

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

**Soluções Iterativas de Sistemas Lineares
Esparsos Derivados de Formulações Nodais
da Equação de Transporte de Partículas
Bidimensional**

por

Francisco Wagner de Moura

Dissertação submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de
Mestre em Matemática Aplicada

Prof^ª. Dr^ª. Liliane Basso Barichello
Orientadora

Porto Alegre, Junho de 2018.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

de Moura, Francisco Wagner

Soluções Iterativas de Sistemas Lineares Esparsos Derivados de Formulações Nodais da Equação de Transporte de Partículas Bidimensional / Francisco Wagner de Moura.— Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2018.

88 p.: il.

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

Orientadora: Barichello, Liliane Basso

Dissertação: Matemática Aplicada,
Teoria de Transporte

Soluções Iterativas de Sistemas Lineares Esparsos Derivados de Formulações Nodais da Equação de Transporte de Partículas Bidimensional

por

Francisco Wagner de Moura

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

Mestre em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Teoria de Transporte de Partículas

Orientadora: Prof^a. Dr^a. Liliane Basso Barichello

Banca examinadora:

Dr^a. Regina Célia Cerqueira Leite
Laboratório Nacional de Computação Científica

Prof^a. Dr^a. Patricia Rodrigues Fortes
UFSM - Frederico Westphalen

Prof. Dr. Rudnei Dias da Cunha
Instituto de Matemática e Estatística - UFRGS

Dissertação apresentada e aprovada em
Junho de 2018.

Prof. Dr. Carlos Hoppen
Coordenador

*“Faith’s shield is
hammered out by the
blows of unbelievers.”*

AGRADECIMENTOS

Primeiramente, agradeço à minha orientadora por toda a paciência com este aluno nada exemplar.

Agradeço a meus pais pelo incentivo, amor e suporte sempre.

Aos amigos que estiveram ao meu lado quando precisei, obrigado.

Sumário

LISTA DE FIGURAS	viii
LISTA DE TABELAS	ix
LISTA DE SIGLAS	x
LISTA DE SÍMBOLOS	xi
RESUMO	xiii
ABSTRACT	xiv
1 INTRODUÇÃO	1
2 MÉTODOS ITERATIVOS PARA SOLUÇÃO DE SISTEMAS LINEARES	7
2.1 Método do Resíduo Mínimo Generalizado (<i>GMRES</i>)	10
2.1.1 <i>GMRES</i> Reinicializado	13
2.1.2 <i>LGMRES</i>	13
2.2 Pré-condicionadores	14
3 APROXIMAÇÃO EM ORDENADAS DISCRETAS DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE PARTÍCULAS	16
3.1 Método de Ordenadas Discretas	18
3.2 Esquemas Numéricos de Quadraturas	18
3.2.1 Quadratura Simétrica de Nível	19
3.2.2 Conjunto de Quadraturas Legendre-Chebyshev	21
3.2.2.1 Quadratura Legendre-Chebyshev Quadrangular	22
3.2.2.2 Quadratura Legendre-Chebyshev Triangular	23
3.2.3 Quadratura Quadruple Range	25

4	FORMULAÇÃO NODAL PARA A EQUAÇÃO BIDIMENSIONAL DE TRANSPORTE	27
4.1	Equações Nodais	28
4.2	Equações Nodais Unidimensionais	30
4.3	O Método ADO em Problemas Bidimensionais	32
4.4	Solução Geral em Problemas de Fonte-Fixa	35
5	RESULTADOS	38
5.1	Problema 1	41
5.2	Problema 2	49
5.3	Problema 3	55
6	CONCLUSÕES	73
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	75

Lista de Figuras

3.1	Distribuição de direções na quadratura LQ_N para $N = 8$	20
3.2	Configuração dos pesos por octantes, para $N = 2, 4, 6, 8$ e 10	21
3.3	Distribuição de direções na quadratura $P_N T_N$ para $N = 6$	23
3.4	Distribuição de direções na quadratura $P_N T_N S_N$ para $N = 6$	25
5.1	Estrutura e autovalores das matrizes presentes em [32]	40
5.2	Geometria do problema 1.	42
5.3	Estrutura e autovalores das matrizes do Problema 1.	43
5.4	Geometria do problema 2.	50
5.5	Estrutura e autovalores das matrizes do Problema 2.	51
5.6	Geometria do problema 3.	56
5.7	Estrutura e autovalores das matrizes do Problema 3.	57

