omega_{k+M/2})], \quad (4.2) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\mu_i \frac{d}{dx} \Psi_{yr}(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + [\sigma_t^r + k_r^* \eta_{i+M/2}] \Psi_{yr}(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \\
& \hat{Q}_{yri+M/2}(x) + \frac{\sigma_s^r}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Psi_{yr}(x, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_{yr}(x, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})] \quad (4.3)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
& -\mu_{i+M/4} \frac{d}{dx} \Psi_{yr}(x, \mathbf{\Omega}_{i+3M/4}) + [\sigma_t^r + \tilde{k}_r \eta_{i+3M/4}] \Psi_{yr}(x, \mathbf{\Omega}_{i+3M/4}) = \\
& \hat{Q}_{yri+3M/4}(x) + \frac{\sigma_s^r}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Psi_{yr}(x, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_{yr}(x, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})], \quad (4.4)
\end{aligned}$$

para $i = 1, \dots, M/4$, $r = 1, \dots, R$, σ_t^r e σ_s^r indicando, respectivamente, as seções de choque total e de espalhamento em uma determinada região r .

Inicialmente, com o objetivo de resolver as equações unidimensionais integradas em y , equações (4.1)-(4.4), propõem-se soluções do problema homogêneo na forma

$$\Psi_{yr}^h(x, \mathbf{\Omega}) = \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}) e^{-x/\nu_r}. \quad (4.5)$$

Substituindo a equação (4.5) na equações (4.1)-(4.4), obtém-se para a região r ,

$$-\frac{\mu_i}{\nu_r} \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) + [\sigma_t^r + k_r^* \eta_i] \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) = \frac{\sigma_s^r}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_k) + \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})], \quad (4.6)$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\mu_{i+M/4}}{\nu_r} \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) + [\sigma_t^r + \tilde{k}_r \eta_{i+M/4}] \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) = \\
& \frac{\sigma_s^r}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_k) + \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})], \quad (4.7)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{\mu_i}{\nu_r} \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + [\sigma_t^r + k_r^* \eta_{i+M/2}] \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \\
& \frac{\sigma_s^r}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_k) + \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})] \quad (4.8)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
& \frac{\mu_{i+M/4}}{\nu_r} \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{i+3M/4}) + [\sigma_t^r + \tilde{k}_r \eta_{i+3M/4}] \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{i+3M/4}) = \\
& \frac{\sigma_s^r}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_k) + \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})]. \quad (4.9)
\end{aligned}$$

De acordo com o esquema de quadratura utilizado (Lewis e Miller, 1984), $\eta_i = \eta_{i+M/2}$, $i = 1, \dots, M/2$, e seguindo procedimento análogo ao descrito no capítulo anterior, considera-se que

$$U_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) = \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) + \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}), \quad (4.10)$$

$$V_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) = \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) - \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}). \quad (4.11)$$

Ao somar a equação (4.6) à (4.8) e a equação (4.7) à (4.9), obtém-se, respectivamente, lembrando (4.10)-(4.11),

$$V_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) = \frac{\nu_r}{\mu_i} [\sigma_t^r + k_r^* \eta_i] U_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) - \frac{\nu_r \sigma_s^r}{2\mu_i} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k U_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_k) \quad (4.12)$$

e

$$V_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) = \frac{\nu_r}{\mu_{i+M/4}} \left[\sigma_t^r + \tilde{k}_r \eta_{i+M/4} \right] U_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) - \frac{\nu_r \sigma_s^r}{2\mu_{i+M/4}} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k U_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_k), \quad (4.13)$$

para $i = 1, \dots, M/4$.

Por outro lado, considerando as equações (4.10) e (4.11), e subtraindo a equação (4.8) de (4.6) e a equação (4.9) de (4.7), encontram-se

$$-\frac{\mu_i}{\nu_r} U_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) + [\sigma_t^r + k_r^* \eta_i] V_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) = 0 \quad (4.14)$$

e

$$-\frac{\mu_{i+M/4}}{\nu_r} U_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) + \left[\sigma_t^r + \tilde{k}_r \eta_{i+M/4} \right] V_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) = 0. \quad (4.15)$$

Ao substituir as equações (4.12) e (4.13) em (4.14) e (4.15), respectivamente, obtém-se o problema de autovalor para a região r , escrito, na forma matricial como

$$[\mathbf{D}_{yr} - \mathbf{A}_{yr}] \mathbf{U}_{yr} = \lambda_{yr} \mathbf{U}_{yr}, \quad (4.16)$$

onde r indica a região considerada e $\lambda_r = 1/\nu_r^2$. As matrizes \mathbf{D}_{yr} e \mathbf{A}_{yr} , de ordem $M/2 \times M/2$, são definidas como

$$\mathbf{D}_{yr} = \text{diag} \left[\left[\frac{\sigma_t^r + k_r^* \eta_1}{\mu_1} \right]^2, \dots, \left[\frac{\sigma_t^r + k_r^* \eta_{M/4}}{\mu_{M/4}} \right]^2, \right. \\ \left. \left[\frac{\sigma_t^r + \tilde{k}_r \eta_{M/4+1}}{\mu_{M/4+1}} \right]^2, \dots, \left[\frac{\sigma_t^r + \tilde{k}_r \eta_{M/2}}{\mu_{M/2}} \right]^2 \right] \quad (4.17)$$

e

$$\mathbf{A}_{yr}(i, j) = \begin{cases} \frac{\sigma_s^r \omega_j [\sigma_t^r + k_r^* \eta_i]}{2\mu_i^2}, & i = 1, \dots, M/4, \\ \frac{\sigma_s^r \omega_j [\sigma_t^r + \tilde{k}_r \eta_i]}{2\mu_i^2}, & i = M/4 + 1, \dots, M/2, \end{cases} \quad (4.18)$$

para $j = 1, \dots, M/2$.

Assim, como na formulação desenvolvida no capítulo anterior, a partir de um conjunto de M equações em ordenadas discretas, encontra-se um problema de autovalor de ordem $M/2$ para cada região de distinto meio material. Essa redução resulta em um relevante ganho

computacional e representa uma característica própria da metodologia, baseada na combinação de esquemas nodais com o método ADO.

Obtêm-se as constantes de separação ν_r e o vetor U_r a partir da solução do problema de autovalor. Considerando que as ν_r aparecem aos pares (\pm) e V_r é determinado a partir das equações (4.14) e (4.15), as autofunções do problema homogêneo, na região r , podem ser escritas como, considerando as equações (4.10) e (4.11),

$$\Phi_{yr}(\nu_{jr}, \Omega_i) = \frac{U_{yr}(\nu_{jr}, \Omega_i) + V_{yr}(\nu_{jr}, \Omega_i)}{2}, \quad (4.19)$$

$$\Phi_{yr}(\nu_{jr}, \Omega_{i+M/2}) = \frac{U_{yr}(\nu_{jr}, \Omega_i) - V_{yr}(\nu_{jr}, \Omega_i)}{2}. \quad (4.20)$$

Assim, expressa-se a solução homogênea do problema para a região r como

$$\Psi_{yr}^h(x, \Omega_i) = \sum_{j=1}^{M/2} [A_{jr} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \Omega_i) e^{-(x-a_{m-1})/\nu_{jr}} + B_{jr} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \Omega_{i+M/2}) e^{-(a_m-x)/\nu_{jr}}], \quad (4.21)$$

$$\Psi_{yr}^h(x, \Omega_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} [A_{jr} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \Omega_{i+M/2}) e^{-(x-a_{m-1})/\nu_{jr}} + B_{jr} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \Omega_i) e^{-(a_m-x)/\nu_{jr}}], \quad (4.22)$$

para $i = 1, \dots, M/2$, $x \in [a_{m-1}, a_m]$, $y \in [b_{m-1}, b_m]$ e os coeficientes A_{jr} e B_{jr} serão determinados.

Por se tratar de um problema com a presença de fonte fixa e observando as equações (4.1)-(4.4), verifica-se que é necessário definir uma solução particular, assunto que será abordado na próxima seção. Dessa maneira, a solução geral para o problema, neste ponto, é escrita como

$$\Psi_{yr}(x, \Omega_i) = \sum_{j=1}^{M/2} [A_{jr} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \Omega_i) e^{-(x-a_{m-1})/\nu_{jr}} + B_{jr} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \Omega_{i+M/2}) e^{-(a_m-x)/\nu_{jr}}] + \Psi_{yr}^P(x, \Omega_i), \quad (4.23)$$

$$\Psi_{yr}(x, \Omega_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} [A_{jr} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \Omega_{i+M/2}) e^{-(x-a_{m-1})/\nu_{jr}} + B_{jr} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \Omega_i) e^{-(a_m-x)/\nu_{jr}}] + \Psi_{yr}^P(x, \Omega_{i+M/2}), \quad (4.24)$$

para $i = 1, \dots, M/2$, $x \in [a_{m-1}, a_m]$, $y \in [b_{m-1}, b_m]$.

A partir da próxima seção, a formulação até aqui desenvolvida será especificada de acordo com o meio material dos problemas bidimensionais de transporte de nêutrons considerados. Assim, na sequência, um problema em meio homogêneo será tratado e, na seção seguinte, a formulação para um domínio definido em meio heterogêneo será detalhada.

4.2 Meio homogêneo

Nesta seção, a formulação apresentada será direcionada para o caso de domínio definido em meio homogêneo, conforme detalhada no exame de qualificação (Picoloto, 2013). Nesse contexto, considerou-se um problema bidimensional de transporte de nêutrons, em estado estacionário, homogêneo, em geometria cartesiana bidimensional, definido em um retângulo $[0, a] \times [0, b]$, com espalhamento isotrópico e um grupo de energia, em estado estacionário, em que há a presença de uma fonte fixa $Q(r)$, definida no retângulo $[0, a_1] \times [0, b_1]$, cujos fluxos angulares incidentes são conhecidos em algumas fronteiras, conforme descrito na Figura 4.1.

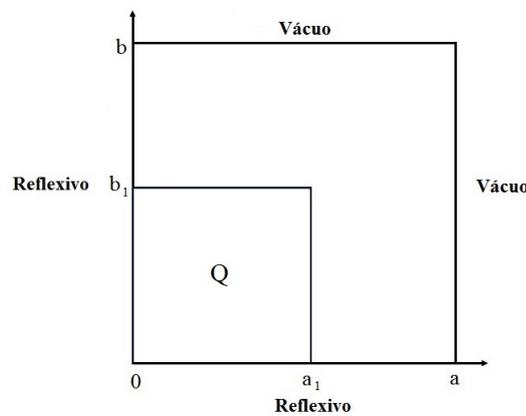


Figura 4.1: Representação geométrica do domínio do problema abordado

Nesse caso, considera-se o domínio um único nodo e, assim, realizam-se as integrações em $x \in [0, a]$ e em $y \in [0, b]$ (ou seja, $a_{m-1} = 0$, $a_m = a$, $b_{m-1} = 0$ e $b_m = b$). Analisando as condições de contorno do problema, juntamente com as equações (2.8) e (2.9), verifica-se que os termos dos fluxos nos contornos que aparecem no lado esquerdo das equações serão conhecidos apenas para algumas direções, como na fronteira com condição de contorno de tipo vácuo

$$\Psi(x, b, \Omega_i) = 0, \quad \text{para } i = M/4 + 1, \dots, M/2 \quad \text{e} \quad i = 3M/4 + 1, \dots, M, \quad (4.25)$$

e na fronteira com condição de contorno de tipo reflexiva

$$\Psi(x, 0, \Omega_i) = \Psi(x, 0, \Omega_{i+M/4}), \quad \text{para } i = 1, \dots, M/4 \quad \text{e} \quad i = M/2 + 1, \dots, 3M/4. \quad (4.26)$$

Uma vez que alguns fluxos angulares nas direções emergentes são desconhecidos, fez-se necessário definir equações auxiliares. Propõe-se, então, aproximações em termo dos fluxos médios integrados. Inicialmente, ao seguir (Barichello et al., 2009, 2011), considerando a fronteira com condição de contorno de tipo vácuo, propõe-se

$$\Psi(x, b, \Omega_i) \approx \hat{k}_1 \Psi_y(x, \Omega_i), \quad \text{para } i = 1, \dots, M/4 \quad \text{e} \quad i = M/2 + 1, \dots, 3M/4. \quad (4.27)$$

Considerando que a condição de contorno de tipo reflexiva indica uma expressão para o contorno e não um valor conhecido, também faz-se necessário definir equação auxiliar para essa fronteira. Assim, considerou-se

$$\Psi(x, 0, \Omega_i) \approx \hat{k}_2 \Psi_y(x, \Omega_i), \quad \text{para } i = 1, \dots, M, \quad (4.28)$$

em que \hat{k}_j com $j = 1, \dots, 4$ são parâmetros atribuídos empiricamente.

Na abordagem apresentada, verifica-se que os termos derivados dos fluxos desconhecidos na fronteira não são introduzidos como modificações no termo fonte. Como consequência, a solução particular torna-se mais simples, além do problema derivado na direção y permanecer desacoplado da direção x . Ao observar a representação geométrica do problema, na Figura 4.1, verifica-se a presença de um termo não-homogêneo, que está definido da seguinte forma

$$Q(x, y) = \begin{cases} 1, & \text{para } x \in [0, a_1] \text{ e } y \in [0, b_1], \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (4.29)$$

Pela equação (2.7) tem-se para $i = 1, \dots, M$

$$Q_y(x, \Omega_i) = \begin{cases} b_1/b, & \text{para } x \in [0, a_1], \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (4.30)$$

Nessas condições, propõe-se a solução particular da forma

$$\Psi_y^P(x, \Omega_i) = K_i, \quad (4.31)$$

com $i = 1, \dots, M$.

Ao substituir a equação (4.31) nas equações (4.1)-(4.4), obtém-se o sistema

$$[(k_1 - k_2)\eta_i + \sigma_t] K_i - \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^M \omega_k K_k = \frac{b_1}{b}, \quad (4.32)$$

$$[\sigma_t - k_2\eta_{i+M/4}] K_{i+M/4} - \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^M \omega_k K_k = \frac{b_1}{b}, \quad (4.33)$$

$$[(k_1 - k_2)\eta_{i+M/2} + \sigma_t] K_{i+M/2} - \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^M \omega_k K_k = \frac{b_1}{b} \quad (4.34)$$

e

$$[\sigma_t - k_2\eta_{i+3M/4}] K_{i+3M/4} - \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^M \omega_k K_k = \frac{b_1}{b}, \quad (4.35)$$

para $k_1 - k_2 \neq 0$. Ao comparar as equações (4.1)-(4.4) e (4.32)-(4.35), verifica-se que $k_r^* = k_1 - k_2$, $\tilde{k}_r = -k_2$ e \hat{Q}_{yri} está definido do lado esquerdo das equações (4.32)-(4.35).

Na busca de determinar os coeficientes desconhecidos das equações (4.23) e (4.24), considerando que a fonte está definida no intervalo $y \in [0, b_1]$, a solução geral é expressa na forma para $x \in [0, a_1]$,

$$\Psi_y(x, \Omega_i) = \sum_{j=1}^{M/2} [A_j \Phi_y(\nu_j, \Omega_i) e^{-x/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \Omega_{i+M/2}) e^{-(a_1-x)/\nu_j}] + K_i, \quad (4.36)$$

$$\Psi_y(x, \Omega_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} [A_j \Phi_y(\nu_j, \Omega_{i+M/2}) e^{-x/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \Omega_i) e^{-(a_1-x)/\nu_j}] + K_{i+M/2}, \quad (4.37)$$

e para $x \in [a_1, a]$

$$\Psi_y(x, \Omega_i) = \sum_{j=1}^{M/2} [C_j \Phi_y(\nu_j, \Omega_i) e^{-(x-a_1)/\nu_j} + D_j \Phi(\nu_j, \Omega_{i+M/2}) e^{-(a-x)/\nu_j}], \quad (4.38)$$

$$\Psi_y(x, \Omega_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} [C_j \Phi_y(\nu_j, \Omega_{i+M/2}) e^{-(x-a_1)/\nu_j} + D_j \Phi(\nu_j, \Omega_i) e^{-(a-x)/\nu_j}]. \quad (4.39)$$

Com o intuito de estabelecer a solução completamente, determinam-se, agora, os coeficientes A_j , B_j , C_j e D_j) das equações (4.36)-(4.39). Considerando as condições de contorno

$$\Psi(a, y, \Omega_i) = 0, \quad \text{para } i = M/2 + 1, \dots, M \quad (4.40)$$

e

$$\Psi(0, y, \Omega_i) = \Psi(x, 0, \Omega_{i+M/2}), \quad \text{para } i = 1, \dots, M/2, \quad (4.41)$$

em sua versão integrada (integrando-as para todo valor de x), isto é,

$$\Psi_y(a, \Omega_i) = 0, \quad \text{para } i = M/2 + 1, \dots, M \quad (4.42)$$

e

$$\Psi_y(0, \Omega_i) = \Psi_y(0, \Omega_{i+M/2}), \quad \text{para } i = 1, \dots, M/2. \quad (4.43)$$

Substituindo corretamente as equações (4.42) e (4.43) nas equações (4.36)-(4.39) e considerando a condição de continuidade entre as fronteira dos subintervalos com $i = 1, \dots, M/2$, tem-se

$$\sum_{j=1}^{M/2} C_j \Phi_y(\nu_j, \Omega_{i+M/2}) e^{-(a-a_1)/\nu_j} + D_j \Phi_x(\nu_j, \Omega_i) = 0, \quad (4.44)$$

$$\sum_{j=1}^{M/2} A_j [\Phi_y(\nu_j, \Omega_i) - \Phi_y(\nu_j, \Omega_{i+M/2})] +$$

$$B_j [\Phi_y(\nu_j, \Omega_{i+M/2}) - \Phi_y(\nu_j, \Omega_i)] e^{-a_1/\nu_j} = K_{i+M/2} - K_i, \quad (4.45)$$

$$\sum_{j=1}^{M/2} A_j \Phi_y(\nu_j, \Omega_i) e^{-a_1/\nu_j} + B_j \Phi_y(\nu_j, \Omega_{i+M/2}) - C_j \Phi_y(\nu_j, \Omega_i) - D_j \Phi_y(\nu_j, \Omega_{i+M/2}) e^{-(a-a_1)/\nu_j} = -K_i \quad (4.46)$$

e

$$\sum_{j=1}^{M/2} A_j \Phi_y(\nu_j, \Omega_{i+M/2}) e^{-a_1/\nu_j} + B_j \Phi_y(\nu_j, \Omega_i) - C_j \Phi_y(\nu_j, \Omega_{i+M/2}) - D_j \Phi_y(\nu_j, \Omega_i) e^{-(a-a_1)/\nu_j} = -K_{i+M/2}. \quad (4.47)$$

Assim, as equações formam um sistema linear de dimensão $2M \times 2M$ equações lineares, do qual obtém-se os $2M$ coeficientes da solução homogênea, ficando a solução completamente definida e sendo possível definir algumas quantidades de interesse.

4.2.1 Resultados numéricos

Considerou-se, neste trabalho, um caso teste descrito em Tsai e Loyalka (1976), no qual uma placa quadrada com dimensões $a = b = 1.0 \text{ cm}$ apresenta uma fonte isotrópica fixa $Q(x, y) = 1.0$, situada na região $[0, 0.52] \times [0, 0.52]$. Além disso, a seção de choque macroscópica total considerada é $\sigma_t = 1.0 \text{ cm}^{-1}$ e serão considerados três valores para a seção de choque de espalhamento $\sigma_s = 0.5 \text{ cm}^{-1}$, 0.1 cm^{-1} e 0.05 cm^{-1} .

Esse problema já havia sido considerado pelo método ADO, em (Barichello et al., 2009, 2011), porém a formulação desenvolvida aqui difere-se das anteriores uma vez que é considerada a simetria do problema e, assim, empregam-se condições de contorno de tipo reflexiva. A utilização desse tipo de condições de contorno acarreta a simplificação do desenvolvimento da formulação, na eficiência e na resolução de novos problemas. Além disso, ocasiona ganho computacional, já que passa a ser considerado um quarto do domínio. No entanto, torna-se necessário o uso de equações auxiliares adicionais para representar os fluxos desconhecidos nas fronteiras com condição de contorno de tipo reflexiva.

A quantidade de interesse a ser analisada é o fluxo escalar de nêutrons, avaliado como

$$\phi_x(y) = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{M/2} \omega_i [\Psi_x(y, \Omega_i) + \Psi_x(y, \Omega_{i+M/2})], \quad (4.48)$$

ou

$$\phi_y(x) = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{M/2} \omega_i [\Psi_y(x, \Omega_i) + \Psi_y(x, \Omega_{i+M/2})]. \quad (4.49)$$

O fluxo escalar foi determinado em $x = y = 0.5 \text{ cm}$, $x = y = 0.7 \text{ cm}$ e $x = y = 0.98 \text{ cm}$ com o intuito de compará-lo com resultados já existentes na literatura (Barichello et al.,

2009, 2011; Tsai e Loyalka, 1976). Nas tabelas 1-3, os valores obtidos para o fluxo escalar são apresentados considerando algumas escolhas para os parâmetros que relacionam os fluxos desconhecidos nas fronteiras com os fluxos médios integrados ($\hat{k}_1 = \hat{k}_3$ e $\hat{k}_2 = \hat{k}_4$), para diferentes valores de N ($N = 2$ até $N = 16$). É importante salientar que a escolha dos valores para os parâmetros \hat{k}_1 seguiu Barichello et al. (2011) e, devido à simetria reflexiva, relacionou-se o valor do outro parâmetro (\hat{k}_2) com o anterior, sendo $\hat{k}_2 = \hat{k}_1/2$.

Embora os fluxos desconhecidos nos contornos sejam relacionados com os fluxos médios e os parâmetros k_1 e k_2 sejam estimados, verifica-se que essa abordagem possibilita a solução de problemas bidimensionais de transporte de nêutrons e, além disso, simplifica o termo de fonte, resolvendo, de maneira desacoplada, os problemas nas variáveis x e y . É importante notar que, nesse ponto, os resultados disponíveis na literatura (apresentados nas Tabelas 4.1-4.3) foram gerados a partir da solução do problema bidimensional, enquanto os resultados pelo método ADO foram obtidos pela solução de problemas unidimensionais, em termos de grandezas médias. Apesar disso, os resultados obtidos apresentam concordância com os existentes na literatura, uma vez que o erro relativo para os casos discutidos é nulo quando comparado aos resultados de Barichello et al. (2011). No entanto, ao serem comparados com os demais resultados (Tsai e Loyalka (1976) e TWOTRAN (Tsai e Loyalka, 1976)), apresenta erro relativo de aproximadamente 10%. Os resultados obtidos por Tsai e Loyalka (1976), e o código TWOTRAN (Tsai e Loyalka, 1976), apresentam erro relativo em torno de 6%. Em todos os casos, o tempo computacional foi menor do que 1 segundo, utilizando a linguagem Fortran. Na próxima seção, a formulação será desenvolvida para o caso em que o domínio é constituído de meio material heterogêneo.