Lista de Tabelas

5.1	Problema 1, quadratura LQ_N	44
5.2	Problema 1, quadratura $P_N T_N$	45
5.3	Problema 1, quadratura $P_N T_N S_N$	46
5.4	Problema 1, quadratura QR	47
5.5	Problema 2, quadratura LQ_N	51
5.6	Problema 2, quadratura $P_N T_N$	52
5.7	Problema 2, quadratura $P_N T_N S_N$	53
5.8	Problema 2, quadratura QR	54
5.9	Problema 3, quadratura LQ_N , malha 6×6	58
5.10	Problema 3, quadratura LQ_N , malha 15×15	59
5.11	Problema 3, quadratura LQ_N , malha 30×30	60
5.12	Problema 3, quadratura $P_N T_N S_N$, malha 6×6	61
5.13	Problema 3, quadratura $P_N T_N S_N$, malha 15×15	62
5.14	Problema 3, quadratura $P_N T_N S_N$, malha 30×30	63
5.15	Problema 3, quadratura $P_N T_N$, malha 6×6	64
5.16	Problema 3, quadratura $P_N T_N$, malha 15×15	65
5.17	Problema 3, quadratura $P_N T_N$, malha 30×30	66
5.18	Problema 3, quadratura QR , malha 6×6	68
5.19	Problema 3, quadratura QR , malha 15×15	69
5.20	Problema 3, quadratura QR , malha 30×30	70
5.21	Fluxo Escalar Médio por regiões	72

LISTA DE SIGLAS

<i>ADO</i>	<i>Analytical Discrete Ordinates Method</i>
<i>AHOT</i>	<i>Arbitrarily High Order Transport Method</i>
<i>DISORT</i>	<i>Discrete Ordinate Radiative Transfer Method</i>
<i>GMRES</i>	<i>Generalized Minimal Residual Method</i>
<i>GMRES(m)</i>	<i>reinitialized Generalized Minimal Residual Method</i>
<i>LGMRES(m, l)</i>	<i>Loose Generalized Minimal Residual Method</i>
<i>MINRES</i>	<i>Minimal Residual Method</i>
<i>LQ_N</i>	cuadratura de nivel simétrica (<i>Level Symmetric</i>)
<i>P_NT_N</i>	cuadratura cuadrangular de Legendre-Chebyshev
<i>P_NT_NS_N</i>	cuadratura triangular de Legendre-Chebyshev
<i>QR</i>	cuadratura <i>Quadruple Range</i>
<i>EQ_N</i>	cuadratura <i>Equal Weight</i>
<i>UE_N</i>	cuadratura <i>Uniform and Equal-Weight</i>
<i>UG_N</i>	cuadratura <i>Uniform and Gauss-Weight</i>

LISTA DE SÍMBOLOS

\mathbb{R}^n	Espaço vetorial real de dimensão n
\mathcal{K}_m	Subespaço vetorial de Krylov de dimensão m
m	Dimensão do subespaço de Krylov utilizado no GMRES
l	Número de vetores adicionados à base, utilizado no LGMRES
\vec{r}	Vetor posição da partícula.
$\vec{\Omega}$	Vetor unitário na direção da velocidade da partícula
ϕ	Ângulo azimutal, $0 \leq \phi \leq 2\pi$
θ	Ângulo polar, $0 \leq \theta \leq \pi$
Ψ	Fluxo angular de partículas
E	Energia cinética
σ_t	Seção de choque macroscópica total
σ_s	Seção de choque macroscópica de espalhamento
Q	Termo de fonte externa de nêutrons
N	Ordem de quadratura bidimensional
P_N	Polinômio de Legendre de grau N
T_N	Polinômio de Chebyshev de grau N
N_ϕ	Ordem da quadratura unidimensional da variável azimutal (QR)
N_θ	Ordem da quadratura unidimensional da variável polar (QR)
M	Número de ordenadas discretas por octante

$\vec{\Omega}_m$	Ordenada discreta na direção da velocidade da partícula
k	Número de iterações até convergência do método
t	Tempo (em segundos) até convergência do método
T	Tempo total (em segundos) da simulação numérica