Tabela 4.1: Fluxo escalar $\phi(x, y)$ para $x = y = 0.5cm$

	Tsai e Loyalka (1976)	TWOTRAN-II (Tsai e Loyalka, 1976)	Barichello et al. (2011)	Este trabalho
σ_S	N = 5, 7, 9, 11, 15	N = 4, 8, 16	N = 2, 4, 6, 8, 12, 16	N = 2, 4, 6, 8, 12, 16
			$\hat{k} = 0.35$	$\hat{k}_1 = 0.35$ e $\hat{k}_2 = \hat{k}_1/2$
0.5	0.359604 0.358422 0.357414 0.356678 0.355885	0.337412 0.337707 0.339794	0.326 0.349 0.352 0.353 0.354 0.355	0.326 0.350 0.352 0.353 0.354 0.355
0.1	0.258802 0.259150 0.259131 0.259030 0.258906	0.239483 0.241676 0.244032	0.227 0.238 0.239 0.239 0.240 0.241 0.241	0.227 0.238 0.239 0.240 0.241 0.241
0.05	0.250097 0.250569 0.250636 0.250591 0.250529	0.231102 0.233421 0.235787	0.219 0.228 0.229 0.230 0.231 0.232	0.219 0.229 0.230 0.230 0.231 0.232

Tabela 4.2: Fluxo escalar $\phi(x, y)$ para $x = y = 0.7cm$

σ_s	Tsai e Loyalka (1976) N = 5, 7, 9, 11, 15	TWOTRAN-II (Tsai e Loyalka, 1976) N = 4, 8, 16	Barichello et al. (2011) N = 2, 4, 6, 8, 12, 16	Este trabalho N = 2, 4, 6, 8, 12, 16, $\hat{k}_1 = 2.0$ e $\hat{k}_2 = \hat{k}_1/2$
0.5	0.149801	0.157320	0.141	0.142
	0.139050	0.139581	0.138	0.138
	0.138539	0.133426	0.135	0.135
	0.138460		0.134	0.134
0.1	0.137048		0.132	0.133
			0.132	0.132
	0.093601	0.100591	0.102	0.102
	0.083932	0.085131	0.095	0.095
0.05	0.083759	0.078914	0.092	0.092
	0.083911		0.090	0.091
	0.082774		0.089	0.090
			0.089	0.089
0.05	0.088990	0.095014	0.098	0.098
	0.079448	0.080662	0.091	0.092
	0.079301	0.074448	0.088	0.089
	0.079469		0.087	0.087
	0.078362		0.085	0.086
			0.085	0.085

Tabela 4.3: Fluxo escalar $\phi(x, y)$ para $x = y = 0.98cm$

σ_s	Tsai e Loyalka (1976) N = 5, 7, 9, 11, 15	TWOTRAN-II (Tsai e Loyalka, 1976) N = 4, 8, 16	Barichello et al. (2011) N = 2, 4, 6, 8, 12, 16	Este trabalho N = 2, 4, 6, 8, 12, 16, $\hat{k}_1 = 3.5$ e $\hat{k}_2 = \hat{k}_1/2$
0.5	0.054250	0.045536	0.038	0.038
	0.053812	0.048085	0.042	0.042
	0.053558	0.052366	0.044	0.044
	0.053442		0.045	0.045
	0.053413		0.046	0.047
0.1	0.032577	0.025670	0.027	0.027
	0.032669	0.028969	0.029	0.029
	0.032655	0.032432	0.031	0.031
	0.032637		0.031	0.032
	0.032622		0.032	0.033
0.05	0.030823	0.023777	0.026	0.026
	0.030952	0.027299	0.028	0.028
	0.030956	0.030798	0.029	0.030
	0.030945		0.030	0.030
	0.030931		0.031	0.031
			0.031	0.032

4.3 Meio heterogêneo

Para determinação de uma solução particular, considera-se um problema específico proposto em (Azmy, 1988c; Mello e Barros, 2002), cuja geometria está descrita na Figura 4.2, no qual serão analisadas quantidades de interesse. Tendo em vista a presença de uma fonte fixa na região 1, uma solução particular deve ser estabelecida.

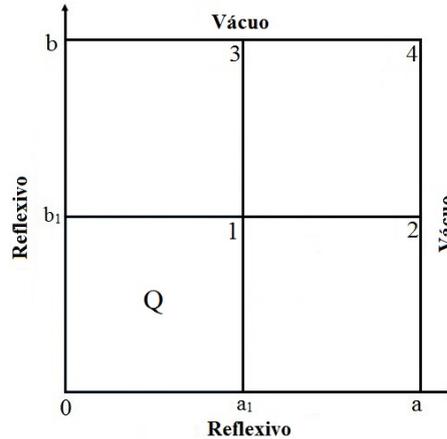


Figura 4.2: Representação da geometria do primeiro problema considerado

A fonte unitária é definida como

$$Q(x, y) = \begin{cases} 1, & r = 1, \\ 0, & \text{em outros casos,} \end{cases} \quad (4.50)$$

e, por isso, considerou-se a solução particular na forma

$$\Psi_{yr}^P(x, \Omega_i) = I_{ri}, \quad (4.51)$$

para $i = 1, \dots, M$ e $r = 1, 2$.

De acordo com a descrição do domínio, a solução particular deve ser definida apenas para a região $r = 1$. No entanto, as aproximações para os fluxos desconhecidos nos contornos e nas interfaces das regiões resultam em expressões adicionais para os termos fonte das equações (4.1)-(4.4). Mais precisamente, analisando as condições de contorno do problema, representado na Figura 4.2, verifica-se que essas não são conhecidas em todas as direções. Há a presença de condições de tipo reflexiva

$$\Psi(x, 0, \Omega_i) = \Psi(x, 0, \Omega_{i+M/4}), \quad i = 1, \dots, M/4 \quad \text{e} \quad i = M/2 + 1, \dots, 3M/4, \quad (4.52)$$

e condições de contorno de tipo vácuo, que tornam conhecidos os fluxos incidentes,

$$\Psi(x, b, \Omega_i) = 0, \quad i = M/4 + 1, \dots, M/2 \quad \text{e} \quad i = 3M/4 + 1, \dots, M. \quad (4.53)$$

Como usual em esquemas nodais, equações auxiliares são introduzidas e, neste problema, relacionam-se os fluxos desconhecidos com os fluxos médios integrados. Dessa forma, como há a presença de condição de contorno de tipo reflexiva em $y = 0$, nas $r = 1, 2$, considerou-se, para todas as direções

$$\Psi_r(x, 0, \mathbf{\Omega}_i) = \hat{k}_r \Psi_{yr}(x, \mathbf{\Omega}_i), \quad i = 1, \dots, M. \quad (4.54)$$

Em $y = b_1$, novamente nas regiões $r = 1, 2$, escreveu-se os fluxos emergentes como

$$\Psi_r(x, b_1, \mathbf{\Omega}_i) = \hat{k}_{r+2} \Psi_{yr}(x, \mathbf{\Omega}_i), \quad i = 1, \dots, M/4 \quad \text{e} \quad i = M/2 + 1, \dots, 3M/4, \quad (4.55)$$

e, para acoplar a solução com as regiões 3 e 4, considerou-se os fluxos incidentes como

$$\Psi_r(x, b_1, \mathbf{\Omega}_i) = \bar{\Psi}_{r+2}(\mathbf{\Omega}_i), \quad i = M/4 + 1, \dots, M/2 \quad \text{e} \quad i = 3M/4 + 1, \dots, M. \quad (4.56)$$

Para ser consistente, as aproximações semelhantes foram utilizadas para as regiões $r = 3, 4$. Assim, em $y = b_1$, supôs-se para os fluxos emergentes,

$$\Psi_r(x, b_1, \mathbf{\Omega}_i) = \hat{k}_{r+2} \Psi_{yr}(x, \mathbf{\Omega}_i), \quad i = M/4 + 1, \dots, M/2 \quad \text{e} \quad i = 3M/4 + 1, \dots, M, \quad (4.57)$$

e os fluxos incidentes, oriundos das regiões 1 e 2, como

$$\Psi_r(x, b_1, \mathbf{\Omega}_i) = \bar{\Psi}_{r-2}(\mathbf{\Omega}_i), \quad i = 1, \dots, M/4 \quad \text{e} \quad i = M/2 + 1, \dots, 3M/4. \quad (4.58)$$

Ainda em $y = b_2 = b$, nas direções não especificadas pela equação (4.53), expressou-se os fluxos emergentes para $r = 3$ e $r = 4$ como

$$\Psi_r(x, b, \mathbf{\Omega}_i) = \hat{k}_{r+4} \Psi_{yr}(x, \mathbf{\Omega}_i), \quad i = 1, \dots, M/4 \quad \text{e} \quad i = M/2 + 1, \dots, 3M/4. \quad (4.59)$$

Até esse momento, \hat{k}_α com $\alpha = 1, \dots, 2R$ são arbitrários e

$$\bar{\Psi}_r(\mathbf{\Omega}_i) = \frac{1}{(a_m - a_{m-1})} \int_{a_{m-1}}^{a_m} \Psi_{yr}(x, \mathbf{\Omega}_i) dx, \quad (4.60)$$

para $r = 1, \dots, 4$, em que $0 \leq a_{m-1} < a_m \leq a$ e $m = 1, 2$. Para facilitar a notação, será considerado $k_r = \hat{k}_r / (b_m - b_{m-1})$. Substituindo-se a equação (4.51) e as condições de contorno relacionadas às regiões $r = 1$ e $r = 2$ nas equações (4.1)-(4.4), obtém-se um sistema linear $M \times M$, que permite determinar I_{ri} , na forma

$$[\sigma_t^r + (k_{r+2} - k_r)\eta_i] I_{ri} - \frac{\sigma_s^r}{4} \sum_{k=1}^M \omega_k I_{rk} = Q_{yr}(x), \quad (4.61)$$

$$[\sigma_t^r - k_r \eta_{i+M/4}] I_{ri+M/4} - \frac{\sigma_s^r}{4} \sum_{k=1}^M \omega_k I_{rk} = Q_{yr}(x) - \frac{\bar{\Psi}_{r+2}(\mathbf{\Omega}_{i+M/4}) \eta_{i+M/4}}{b_1}, \quad (4.62)$$

$$[\sigma_t^r + (k_{r+2} - k_r)\eta_{i+M/2}] I_{ri+M/2} - \frac{\sigma_s^r}{4} \sum_{k=1}^M \omega_k I_{rk} = Q_{yr}(x) \quad (4.63)$$

e

$$[\sigma_t^r - k_r \eta_{i+3M/4}] I_{ri+3M/4} - \frac{\sigma_s^r}{4} \sum_{k=1}^M \omega_k I_{rk} = Q_{yr}(x) - \frac{\bar{\Psi}_{r+2}(\mathbf{\Omega}_{i+3M/4}) \eta_{i+3M/4}}{b_1}, \quad (4.64)$$

para $i = 1, \dots, M/4$, $k_{r+2} - k_r \neq 0$ e com $r = 1, 2$.

Comparando as equações (4.61)-(4.64) com as equações (4.1)-(4.4), associa-se a forma geral $k_r^* = k_{r+2} - k_r$; $\tilde{k}_r = -k_r$ e \hat{Q}_{yri} está representada do lado direito das equações (4.61)-(4.64).

Procedimento análogo é realizado para as regiões 3 e 4. Dessa forma, propõe-se solução particular na forma

$$\Psi_{yr}^P(x, \mathbf{\Omega}_i) = L_{ri}, \quad (4.65)$$

para $r = 3, 4$, e $i = 1, \dots, M$. Substituindo a equação (4.65) nas equações (4.1)-(4.4) e considerando as condições de contorno do problema, encontra-se o sistema linear $M \times M$,

$$[\sigma_t^r + k_{r+4}\eta_i] L_{ri} - \frac{\sigma_s^r}{4} \sum_{k=1}^M \omega_k L_{rk} = \frac{\bar{\Psi}_{r-2}(\mathbf{\Omega}_i) \eta_i}{b - b_1}, \quad (4.66)$$

$$[\sigma_t^r - k_{r+2}\eta_{i+M/4}] L_{ri+M/4} - \frac{\sigma_s^r}{4} \sum_{k=1}^M \omega_k L_{rk} = 0, \quad (4.67)$$

$$[\sigma_t^r + k_{r+4}\eta_{i+M/2}] L_{ri+M/2} - \frac{\sigma_s^r}{4} \sum_{k=1}^M \omega_k L_{rk} = \frac{\bar{\Psi}_{r-2}(\mathbf{\Omega}_{i+M/2}) \eta_{i+M/2}}{b - b_1} \quad (4.68)$$

e

$$[\sigma_t^r - k_{r+2}\eta_{i+3M/4}] L_{ri+3M/4} - \frac{\sigma_s^r}{4} \sum_{k=1}^M \omega_k L_{rk} = 0, \quad (4.69)$$

para $r = 3, 4$ onde, neste caso, $k_r^* = k_{r+4}$; $\tilde{k}_r = -k_{r+2}$ e \hat{Q}_{yri} está definida do lado direito das equações (4.66)-(4.69).