RESUMO

Neste trabalho, métodos numéricos iterativos foram usados na solução de sistemas esparsos de equações lineares. Em particular, foram utilizados métodos baseados em subespaços de Krylov como o GMRES e suas variações. Esses sistemas, de alta ordem e esparsos, são provenientes da aplicação do método de Ordenadas Discretas Analítico (ADO) juntamente com formulações nodais para solução de problemas bidimensionais de transporte de partículas. Na abordagem ADO-nodal, a solução geral das equações integradas depende de constantes arbitrárias que devem ser determinadas a partir do sistema gerado principalmente pela aplicação de condições de contorno do problema. Especial relevância na geração de tais sistemas é o tipo de esquema de quadratura utilizado para representar as direções discretas das partículas. Pré-condicionadores foram aplicados aos sistemas, que então foram resolvidos através de métodos numéricos iterativos com o objetivo de verificar a influência dos esquemas de quadratura na estrutura e caracterização das matrizes do sistema. Os resultados obtidos nas diferentes simulações numéricas foram comparados em termos de tempo computacional e número de iterações para a convergência dos métodos e indicam que o uso de esquemas de quadratura não clássicos é efetivo, além de mostrar que a aplicação de métodos iterativos permite lidar com sistemas de ordens bastante superiores aos casos diretos.

ABSTRACT

In this work, numerical iterative methods were used to solve sparse systems of linear equations. Particularly, methods based on Krylov subspaces such as GMRES and its variations were used. These high order and sparse systems arise from the application of the Analytical Discrete Ordinates method (ADO) along with nodal formulations for solving bidimensional particles transport problems. In the ADO-nodal approach, the general solution of the integrated equations depends on arbitrary constants that must be determined via the linear system that is generated mainly from the use of the problem's boundary conditions. In the generation of such systems, special importance is given to the type of quadrature scheme utilized to represent the discrete directions of the particles. Preconditioners were applied to the systems and these were solved through numerical iterative methods, being the goal to verify the influence that those quadrature schemes have over the structure and characterization of the systems themselves. The results obtained in numerical simulations were compared for values such as computational time and number of iterations until convergence and show that the use of iterative methods allows for handling systems with orders much higher than the direct case.

1 INTRODUÇÃO

Durante seus estudos na teoria cinética de gases, o físico austríaco Ludwig Boltzmann, em 1872, desenvolveu o que passou a ser conhecido em diversos ramos da ciência como a Equação de Boltzmann [24]. A equação de Boltzmann é usada para modelar matematicamente vários fenômenos [22, 27, 28, 71] e suas aplicações, incluindo a forma linear e linearizada, se estendem a reatores nucleares [35, 59, 100], proteção radiológica e medicina nuclear [3, 106], transporte de radiação [29, 45, 50], dinâmica de gases rarefeitos [44, 58, 83, 90], estudos aerodinâmicos [37] e equipamentos de vácuo [89], entre outros. Em sua forma original, a Equação de Boltzmann é uma equação integro-diferencial e fornece uma descrição quantitativa da distribuição espacial, direcional, energética e temporal de partículas em meios materiais [43].

O tratamento analítico da Equação de Boltzmann é geralmente muito complexo e métodos como o proposto por Kenneth M. Case em 1960, método das soluções elementares [26, 43], podem ser utilizados apenas em casos idealizados. Durante as últimas décadas muitos outros métodos têm sido propostos, principalmente para o tratamento numérico da Equação de Boltzmann [88, 92, 95]. De forma geral, os métodos podem ter um enfoque probabilístico ou determinístico. No primeiro caso, métodos como o de Monte Carlo [107, 110] têm como objetivo resolver aproximadamente o problema exato e abordam o problema de transporte incluindo vários aspectos físicos. Por outro lado, métodos determinísticos buscam resolver de forma exata uma formulação fraca da equação de transporte, que é tratada através do uso de métodos numéricos. Para resolver numericamente a equação íntegro-diferencial, é necessário uma discretização das variáveis que compõem o espaço de fase. A variável energética geralmente é discretizada através da aproximação multi-grupo no caso de aplicações nucleares [36], enquanto que as variáveis que compõem o domínio espacial são discretizadas através de diferentes métodos, cada um com sua abordagem