Finalmente, para ter a solução completamente estabelecida, necessita-se determinar as $2MR$ constantes arbitrárias presentes na solução geral (nesse caso como $R = 4$ têm-se $8M$ constantes a serem determinadas), equações (4.23)-(4.24), consideram-se as condições de continuidade nas interfaces, juntamente com a versão integrada das condições de contorno dadas para $x = 0$ e $x = a$,

$$\Psi_{y1}(0, \mathbf{\Omega}_i) = \Psi_{y1}(0, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}), \quad (4.70)$$

$$\Psi_{y3}(0, \mathbf{\Omega}_i) = \Psi_{y3}(0, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}), \quad (4.71)$$

para $i = 1, \dots, M/2$, e

$$\Psi_{y2}(a, \mathbf{\Omega}_i) = 0, \quad (4.72)$$

$$\Psi_{y4}(a, \Omega_i) = 0, \quad (4.73)$$

para $i = M/2 + 1, \dots, M$.

4.3.1 Resultados numéricos

Buscando validar a formulação, dois problemas testes foram considerados. O primeiro, cuja representação do domínio encontra-se na Figura 4.2, consiste em uma região quadrada definida em $a = b = 10 \text{ cm}$, com a presença de uma fonte fixa unitária isotrópica, $Q(x, y) = 1.0$, na região $a_1 = b_1 = 5 \text{ cm}$. Os dados nucleares para a região 1 são $\sigma_t = 1.0 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0.5 \text{ cm}^{-1}$. Já para as demais regiões são $\sigma_t = 2.0 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0.1 \text{ cm}^{-1}$. Nesse problema teste, descrito na literatura em (Azmy, 1988c; Mello e Barros, 2002), a quantidade de interesse determinada é o fluxo escalar médio. Sendo assim, para comparar os resultados obtidos, a partir da expressão para o fluxo escalar

$$\phi_r(x) = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{M/2} \omega_i [\Psi_{yr}(x, \Omega_i) + \Psi_{yr}(x, \Omega_{i+M/2})], \quad (4.74)$$

define-se a equação para o fluxos escalar médio como

$$\bar{\phi}_r = \frac{1}{a_m - a_{m-1}} \int_{a_{m-1}}^{a_m} \phi_r(x) dx, \quad (4.75)$$

para $r = 1, \dots, 4$, em que $0 < a_{m-1} < a_m < a$ e $m = 1, 2$.

Na tabela 4.4, são apresentados os resultados obtidos para os pontos de quadratura de $N = 2, \dots, 16$, em programa implementado na linguagem FORTRAN, em um tempo computacional menor que um segundo, em um computador Intel Core i7 2.4GHz e 6Gb(RAM). Além disso, nessa tabela, são listados os resultados das referências (Azmy, 1988c) e (Mello e Barros, 2002), obtidos para $N = 4$, com diferentes configurações de malhas e por dois diferentes métodos nodais.

Aqui, diferentemente do caso homogêneo, uma estimativa para os parâmetros \hat{k}_α (Barichello et al., 2015), os quais relacionam os fluxos desconhecidos nos contornos com o fluxo médio é proposta na forma

$$\hat{k}_r = \frac{1}{\sigma_t^r} [e^{-\sigma_t^r (a_m - a_{m-1}) / |\mu_i|} - 1]. \quad (4.76)$$

Na tabela 4.4, apresentam-se os resultados obtidos para o conjunto de dados chamado caso 1, onde $\hat{k}_1 = \hat{k}_3 = 1.0$; $\hat{k}_\alpha = 0.4$, $\alpha = 2, 4, \dots, 8$.

Tabela 4.4: Fluxos escalares médios para o primeiro problema

Região	N	Azmy (1988c)			Mello e Barros (2002)			Neste trabalho
		10×10	20×20	40×40	10×10	20×20	40×40	
1	2							Caso 1
	4	1.676	1.676	1.676	1.676	1.676	1.676	1.647
	6							1.674
	8							1.679
	12							1.681
	16							1.683
2	2							1.684
	4	0.4170×10^{-1}	0.4160×10^{-1}	0.4159×10^{-1}	0.4169×10^{-1}	0.4161×10^{-1}	0.4161×10^{-1}	0.4507×10^{-1}
	6							0.4218×10^{-1}
	8							0.4172×10^{-1}
	12							0.4150×10^{-1}
	16							0.4134×10^{-1}
4	2							0.4127×10^{-1}
	4	0.1986×10^{-2}	0.1990×10^{-2}	0.1992×10^{-2}	0.2000×10^{-2}	0.1995×10^{-2}	0.1993×10^{-2}	0.2935×10^{-2}
	6							0.2177×10^{-2}
	8							0.2060×10^{-2}
	12							0.2007×10^{-2}
	16							0.1967×10^{-2}
								0.1950×10^{-2}

A análise dos resultados permite verificar que com o aumento na ordem de quadratura, para o conjunto de parâmetros escolhidos, ocorre a concordância em dois a três dígitos com os resultados existentes na literatura. Nesse caso, tanto os resultados disponíveis na literatura quanto os resultados obtidos pelo método ADO são grandezas médias. Desta forma, verifica-se uma melhor concordância com os resultados da literatura do que no caso homogêneo apresentado na seção anterior. Vale ressaltar que tais resultados foram obtidos subdividindo o domínio em apenas quatro (2×2) regiões homogêneas, enquanto que os resultados da literatura foram obtidos para malhas com um número muito maior de nodos.

Similar configuração é considerada no segundo problema, em que as propriedades materiais das regiões $r = 1, \dots, 4$ são mantidas as mesmas, porém as dimensões do domínio e das regiões foram alteradas, conforme mostra a Figura 4.3. A região quadrada é definida em $a = b = 30.0 \text{ cm}$ e a fonte fixa isotrópica constante $Q(x, y) = 1$ está na região $[0, 10.0] \times [0, 10.0]$.

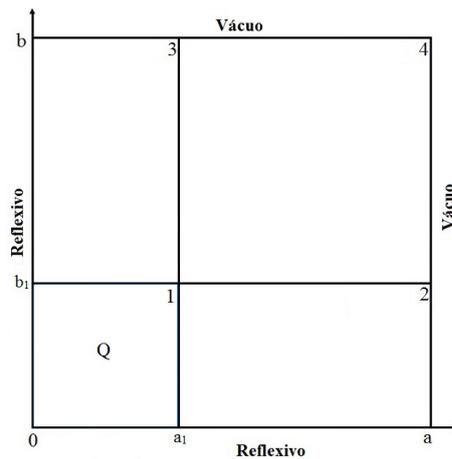


Figura 4.3: Representação da geometria do segundo problema considerado

Na tabela 4.5, os resultados obtidos para os fluxos escalares médios são comparados com os resultados encontrados pelo programa computacional AHOT-N1 (Azmy, 2014), para $N = 4$ e aproximações lineares para os fluxos desconhecidos nos contornos, com três diferentes malhas. Duas escolhas de conjuntos de parâmetros, obtidos a partir da equação (4.76), foram consideradas, sendo elas

- Caso 2: $\hat{k}_1 = \hat{k}_3 = 1.0$; $\hat{k}_\alpha = 0.5$, $\alpha = 2, 4, \dots, 8$;
- Caso 3: $\hat{k}_1 = \hat{k}_3 = 0.9$; $\hat{k}_\alpha = 0.4$, $\alpha = 2, 4, \dots, 8$.

Tabela 4.5: Fluxos escalares médios para o segundo problema

Região	N	Azmy (2014)			Neste trabalho	
		15×15	30×30	60×60	Caso 2	Caso 3
1	2				1.808	1.817
	4	1.829	1.831	1.831	1.824	1.832
	6				1.827	1.835
	8				1.828	1.836
	12				1.829	1.837
	16				1.829	1.837
2	2				0.1180×10^{-1}	0.1187×10^{-1}
	4	0.110×10^{-1}	0.109×10^{-1}	0.109×10^{-1}	0.1096×10^{-1}	0.1102×10^{-1}
	6				0.1083×10^{-1}	0.1088×10^{-1}
	8				0.1077×10^{-1}	0.1082×10^{-1}
	12				0.1072×10^{-1}	0.1077×10^{-1}
	16				0.1070×10^{-1}	0.1075×10^{-1}
4	2				0.1972×10^{-3}	0.1978×10^{-3}
	4	0.126×10^{-3}	0.124×10^{-3}	0.124×10^{-3}	0.1459×10^{-3}	0.1463×10^{-3}
	6				0.1381×10^{-3}	0.1385×10^{-3}
	8				0.1346×10^{-3}	0.1350×10^{-3}
	12				0.1319×10^{-3}	0.1323×10^{-3}
	16				0.1308×10^{-3}	0.1312×10^{-3}

A análise dos resultados mostra comportamento semelhante aos discutidos no problema anterior. Com relação a aspectos computacionais, os sistemas obtidos são todos bem condicionados. Devido ao fato dos fluxos angulares desconhecidos dos contornos serem incorporados à parte homogênea do problema, as soluções particulares tornam-se mais simples, além das soluções permanecerem desacopladas para as direções x e y . Apesar do uso de equações auxiliares que requerem a definição *a priori* de coeficientes de proporcionalidade, a presente investigação mostrou ser possível obter resultados satisfatórios para os problemas. Além disso, o uso da estimativa para o parâmetro \hat{k} , apresentada na equação (4.76), reduziu a dificuldade de obter as constantes de proporcionalidade.

5 SOLUÇÕES ELEMENTARES ANALÍTICAS

Assim como no caso unidimensional (Barichello e Siewert, 1999), podemos definir, de maneira alternativa ao exposto nos capítulos anteriores, uma abordagem explícita também para as soluções elementares. Além disso, neste capítulo, a estrutura da matriz, no caso de problemas isotrópicos, é utilizada para reescrever o problema de forma ainda mais simplificada, como perturbação de uma matriz diagonal que, por suas características inerentes, possibilita ainda maior ganho e eficiência computacional.

5.1 Formulação

Com a finalidade de explorar a estrutura da matriz associada ao problema de autovalores, obtidos a partir de sistema de equações unidimensionais integradas transversalmente, e rederivar o problema de autovalores na forma de matriz da perturbação de matriz diagonal, as equações (3.2) e (3.3) foram reescritas na forma, conforme Picoloto et al. (2014),

$$-\frac{1}{\nu_r} \mathbf{M} \Phi_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_i) = (\mathbf{W}_r - \mathbf{S}_r) \Phi_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_i) + \mathbf{W}_r \Phi_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) \quad (5.1)$$

e

$$\frac{1}{\nu_r} \mathbf{M} \Phi_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) = \mathbf{W}_r \Phi_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_i) + (\mathbf{W}_r - \mathbf{S}_r) \Phi_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}), \quad (5.2)$$

para $i = 1, \dots, M/2$, em que \mathbf{S} é a matriz diagonal, cujos elementos da diagonal principal são as constantes σ_t ,

$$\mathbf{M} = \text{diag}\{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{M/2}\} \quad (5.3)$$

e

$$\mathbf{W}_r(i, j) = \frac{\sigma_s^r}{4} \omega_j. \quad (5.4)$$

Adicionando e subtraindo as equações (5.1) e (5.2) e também considerando

$$\mathbf{U}_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_i) = \Phi_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_i) + \Phi_{yr}(\nu_r, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}), \quad (5.5)$$

obtem-se

$$(\mathbf{D}_{yr} - 2\mathbf{S}_r \mathbf{M}^{-1} \mathbf{W}_r \mathbf{M}^{-1}) \mathbf{M} \mathbf{U}_{yr} = \frac{1}{\nu_r^2} \mathbf{M} \mathbf{U}_{yr}, \quad (5.6)$$

onde

$$\mathbf{D}_{yr} = \text{diag} \left\{ \left[\frac{\sigma_t^r}{\mu_1} \right]^2, \left[\frac{\sigma_t^r}{\mu_2} \right]^2, \dots, \left[\frac{\sigma_t^r}{\mu_{M/2}} \right]^2 \right\}. \quad (5.7)$$

Por sua vez ao multiplicar a equação (5.6) por uma matriz diagonal \mathbf{T} , representada por

$$\mathbf{T} = \text{diag}\{\omega_1^{1/2}, \omega_2^{1/2}, \dots, \omega_{M/2}^{1/2}\}, \quad (5.8)$$

obtém-se

$$(\mathbf{D}_{yr} - 2\mathbf{\Xi}_r) \hat{\mathbf{X}}_r = \frac{1}{\nu_r^2} \hat{\mathbf{X}}_r, \quad (5.9)$$

em que

$$\mathbf{\Xi}_r = \mathbf{S}_r \mathbf{M}^{-1} \mathbf{T} \mathbf{W}_r \mathbf{T}^{-1} \mathbf{M}^{-1} \quad (5.10)$$

e

$$\hat{\mathbf{X}}_r = \mathbf{T} \mathbf{M} \mathbf{U}_{yr}. \quad (5.11)$$

Cabe lembrar que os elementos da matriz \mathbf{T} foram definidos de forma a tornar a matriz $\mathbf{\Xi}$ simétrica. Desse modo, o problema de autovalores pode ser escrito na forma

$$\left(\mathbf{D}_{yr} - \frac{\sigma_t^r \sigma_s^r}{2} \mathbf{z} \mathbf{z}^T \right) \hat{\mathbf{X}}_r = \lambda_{yr} \hat{\mathbf{X}}_r, \quad (5.12)$$

com $\lambda_{yr} = 1/\nu_r^2$ e

$$\mathbf{z} = \left[(1/\mu_1) \omega_1^{1/2} \quad (1/\mu_2) \omega_2^{1/2} \quad \dots \quad (1/\mu_{M/2}) \omega_{M/2}^{1/2} \right]^T. \quad (5.13)$$

Nota-se, então, que a simplificação do problema de autovalores, já de ordem $M/2$, se torna ainda mais expressiva, uma vez que agora se trata de perturbação de matriz de posto 1, que pode ser tratado, por exemplo, pelo método *divide and conquer* (Datta, 1995), em procedimento ainda mais eficiente do que o de matrizes triangulares simétricas. O uso do problema de autovalores, escrito conforme (5.12), na formulação isotrópica do capítulo 3, representa uma relevante redução de tempo computacional.

Encontrados os autovalores, impõe-se a condição de normalização

$$\sum_{k=1}^{M/2} \omega_k \left[\Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_k) + \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{k+M/2}) \right] = 1 \quad (5.14)$$

e, assim, é possível escrever de forma explícita, observando que a escolha da quadratura deve garantir que o denominador seja diferente de zero,

$$\Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) = \frac{\sigma_s^r \nu_r}{4(\sigma_t^r \nu_r - \mu_i)} \quad (5.15)$$

e

$$\Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \frac{\sigma_s^r \nu_r}{4(\sigma_t^r \nu_r + \mu_i)}, \quad (5.16)$$

com $i = 1, \dots, M/2$.

Procedimento análogo é realizado na definição de abordagem explícita para soluções elementares, a partir da formulação para a direção y . Nesse contexto, a equação (3.18) para o problema isotrópico pode ser escrita na forma

$$\left(\mathbf{D}_{xr} - \frac{\sigma_t^r \sigma_s^r}{2} \mathbf{v} \mathbf{v}^T \right) \hat{\mathbf{Y}}_r = \lambda_{xr} \hat{\mathbf{Y}}_r, \quad (5.17)$$

com $\lambda_{xr} = 1/\gamma_r^2$,

$$\mathbf{v} = \left[(1/\eta_1)\omega_1^{1/2} \quad (1/\eta_2)\omega_2^{1/2} \quad \dots \quad (1/\eta_{M/2})\omega_{M/2}^{1/2} \right]^T \quad (5.18)$$

e

$$\hat{\mathbf{Y}}_{\mathbf{r}} = \mathbf{T}\mathbf{M}\mathbf{U}_{xr}. \quad (5.19)$$

Impondo-se a condição de normalização

$$\sum_{k=1}^{M/2} \omega_k \left[\Phi_{xr}(\gamma_r, \boldsymbol{\Omega}_k) + \Phi_{xr}(\gamma_r, \boldsymbol{\Omega}_{k+M/2}) \right] = 1 \quad (5.20)$$

obtéem-se, de forma explícita,

$$\Phi_{xr}(\gamma_r, \boldsymbol{\Omega}_i) = \frac{\sigma_s^r \gamma_r}{4(\sigma_t^r \gamma_r - \eta_i)}, \quad (5.21)$$

$$\Phi_{xr}(\gamma_r, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) = \frac{\sigma_s^r \gamma_r}{4(\sigma_t^r \gamma_r + \eta_i)}, \quad (5.22)$$

com $i = 1, \dots, M/2$.

Seguindo essa formulação, as soluções homogêneas em ordenadas discretas são escritas da mesma maneira como foi descrito nos capítulos anteriores. No entanto, nesse caso, é preciso observar que o denominador não seja nulo nas expressões para as autofunções explícitas. Os efeitos desta restrição serão analisados por ocasião das simulações numéricas apresentadas na sequência. Entretanto, independente disso, o problema de autovalores derivado neste capítulo pode ser usado nas formulações anteriores para casos em que o espalhamento seja isotrópico.

5.2 Resultados numéricos e aspectos computacionais

Com o objetivo de avaliar esta formulação, o primeiro caso teste considerado, será o descrito por Tsai e Loyalka (1976), já utilizado no capítulo anterior deste estudo, consiste em uma placa quadrada $a = b = 1.0 \text{ cm}$, com uma fonte isotrópica fixa $Q(x, y) = 1.0$ na região $[0, 0.52] \times [0, 0.52]$, e com parâmetros nucleares $\sigma_t = 1.0 \text{ cm}^{-1}$ e três valores para a seção de choque de espalhamento $\sigma_s = 0.5 \text{ cm}^{-1}$, 0.1 cm^{-1} e 0.05 cm^{-1} .

A quantidade de interesse a ser analisada é o fluxo escalar de nêutrons avaliado como

$$\phi_x(y) = \frac{1}{\sum_{k=1}^K \omega_i} \sum_{k=1}^K \omega_i \Psi_x(y, \boldsymbol{\Omega}_k), \quad (5.23)$$

ou

$$\phi_y(x) = \frac{1}{\sum_{k=1}^K \omega_i} \sum_{k=1}^K \omega_i \Psi_y(x, \boldsymbol{\Omega}_k). \quad (5.24)$$

em que K representa o número de direções consideradas após a análise dos denominadores das equações (5.15) e (5.21). Os resultados obtidos são apresentados nas tabelas 5.1-5.3, para

$N = 4$ e $N = 8$. Nesse caso, fez-se uso do pacote DGELSS (Anderson et al., 1999), que trata sistemas lineares utilizando mínimos quadrados.

O uso da análise espectral permitiu, além de escrever as soluções elementares do problema de ordenadas discretas explicitamente, diferindo de abordagens anteriores, obter um problema de autovalores mais simples. Pela sua natureza, tal sistema pode ser resolvido numericamente de modo mais eficiente (Datta, 1995). Os resultados para os problemas de autovalores, obtidos a partir dessa abordagem, foram verificados, confirmando os já encontrados em Tres et al. (2014b), com redução relevante de tempo computacional.

No entanto, cabe ressaltar que, para o denominador das expressões (5.15) e (5.21) ser não nulo ($\sigma_l^r \nu_r \neq \mu_i$), é necessário avaliar possíveis direções a serem consideradas, reduzindo o seu número. O presente estudo é preliminar e o uso de outro esquema de quadratura com um número maior de direções, por exemplo, poderia amenizar essa perda de informações. Esse aspecto ainda está em estudo e não pode ser considerado conclusivo.

Tabela 5.1: Fluxo escalar $\phi(x, y)$ para $x = y = 0.5cm$

	Tsai e Loyalka (1976) N = 5, 7, 9, 11, 15	Tsai e Loyalka (1976) N = 4, 8, 16	Prolo Filho e Barichello (2013a) N = 2, 4, 6, 8, 12, 16	Tres et al. (2014b) N = 2, 4, 6, 8, 12, 16	Autofunções explícitas N = 4, 8
σ_5					
0.5	0.359604	0.337412	0.2772	0.3042	
	0.358422	0.337707	0.3022	0.3206	0.212
	0.357414	0.339794	0.3041	0.3206	
	0.356678		0.3047	0.3205	0.196
	0.355885		0.3052	0.3207	
			0.3058	0.3213	
0.1	0.258802	0.239483	0.2049	0.2195	
	0.259150	0.241676	0.2173	0.2264	0.218
	0.259131	0.244032	0.2179	0.2260	
	0.259030		0.2182	0.2259	0.209
	0.258906		0.2187	0.2264	
			0.2193	0.2270	
0.05	0.250097	0.231102	0.1984	0.2120	
	0.250569	0.233421	0.2098	0.2183	0.217
	0.250636	0.235787	0.2104	0.2179	
	0.250591		0.2107	0.2179	0.209
	0.250529		0.2112	0.2183	
			0.2118	0.2189	

Tabela 5.2: Fluxo escalar $\phi(x, y)$ para $x = y = 0.7cm$

	Tsai e Loyalka (1976) N = 5, 7, 9, 11, 15	Tsai e Loyalka (1976) N = 4, 8, 16	Prolo Filho e Barichello (2013a) N = 2, 4, 6, 8, 12, 16	Tres et al. (2014b) N = 2, 4, 6, 8, 12, 16	Autofunções explícitas N = 4, 8
σ_5					
0.50	0.149801	0.157320	0.1992	0.2108	
	0.139050	0.139581	0.1935	0.1995	0.150
	0.138539	0.133426	0.1847	0.1901	
	0.138460		0.1787	0.1841	0.133
	0.137048		0.1728	0.1784	
		0.1702	0.1758		
0.10	0.093601	0.100591	0.1402	0.1446	
	0.083932	0.085131	0.1290	0.1305	0.143
	0.083759	0.078914	0.1210	0.1225	
	0.083911		0.1159	0.1176	0.129
	0.082774		0.1110	0.1129	
		0.1088	0.1107		
0.05	0.088990	0.095914	0.1350	0.1388	
	0.079448	0.080662	0.1234	0.1247	0.142
	0.079301	0.074448	0.1156	0.1169	
	0.079469		0.1106	0.1121	0.119
	0.078362		0.1058	0.1075	
		0.1037	0.1054		

Tabela 5.3: Fluxo escalar $\phi(x, y)$ para $x = y = 0.98cm$

	Tsai e Loyalka (1976) N = 5, 7, 9, 11, 15	Tsai e Loyalka (1976) N = 4, 8, 16	Prolo Filho e Barichello (2013a) N = 2, 4, 6, 8, 12, 16	Tres et al. (2014b) N = 2, 4, 6, 8, 12, 16	Autofunções explícitas N = 4, 8
σ_5					
0.50	0.054250	0.045536	0.1229	0.1124	
	0.053812	0.048085	0.1051	0.0924	0.087
	0.053558	0.052366	0.0975	0.0855	
	0.053442		0.0938	0.0825	0.074
	0.053413		0.0916	0.0810	
			0.0912	0.0808	
0.10	0.032577	0.025670	0.0832	0.0725	
	0.032669	0.028969	0.0663	0.0553	0.079
	0.032655	0.032432	0.0605	0.0505	
	0.032637		0.0579	0.0485	0.068
	0.032622		0.0565	0.0477	
			0.0563	0.0477	
0.05	0.030823	0.023777	0.0797	0.0690	
	0.030952	0.027299	0.0631	0.0523	0.078
	0.030956	0.030978	0.0574	0.0476	
	0.030945		0.0549	0.0458	0.065
	0.030931		0.0536	0.0450	
			0.0534	0.0450	

6 CONSIDERAÇÕES FINAIS E TRABALHOS FUTUROS

Neste trabalho, expressões explícitas em termos da variável espacial foram derivadas para a solução de uma aproximação nodal do problema bidimensional de transporte em ordenadas discretas, com a presença de fonte fixa. A proposta estende, para o caso de problemas multidimensionais heterogêneos e com espalhamento anisotrópico, o uso do método ADO. Diferentemente de abordagens feitas anteriormente, subdividiram-se regiões caracterizadas pelos mesmos parâmetros materiais (meios homogêneos), porém esquemas de varreduras não foram utilizados.