individual em vários sistemas de coordenadas. Dentre esses, cita-se o método de diferenças finitas [53, 67, 94], o método de volumes finitos [79], o método de elementos finitos [65, 68, 111] e os métodos nodais [6, 9, 21, 63, 102]. As variáveis que compõem o domínio angular da equação de transporte, por sua vez, são frequentemente tratadas através do método dos harmônicos esféricos [41, 57, 64] ou do método de ordenadas discretas [8, 17, 21, 29, 52, 108]. Nesse contexto, é importante citar o trabalho de Wick [105], que originalmente introduziu o método de ordenadas discretas. Um dos pioneiros e propositores deste método, Chandrasekhar [29] o utilizou extensivamente em estudos de transferência radiativa e tem como base a aproximação da integral angular do termo de espalhamento da equação de transporte por uma quadratura numérica, reduzindo a equação íntegro-diferencial em um sistema de equações diferenciais.

O método de ordenadas discretas é frequentemente utilizado nos principais códigos computacionais em teoria de transporte de nêutrons [60, 82, 91, 92] devido à sua versatilidade e à precisão no tratamento de problemas unidimensionais e multidimensionais da teoria de transporte, além de sua eficiente integração com outros métodos como os métodos de diferenças finitas [39, 98] e de elementos finitos [46]. Para o caso de aproximações em ordenadas discretas da equação de transporte em especial, diferentes métodos têm sido desenvolvidos para o tratamento da variável espacial, como métodos de elementos finitos descontínuos [55, 103, 104], os métodos nodais Linear-Linear, Linear-Nodal e o método AHOT (*Arbitrarily High Order Transport*) [6, 7], entre outros [21, 86, 109].

O método analítico de ordenadas discretas proposto por Chandrasekhar apresenta uma dificuldade numérica na determinação de autovalores obtidos pela solução de equações características, além de usualmente ser limitado a um único tipo de esquema de quadratura. A fim de contornar esse problema, novas formulações para o método vêm sendo propostas como, por exemplo, o método DISORT (*Discrete Ordinate Radiative Transfer*) [92] e a versão analítica do Método de Ordenadas

Discretas (ADO: *Analytical Discrete Ordinates*). Esse último, proposto por Barichello e Siewert [17] para a solução de problemas de transporte em geometria plana, apresenta características atraentes do ponto de vista computacional como a possibilidade do uso de esquemas de quadraturas arbitrários, solução analítica na variável espacial e obtenção das constantes de separação através da solução de um problema de autovalores ao invés de raízes de um polinômio. Além disso, os termos exponenciais na solução foram reescritos para evitar problemas computacionais de *overflow* [18]. O método ADO tem sido amplamente utilizado na resolução de problemas unidimensionais, apresentando soluções precisas em áreas como transferência radiativa [15, 17], dinâmica de gases rarefeitos [14, 44, 87, 90] e em problemas de transporte de nêutrons [18].

Considerando-se a versatilidade do método ADO na solução de problemas unidimensionais, um passo natural foi estender seu uso a problemas multidimensionais [13] para os quais, juntamente com os métodos nodais, são uma ferramenta importante no tratamento espacial das equações bidimensionais de transporte em ordenadas discretas. Os problemas até então estudados com aplicação do método ADO são de fonte fixa [16, 76]. Devido à utilização de métodos nodais, termos de fuga transversal desconhecidos *a priori* surgem no problema. Vários estudos foram conduzidos sobre diferentes formas de aproximação para esses termos, como aproximações relacionadas aos fluxos angulares médios emergentes [13, 75], aproximações por constantes [76, 97], e aproximações em termos das soluções dos problemas unidimensionais integrados [38, 78].