Durante o desenvolvimento deste estudo, algumas características da metodologia foram evidenciadas. Uma delas está relacionada à ordem dos problemas de autovalores, que é reduzida à metade quando comparada a outras abordagens baseadas no método de ordenadas discretas. Além disso, outros aspectos importantes, que podem ser relacionados ao baixo custo computacional, é a ausência de esquemas de varreduras e as soluções de sistemas lineares por métodos diretos.

Tais características foram comprovadas em duas abordagens distintas, utilizadas para representar os fluxos desconhecidos nos contornos que, como usual em esquemas nodais, surgem do processo de integração. Na primeira abordagem, foram utilizadas relações entre os fluxos médios integrados, simplificando o desenvolvimento da formulação, uma vez que os problemas unidimensionais permaneceram desacoplados. No entanto, nessa abordagem, parâmetros necessitam ser estimados. Devido a isso, outra abordagem foi proposta, em que aproximações por constantes foram utilizadas, sendo esses valores determinados através da solução de um sistema linear, acoplando os problemas unidimensionais nas direções x e y , como fisicamente se justifica.

Observou-se, através de ambas as metodologias utilizadas, que os resultados obtidos nesta pesquisa, apresentaram maior concordância com os publicados na literatura do que em meios homogêneos, cujos resultados disponíveis eram relativos a fluxos pontuais e não médios, obtidos por métodos que não têm característica nodal.

Assim, considera-se que os objetivos deste trabalho foram atingidos, uma vez que estendeu-se a formulação com caráter analítico, baseada no método ADO, juntamente com os métodos nodais, para o tratamento de modelos mais complexos, como os que incluem espalhamento anisotrópico e o caso de meios heterogêneos, tornando-a mais geral. Condições de contorno reflexivas foram incorporadas e duas abordagens distintas foram utilizadas para representar os fluxos desconhecidos nos contornos. Em ambas as abordagens, os códigos com-

putacionais foram de fácil implementação e foi possível obter resultados numéricos comparáveis com os da literatura, com baixo custo computacional. No que tange à abordagem utilizada neste estudo, em que os domínios foram subdivididos em regiões, constatou-se que um número menor de nodos foram necessários em comparação as malhas utilizadas em métodos nodais, cujos resultados estão disponíveis na literatura.

No final, pôde-se verificar que o uso do método ADO, aliado aos esquemas nodais, representa uma boa alternativa na solução de problemas bidimensionais de transporte de partículas. Além disso, de modo diferente do tratamento utilizado anteriormente, a divisão do domínio em nodos permitiu aplicar esta metodologia em problemas cujo domínio é composto por meios materiais distintos e com dimensões extensas. A divisão do domínio em regiões menores parece natural pelo fato de que se trabalha com grandezas medias.

No entanto, considera-se essa metodologia em desenvolvimento. Devido ao esquema de quadratura utilizado apresentar limitação (conjuntos de direções para pontos de quadratura maiores que 20 apresentam pesos negativos associados) investigações referentes a esquemas alternativos de quadratura, os quais possibilitam a geração de resultados para aproximações de mais alta ordem, bem como a introdução de equações auxiliares diferenciadas para aproximações dos fluxos desconhecidos do contorno estão sob investigação. Também é de interesse investigar a introdução da dependência energética em problemas bidimensionais de transporte. Além disso, investigações referentes ao efeito raio (Lewis e Miller, 1984), que consiste em uma limitação do método de ordenadas discretas, devido ao número finito de direções utilizadas não representar corretamente fontes localizadas ou meios absorvedores, não foram abordadas nesta pesquisa, podendo vir a ser considerado em outros trabalhos. O objetivo final é obter formulação que possa ser aplicada com confiança na solução de outros problemas de interesse.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Abbassi, M., Zolfaghari, A., Minucmehr, A., and Yousefi, M., 2011. An adaptive finite element approach for neutron transport equation, **Nuclear Engineering and Design**, vol. 241, pp. 2143–2154.

Abreu, M. P., 2005. A new spectral nodal method based on Larsen’s extended diamond approach, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 32, pp. 1594–1604.

Adamas, M. L. and Larsen, E. W., 2002. Fast iterative methods for discrete ordinates particle transport calculations, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 40, pp. 3–159.

Alcouffe, R. E., 2001. Partisn calculations of 3D radiation transport benchmarks for simple geometries with void regions, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 39(2), pp. 181–190.

Altaç, Z. and Tekkalmaz, M., 2013. Nodal synthetic kernel($N - SK_N$) method for solving radiative heat transfer problems in one- and two-dimensional participating medium with isotropic scattering, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, vol. 129, pp. 214–235.

Alves Filho, H., Silva, F. C., and Barros, R. C., 2002. A coarse-mesh numerical method for one-speed neutron transport eigenvalue problems in two-dimensional Cartesian geometry, **Applied Numerical Mathematics**, vol. 40, pp. 167–177.

Anderson, E., Bai, Z., Bischof, C., Blackford, S., Demmel, J., Dongarra, J., Du Croz, J., Greenbaum, A., Hammarling, S., McKenney, A., and Sorensen, D., 1999. **LAPACK Users’ guide**. SIAM, Philadelphia.

Avila, M., Codina, R., and Principe, J., 2011. Spatial approximation of the radiation transport equation using a subgrid-scale finite element method, **Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.**, vol. 200, pp. 425–438.

Azmy, Y. Y., 1988a. Comparison of Three Approximations to the Linear-Linear Nodal Transport Method in Weighted Diamond-Difference Form, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 100, pp. 190–200.

Azmy, Y. Y., 1988b, **Multidimensional linear-linear nodal transport methods in weighted diamond difference form**, volume 2, pages 1005–1019, Paris, França, Abril 27-30.

- Azmy, Y. Y., 1988c. The weighted diamond-difference form of nodal transport methods, **Nuclear Science Engineering**, vol. 98, pp. 29–40.
- Azmy, Y. Y., 1992a. Arbitrarily high order characteristic methods for solving the neutron transport equation, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 19, pp. 593–606.
- Azmy, Y. Y., 1992b. Performance and performance modeling of a parallel algorithm for solving the neutron transport equation, **The Journal of Supercomputing**, vol. 6, pp. 211–235.
- Azmy, Y. Y., 2004. Dort solutions to the two-dimensional C5G7 MOX benchmark problem, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 45, pp. 215–231.
- Azmy, Y. Y., 2014. **Private Communication**.
- Badruzzaman, A., 1985. An efficient algorithm for nodal-transport solutions in multidimensional geometry, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 89, pp. 281–290.
- Badruzzaman, A., 1986. Performance of three-dimensional nodal discrete ordinates methods, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 18, pp. 137–144.
- Badruzzaman, A., 1990. Nodal methods in transport theory, **Advances in Nuclear Science and Technology**, vol. 21, pp. 293–331.
- Badruzzaman, A. and Chiaromonte, J., 1987, **Application of nodal S_N methods to radiation transport nuclear well logging**, Paris.
- Baker, C. M. J., Buchan, A., Pain, C., Tollit, B., Eaton, M., and Warner, P., 2012. Quadratic inner element subgrid scale discretisation of the Boltzmann transport equation, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 45, pp. 124–137.
- Baker, C. M. J., Buchan, A. G., Pain, C. C., Farrell, P. E., Eaton, M. D., and Warner, P., 2013. Multimesh anisotropic adaptivity for the Boltzmann transport equation, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 53, pp. 411–426.
- Barichello, L. B., 1992. **Formulação analítica para soluções do problema de ordenada discreta unidimensional**. Tese de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre.

Barichello, L. B., 2011. **Explicit Formulations for Radiative Transfer Problems**. In: **Thermal Measurements and Inverse Techniques** (H. R. B. Orlande; O. Fudyin; D. Maillet; R. M. Cotta). CRC Press, Boca Raton.

Barichello, L. B., Cabrera, L. C., and Prolo Filho, J. F., 2009, **An analytical discrete ordinates solution for two dimensional problems based on nodal schemes**.

Barichello, L. B., Cabrera, L. C., and Prolo Filho, J. F., 2011. An analytical approach for a nodal scheme of two-dimensional neutron transport problems, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 38, pp. 1310–1317.

Barichello, L. B., da Cunha, R. D., Picoloto, C. B., and Tres, A., 2015. An analytical approach for a nodal formulation of a two-dimensional fixed-source neutron transport problem in heterogeneous medium, **Kerntechnik**, vol. 80(2), pp. 167–173.

Barichello, L. B., Garcia, R. D. M., and Siewert, C. E., 2000. Particular solution for the discrete-ordinates method, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 64, pp. 219–226.

Barichello, L. B. and Siewert, C. E., 1999. A discrete-ordinates solution for a non-grey model with complete frequency redistribution, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 62, pp. 645–675.

Barros, R., Alves Filho, H., Platt, G. M., Oliveira, F. B. S., and Militão, D. S., 2010. Analytical reconstruction scheme for the coarse-mesh solution generated by the spectral nodal method for neutral particle discrete ordinates transport model in slab geometry, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 37, pp. 1461–1466.

Barros, R., Alves Filho, H., Silva, F. C., H. C. G., Orellana, E. T. V., Couto, N., and Dominguez, D. S., 2003. The application of spectral nodal methods to discrete ordinates and diffusion problems in cartesian geometry for neutron multiplying systems, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 42, pp. 385–462.

Barros, R., da Silva, F. C., and Alves Filho, H., 1999. Recent advances in spectral nodal method for X,Y-geometry discrete ordinates deep penetration and eigenvalue problems, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 35, pp. 293–331.

- Barros, R. and Larsen, E. W., 1990. A Numerical Method for One-Group Slab-Geometry Discrete Ordinates Problems with no Spatial Truncation Error, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 104, pp. 199–208.
- Barros, R. and Larsen, E. W., 1991, **A spectral nodal method for the solution of the S_N equation in X,Y-geometry for highly absorbing deep penetration problems**, Atibaia, SP.
- Barros, R. and Larsen, E. W., 1992. A spectral nodal method for one-group X,Y-geometry discrete ordinates problems, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 111, pp. 34–45.
- Barros, R., Yavuz, M., Abreu, M. P., Alves Filho, H., and Mello, J. A. M., 1998. Progress in spectral nodal methods applied to discrete ordinates transport problems, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 33, pp. 117–154.
- Bekar, K. B. and Azmy, Y. Y., 2009. TORT solutions to the NEA suite of the benchmarks for 3D transport methods and codes over a range in parameter space, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 36, pp. 368–374.
- Bell, G. and Glasstone, S., 1970. **Nuclear Reactor Theory**. Van Nostrand Reinhold Co, New York.
- Boltzmann, L., 1872. Weitere studien über das wärmeleichgewicht unter gas molekülen, **Sitzungsberichte Akademie der Wissenschaften**, vol. 60, pp. 275–376.
- Borges, V., Fernandes, J. C., Bodmann, B. E., Vilhena, M. T., and Rodriguez, B., 2012. A closed-form formulation for the build-up factor and absorbed energy for photons and electrons in the compton energy range in cartesian geometry, **World Journal of Nuclear Science and Technology**, vol. 2.
- Brockmann, H., 1866. **Improved treatment of two-dimensional neutral particle transport through voids within the discrete ordinates method by use of generalized view factors**. U. OHLIG, Jülich.
- Büyükköçak, S., Özer, M. B., and Çetin, B., 2014. Numerical modeling of ultrasonic particle manipulation for microfluidic applications, **Microfluid Nanofluid**, vol. 17, pp. 1025–1037.

- Cabrera, L. C., 2009. **Solução espectral para modelos bidimensionais da equação linear de Boltzmann**. Tese de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Matemática, UFRGS, Porto Alegre.
- Cacuci, D. G., 2010. **Handbook of nuclear engineering**. Springer, New York.
- Camargo, M., 2003. **Soluções unificadas para modelos com frequência de colisão variável da dinâmica de gases rarefeitos**. Tese de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre.
- Capilla, M., Talavera, C. F., Ginestar, D., and Verdú, G., 2012. Application of a nodal collocation approximation for the multidimensional P_L equations to the 3D Takeda benchmark problems, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 40, pp. 1–13.
- Carlson, B. G. and Lee, C. E., 1961. **Mechanical Quadrature and the Transport Equation**. Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos.
- Case, K. and Zweifel, P., 1967. **Linear transport theory**. Addison Wesley, Reading, MA.
- Chandrasekhar, S., 1950. **Radiative transfer**. Oxford University Press, London.
- Chen, A. X., Antolak, A. J., and Leung, K. N., 2012. Electronic neutron sources for compensated porosity well logging, **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A**, vol. 684, pp. 52–56.
- Chen, G. S. and Sheu, R. D., 2004. Application of two preconditioned generalized conjugate gradient methods to three-dimensional neutron and photon transport equations, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 45, pp. 11–23.
- Cho, J. Y. and Joo, H. G., 2006. Solution of the C5G7MOX benchmark three-dimensional extension problems by the DeCART direct whole core calculation code, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 48, pp. 456–466.
- da Cunha, R. D., Tres, A., and Barichello, L. B., 2015, **A Study on the parallel, iterative solution of systems of linear equations appearing on analytical nodal schemes for two dimensional cartesian geometry discrete ordinates problems**, Nashville, TN, USA.
- Dahl, J. A., 2006. PARTISN results for the OECD/NEA 3-D extension C5G7 MOX benchmark, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 48, pp. 401–409.

- Datta, B. N., 1995. **Numerical Linear Algebra and Applications**. Brooks/Cole Publishing Co, Pacific Grove, USA.
- Doicu, A. and Trautmann, T., 2009. Discrete-ordinate method with matrix exponential for a pseudo-spherical atmosphere: scalar case, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 110, pp. 146–158.
- Dombrovsky, L. A., Timchenko, V., Jackson, M., and Yeoh, G. H., 2011. A combined transient thermal model for laser hyperthermia of tumors with embedded gold nanoshells, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 54, pp. 5459–5469.
- Dominguez, D. S., 2006. **Método espectro-nodal linear para problemas de transporte de nêutrons na formulação de ordenadas discretas em geometria bidimensional cartesiana**. Tese de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, UERJ, Rio de Janeiro.
- Dominguez, D. S., Hernandez, C. R. G., and Barros, R. C., 2010a. Spectral nodal method for numerically solving two-energy group X, Y geometry neutron diffusion eigenvalue, **International Journal of Nuclear Energy Science and Technology**, vol. 5, pp. 66–79.
- Dominguez, D. S., Iglesias, S. M., and Barros, R. C., 2005, **Reconstrução analítica intro-nodal do fluxo escalar de nêutrons com o método espectro-nodal constante**, Rio de Janeiro, RJ.
- Dominguez, D. S., Oliveira, F. B. S., Alves Filho, H., and Barros, R. C., 2010b. Composite spatial grid spectral nodal method for one-speed discrete ordinates deep penetration problems in X, Y geometry, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 52, pp. 298–303.
- Duderstadt, J. and Hamilton, L. J., 1976. **Nuclear reactor analysis**. John Wiley e Sons, New York.
- Duo, J. I. and Azmy, Y. Y., 2009. Spatial convergence study of discrete ordinates methods via the singular characteristic tracking algorithm, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 162, pp. 41–55.
- Duo, J. I., Azmy, Y. Y., and Zikatanov, L. T., 2009. A posteriori error estimator and AMR for discrete ordinates nodal transport methods, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 36, pp. 268–273.

- Ferrer, R. M. and Azmy, Y. Y., 2009, **A robust arbitrarily high order transport method of the characteristic type for unstructured tetrahedral grids**, New York.
- Ganapol, B. D., 2008. **Analytical Benchmarks for Nuclear Engineering Applications - Case Studies in Neutron Transport Theory**. Nuclear energy agency.
- Garcia, R. D. M., 2002. **Métodos para solução da equação de transporte de partículas integro-diferencial**. Escola de verão em teoria de transporte de partículas nêutras, PUC, Porto Alegre.
- Garcia, R. D. M. and Siewert, C. E., 2004. The McCormack model for gas mixtures: Heat transfer in a plane channel, **Physics of Fluids**, vol. 16, pp. 3393–3402.
- Günay, M., Sarer, B., and Hançerliogullari, A., 2013. Three-dimensional Monte Carlo calculation of gas production in structural material of APEX reactor for some evaluated data file, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 55, pp. 292–296.
- González, M., Fernández, C. G., and Velarde, P., 2009. 2D numerical comparison between S_N and M_1 radiation transport methods, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 36, pp. 886–895.
- Grandjean, P. and Siewert, C. E., 1979. The F_N method in neutron-transport theory. Part II: Applications and numerical results, **Nuclear Science and engineering**, vol. 69, pp. 161–168.
- Hall, S. K., Eaton, M. D., and Knight, M. P., 2013. The implementation of a simplified spherical harmonics semi-analytic nodal method in PANTHER, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 57, pp. 280–293.
- Han, T. Y., Joo, H. G., Lee, H. C., and Kim, C. H., 2008. Multi-group unified nodal method with two-group coarse-mesh finite difference formulation, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 35, pp. 1975–1985.
- Hennart, J. and Valle, E., 2010. Nodal finite element approximations for the neutron transport equations, **Mathematics and Computers in Simulation**, vol. 80, pp. 2168–2176.
- Hong, S. G., 2013. Two subcell balance methods for solving the multigroup discrete ordinates transport equation with tetrahedral meshes, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 173, pp. 101–117.

- Hu, B. X., Wu, Y. W., Tian, W. X., Su, G. H., and Qiu, S. Z., 2013. Development of a transient thermal-hydraulic code for analysis of China Demonstration Fast Reactor, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 55, pp. 302–311.
- Ijasan, O., Torres-Verdín, C., and Preeg, W. E., 2013. Fast modeling of borehole neutron porosity measurements with a new spatial transport-diffusion approximation, **Geophysics**, vol. 78(3), pp. D151–D168.
- Jenal, J. P., Erickson, P. J., Rhoades, W. A., Simpson, D. B., and Williams, M. L., 1977. **The generation of a computer library for discrete ordinates quadrature sets**. Tennessee.
- Ju, H. T., Wu, H. C., Zhou, Y. Q., Cao, L. Z., Yao, D., and Xian, C. Y., 2007. A least-squares finite-element S_N method for solving first-order neutron transport equation, **Nuclear Engineering and Design**, vol. 237, pp. 823–829.
- Kim, H. C., Han, C. Y., and Kim, J. K., 2004. TWODANT solutions for the 2-D C5G7 MOX benchmark, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 45(2-4), pp. 201–213.
- Kim, H. C., Han, C. Y., and Kim, J. K., 2006. THREEDANT calculations for the 3D extension C5G7 MOX benchmark, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 48, pp. 424–431.
- Klingensmith, J. J., Azmy, Y., Gehin, J. C., and Orsi, R., 2006. Tort solution to the three-dimensional MOX benchmark, 3-D Extension C5G7 MOX, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 48, pp. 445–455.
- Klose, A. D. and Hielscher, A. H., 2002. Optical tomography using the time-independent equation of radiative transfer, Part 2: inverse model, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, vol. 72, pp. 715–732.
- Klose, A. D. and Larsen, E. W., 2006. Light transport in biological tissue based on the simplified spherical harmonics equations, **Journal of Computational Physics**, vol. 220, pp. 441–470.
- Klose, A. D., Netz, U., Beuthan, J., and Hielscher, A. H., 2002. Optical tomography using the time-independent equation of radiative transfer, Part 1: forward model, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, vol. 72, pp. 691–713.
- Kobayashi, K. and Sugimura, N., 2001. 3D radiation transport benchmark problems and results for simple geometries with void region, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 39(2), pp. 119–144.

- Kock, R. and Becker, R., 2004. Evaluation of quadrature schemes for the discrete ordinates method, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 84, pp. 423–435.
- Konno, C., 2001. TORT solutions with FNSUNCL3 for Kobayashi's 3D benchmarks, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 39(2), pp. 167–179.
- Lathrop, K. D., 1968. **TWOTRAN - A Fortran Program for Two Dimensional Transport**. GA-87v7, Gulf General Atomic.
- Lee, C. E., 1962. **The discrete S_N approximation to transport theory**. Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos.
- Lee, G. S. and Cho, N. Z., 2006. 2D/1D fusion method solutions of the three-dimensional transport OECD benchmark problem C5G7 MOX, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 48, pp. 410–423.
- Lewis, E. and Miller, W., 1984. **Computational methods of neutron transport**. John Wiley and Sons, New York.
- Lewis, E., Miller, W., and Henry, T. P., 1975. A two-dimensional finite element method for integral neutron transport calculations, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 58, pp. 203–212.
- Lozano, J. A., García-Herranz, N., Ahnert, C., and Aragonés, J. M., 2008. The analytic nodal diffusion solver ANDES in multigroups for 3D rectangular geometry: Development and performance analysis, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 35, pp. 2365–2374.
- Lu, H., Wu, H., Cao, L., Zhou, Y., Xian, C., and Yao, D., 2007. Two-dimensional nodal transport method for triangular geometry, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 34, pp. 424–432.
- Maurenente, A., Lamien, B., Orlande, H. R. B., and Eliçabe, G. E., 2013, **Analysis of the P1-approximation for the radiative heat transfer in skin tissues loaded with nanoparticles**, Ribeirão Preto, SP.
- Mello, J. A. M. and Barros, R. C., 2002. An exponential spectral nodal method for one-speed X, Y-geometry deep penetration discrete ordinates problems, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 29, pp. 1855–1869.

- Menezes, W. A., Alves Filho, H., Barros, R. C., Moraes, C. S., and Dominguez, D. S., 2013. Analytical spatial reconstruction scheme for the coarse-mesh solutions generated by the constant spectral nodal method for monoenergetic discrete ordinates transport calculations in X,Y geometry fission-chain reacting systems, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 53, pp. 274–279.
- Mervin, B. T., Mosher, S. W., Wagner, J. C., and Maldonado, G. I., 2013. Uncertainty Underprediction in Monte Carlo Eigenvalue Calculations, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 3, pp. 276–292.
- Mika, J. R., 1961. Neutron Transport with Anisotropic Scattering, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 11, pp. 415–427.
- Mikata, Y., 2014. Exact analytical solution of time-independent neutron transport equation, and its applications to systems with a point source, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 64, pp. 152–155.
- Militão, D. S., Alves Filho, H., and Barros, R. C., 2012. A numerical method for monoenergetic slab-geometry fixed-source adjoint transport problems in the discrete ordinates formulation with no spatial truncation error, **Int. J. of Nuclear Energy Science and Technology**, vol. 7, pp. 151–165.
- Mishra, S. C., Kim, M. Y., and Maruyama, S., 2012a. Performance evaluation of four radiative transfer methods in solving multi-dimensional radiation and/or conduction heat transfer problems, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 55, pp. 5819–5835.
- Mishra, S. C. and Krishna, C. H., 2011. Analysis of radiative transport in a cylindrical enclosure - An application of the modified discrete ordinate method, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, vol. 112, pp. 1065–1081.
- Mishra, S. C., Muthukumaran, R., and Maruyama, S., 2012b. Comparison of the thermal effects of the transport of a short-pulse laser and a multi-pulse laser through a participating medium, **International Journal of Heat and Mass Transfer**, vol. 55, pp. 5583–5596.
- Mishra, S. C., Roy, H. K., and Misra, N., 2006. Discrete ordinate method with a new and simple quadrature scheme, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 101, pp. 249–262.
- Modest, M. F., 1993. **Radiative heat transfer**. McGraw-Hill, New York.

- Mosher, S. W., Maucec, M., Spanier, J., Badruzzaman, A., Chedester, C., and Evans, M., 2010. Expected-value techniques for Monte Carlo modeling of well logging problems, **Nuclear Instruments and Methods in Physics Research**, vol. 613, pp. 334–341.
- Oberkampf, W. L. and Trucano, T. G., 2008. Verification and validation benchmarks, **Nuclear Engineering and Design**, vol. 238, pp. 716–743.
- Park, H. J., Shim, H. J., Joo, H. G., and Kim, C. H., 2012. Discrete ordinate method with a new and simple quadrature scheme, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 172, pp. 66–77.
- Patra, A. and Saha Ray, S., 2014. Two-dimensional Haar wavelet Collocation Method for the solution of Stationary Neutron Transport Equation in a homogeneous isotropic medium, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 70, pp. 30–35.
- Pautz, A., 2004. Results on the OECD/NEA C5G7-MOX benchmark obtained with the discrete ordinates code DORT, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 45(2–4), pp. 153–168.
- Picoloto, C. B., 2013. **Formulações espectralnodais em cálculos neutrônicos multidimensionais**. Qualificação de Doutorado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS.
- Picoloto, C. B., Rodrigues, P., Cunha, R. D., and Barichello, L. B., 2014, **Sistemas derivados de esquemas nodais em problemas bidimensionais de transporte de partículas: uma análise espectral**, Natal, RN.
- Picoloto, C. B., Tres, A., da Cunha, R. D., and Barichello, L. B., 2013, **Two-dimensional neutron transport problems with reflective boundary conditions: an analytical approach**, Recife, PE.
- Pirouzmand, A. and Hadad, K., 2011. Cellular neural network to the spherical harmonics approximation of neutron transport equation in x-y geometry. Part I: Modeling and verification for time independent solution, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 38, pp. 1288–1299.
- Poursalehi, N., Zolfaghari, A., and Minucmehr, A., 2013. An adaptive mesh refinement approach for average current nodal expansion method in 2-D rectangular geometry, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 55, pp. 61–70.
- Prinsloo, R. H. and Tomasevic, D. I., 2008. The analytic nodal method in cylindrical geometry, **Nuclear Engineering and Design**, vol. 238, pp. 2898–2907.

Prolo Filho, J. F., 2007. **A equação de Boltzmann e a modelagem de fluidos em micro e macroescalas**. Dissertação de mestrado do Programa de Pós-Graduação em Matemática, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS.

Prolo Filho, J. F., 2011. **Abordagens espectral-nodais para modelos multidimensionais em transporte de partículas**. Tese de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Matemática, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS.

Prolo Filho, J. F. and Barichello, L. B., 2013a, **An analytical discrete ordinates solution for a nodal model of a two-dimensional neutron transport problem**, Santa Fe, NM, USA.

Prolo Filho, J. F. and Barichello, L. B., 2013b, **General Expressions for Auxiliary Equations in Nodal Formulations**, Santa Fe, NM, USA.

Prolo Filho, J. F. and Barichello, L. B., 2014. General Expressions for Auxiliary Equations of a Nodal Formulation for Two-Dimensional Transport Calculations, **Journal of Computational and Theoretical Transport**, vol. 43, pp. 1–22.

Scherer, C. S. and Barichello, L. B., 2010. An analytical approach to the unified solution of kinetic equations in rarefied gas dynamics. III. Evaporation and condensation problems, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik (Printed ed.)**, vol. 61, pp. 95–117.

Scherer, C. S., Prolo Filho, J. F., and Barichello, L. B., 2009a. An analytical approach to the unified solution of kinetic equations in rarefied gas dynamics. I. Flow problems, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, vol. 60, pp. 70–115.

Scherer, C. S., Prolo Filho, J. F., and Barichello, L. B., 2009b. An analytical approach to the unified solution of kinetic equations in the rarefied gas dynamics. II. Heat transfer problems, **Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik**, vol. 60, pp. 651–687.

Schweiger, M., Arridge, S. R., Hiraoka, M., and Delpy, D. T., 1995. The finite element method for the propagation of light in scattering media: Boundary and source conditions, **Medical Physics**, vol. 22, pp. 1779–1792.

Seubert, A., Zwermann, W., and Langenbuch, S., 2006. Solution of the C5G7 3D extension benchmark by the S_N code TORT, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 48, pp. 432–438.

- Shulin, Y. and Weidong, S., 2004. The parallel iteration algorithms for the two-dimensional unsteady neutron transport equations, **Communications in Nonlinear Science and Numerical Simulation**, vol. 9, pp. 209–216.
- Shultis, J. K. and Myneni, R. B., 1988. Radiative transfer in vegetation canopies with anisotropic scattering, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, vol. 39, pp. 115–129.
- Siewert, C. E., 1978. The F_N method for solving radiative-transfer problems in plane geometry, **Astrophysics and Space Science**, vol. 58, pp. 131–137.
- Siewert, C. E., 1979. The F_N method in Neutron-Transport Theory. Part I: Theory and Applications, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 69, pp. 156–160.
- Siewert, C. E., 2000. A concise and accurate solution to Chandrasekhar’s basic problem in radiative transfer, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, vol. 64, pp. 109–130.
- Siewert, C. E., 2005. The McCormack model for gas mixture: the temperature jump problem, **Z. Angew. Math. Phys.**, vol. 56, pp. 273–292.
- Siewert, C. E. and Valougeorgis, D., 2002. An analytical discrete-ordinates solution of the S-model kinetic equations for flow in a cylindrical tube, **Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer**, vol. 72, pp. 531–550.
- Sood, A., Forster, R. A., and Parsons, D. K., 2003. Analytical Benchmark Test Set For Criticality Code Verification, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 42(1), pp. 55–106.
- Suragan, D., 2013. On eigenvalue problems of the one-speed neutron transport equation for isotropic scattering, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 62, pp. 468–470.
- Su’ud, Z., 2008. Safety performance comparison of MOX, nitride and metallic fuel based 25 – 100 MWe Pb – Bi cooled long life fast reactors without on-site refuelling, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 50, pp. 157–162.
- Talamo, A., 2013. Numerical solution of the time dependent neutron transport equation by the method of the characteristics, **Journal of Computational Physics**, vol. 240, pp. 248–267.
- Tres, A., Becker, C., Cunha, R. D., and Barichello, L. B., 2013, **A deterministic approach for neutron transport in two-dimensional domains**, Ribeirão Preto, SP.

Tres, A., Picoloto, C. B., Barichello, L. B., and Cunha, R. D., 2014a, **Uma solução particular baseada em funções de Green para formulações nodais derivadas da equação de transporte bidimensional**, Curitiba, PR.

Tres, A., Picoloto, C. B., Prolo Filho, J. F., da Cunha, R. D., and Barichello, L. B., 2014b. Explicit formulation of a nodal transport method for discrete ordinates calculations in two-dimensional fixed-source problems, **Kerntechnik**, vol. 79, pp. 155–162.

Tsai, R. W. and Loyalka, S. K., 1976. A numerical method for solving integral equations of neutron transport - III, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 59, pp. 536–540.

Vilhena, M. T. and Barichello, L. B., 1991. A New Analytical Approach To Solve The Neutron Transport Equation, **Kerntechnik**, vol. 56, pp. 334–336.

Vilhena, M. T., Barichello, L. B., Zabadal, J. R., Segatto, C. F., Cardona, A. V., and Pazos, R. P., 1999. Solutions to the multidimensional linear transport equation by the spectral method, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 35, pp. 275–291.

Vilhena, M. T., Thompson, M., Pazos, R. P., and Ourique, L. E., 2003. Qualitative analysis of the S_N approximations of the transport equation and combined conduction-radiation heat transfer problem in a slab, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 42, pp. 427–437.

Vyawahare, V. A. and Nataraj, P. S. V., 2013. Fractional-order modeling of neutron transport in a nuclear reactor, **Applied Mathematical Modelling**, vol. 37, pp. 9747–9767.

Wagner, J. C., Mosher, S. W., Evans, T. M., Peplow, D. E., and Turner, J. A., 2011. Hybrid and parallel domain-decomposition methods development to enable Monte Carlo for reactor analyses, **Progress in Nuclear Science and Technology**, vol. 2, pp. 815–820.

Walters, F. W. and O'Dell, R. D., 1981, **Nodal methods for discrete ordinates transport problems in (x,y) geometry**, Munique, Alemanha.

Walters, W. F., 1986. The relation between finite element methods and nodal methods in transport theory, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 53, pp. 21–26.

Wang, D., Li, F., Guo, J., Wei, J., Zhang, J., and Hao, C., 2010. Improved nodal expansion method for solving neutron diffusion equation in cylindrical geometry, **Nuclear Engineering and Design**, vol. 240, pp. 1997–2004.

- Wang, K., Rineiski, A., Maschek, W., Wu, H., and Cao, L., 2013. Neutron transport model based on the transmission probability method, **Energy Conversion and Management**, vol. 72, pp. 33–38.
- Wick, G. C., 1943. Über ebene diffusions problem, **Z. Phys**, vol. 120, pp. 702–705.
- Williams, M. M. R., 2013. Exact solutions of the two-dimensional cell problem, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 173, pp. 182–196.
- Wu, H., Liu, G., Cao, L., and Chen, Q., 2010. Determinant methods for solving neutron transport equation in unstructured geometry, **International Conference on Nuclear Engineering**, pages 2–5.
- Zhang, J. T., Xie, Z. S., Ma, Y. C., Zhong, Z. Q., and Yue, A. Z., 1998. Numerical simulation of three-dimensional neutron-neutron well-logging, **Acta Geophysica Sinica**, vol. 41, pp. 712–719.
- Zhao, J. M., Tan, J. Y., and Liu, L. H., 2013. A second order radiative transfer equation and its solution by meshless method with application to strongly inhomogeneous media, **Journal of Computational Physics**, vol. 232, pp. 431–455.
- Zheng, Y., Wu, H., and Cao, L., 2012. Application of the wavelet expansion method in spatial-angular discretization of the neutron transport equation, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 43, pp. 31–38.
- Zimin, V. G. and Baturin, D. M., 2002. Polynomial nodal method for solving neutron diffusion equations in hexagonal-z geometry, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 29, pp. 1105–1117.