Também no caso bidimensional, a utilização de esquemas arbitrários de quadraturas no método ADO permite diferentes escolhas para a representação das ordenadas discretas, não se restringindo à escolha clássica, particularmente no caso multidimensional, da quadratura de nível simétrica (*Level Symmetric Quadrature*) [64]. Esta quadratura preserva simetria em relação a rotações ortogonais em torno do centro da esfera unitária mas apresenta uma limitação física, visto que está restrita à

ordem de quadratura até $N = 20$. Ordens maiores podem levar a pesos negativos, o que pode ocasionar soluções fisicamente impossíveis no cálculo dos fluxos angulares das equações de ordenadas discretas. Trabalhos recentes apresentam propostas de diferentes esquemas de quadratura, dos quais se destacam as quadraturas *Quadruple Range*, proposta por Abu-Shumays [2] e as variações do esquema de quadratura Legendre-Chebyshev [62]. Este tópico da análise de quadraturas é de estudo recente e relevante no método de ordenadas discretas multidimensional devido ao efeito raio. Efeitos raio são uma consequência da discretização da variável angular na equação de transporte, independentemente do esquema utilizado na discretização da variável espacial.

O uso de diferentes quadraturas, assim como diferentes técnicas para aproximação dos termos de fuga transversal, resultam em variações na formulação do problema bidimensional de transporte. A solução desse problema pelo método ADO exige que um sistema linear seja resolvido a fim de determinar coeficientes constantes na formulação da expressão final para o fluxo angular médio. Esse sistema linear é, normalmente, de alta ordem e esparso (com poucas entradas não nulas). Técnicas para solução de sistemas lineares como a clássica eliminação gaussiana [77, 81] podem apresentar problemas em aritmética computacional como divisões por zero, além de um custo computacional que pode vir a ser proibitivo dependendo da máquina utilizada para realizar tais cálculos. Tradicionalmente, os métodos diretos têm sido empregados para solucionar sistemas de ordem moderada devido à maior eficiência computacional dos mesmos. No entanto, à medida que se aumenta o número de equações, os métodos iterativos tornam-se competitivos tanto em relação ao número de operações para a obtenção da solução quanto ao espaço de armazenamento para a matriz do sistema [23, 42, 70, 81].

A implementação de métodos iterativos para a solução de sistemas lineares se baseia em repetidas iterações que, partindo de uma estimativa arbitrária para a solução do sistema, diminuem o erro na aproximação da solução a cada

iteração até que se atinja a solução dentro de uma precisão especificada. Exemplos de métodos iterativos incluem os métodos de Jacobi, de Gauss-Seidel e de Sobre-relaxação [20, 30, 56], método do Gradiente Conjugado (CG) [5, 51] e variações desse como o método Gradiente Bi-Conjugado Estabilizado (BiCGStab) [99], método Generalizado do Resíduo Mínimo (GMRES) [84] e variações desse como o método Generalizado do Resíduo Mínimo reinicializado [49, 84], *Simpler GMRES* (SGMRES) [101] e *Loose GMRES* (LGMRES) [10].

O objetivo deste trabalho é avaliar a eficiência de métodos iterativos baseados em subespaços de Krylov para a obtenção da solução dos sistemas lineares provenientes do método ADO utilizado em problemas bidimensionais de transporte. Essa análise é feita através de casos testes derivados sob diferentes condições físicas do problema (devido principalmente à escolha de diferentes esquemas de quadratura) e cujos sistemas lineares foram resolvidos através de métodos iterativos quando o uso de métodos diretos se mostrou insuficiente e inefetivo.

Neste trabalho, dá-se ênfase ao Método do Resíduo Mínimo Generalizado e suas variações – GMRES reinicializado e LGMRES – de modo que o capítulo 2 apresenta uma descrição desses métodos iterativos, bem como a formulação nas diferentes variações escolhidas para estudo e uma introdução ao uso de pré-condicionadores que melhoram a taxa de convergência desses métodos. O capítulo 3 parte da equação de transporte derivada da equação de Boltzmann e apresenta sua formulação em ordenadas discretas, além de apresentar os esquemas de quadratura que serão utilizados nos problemas nos capítulos seguintes. No capítulo 4, dá-se ênfase ao método ADO na solução analítica em ordenadas discretas da equação bidimensional de transporte. É apresentada a utilização de métodos nodais na discretização das variáveis espaciais e a derivação da solução do problema em cada região do domínio, assim como o sistema linear proveniente do método que então será resolvido pelos métodos iterativos supracitados. No capítulo 5, apresenta-se a descrição de três problemas teste e os resultados obtidos em simulações numéricas para

estes, utilizando-se diferentes variações nos métodos iterativos. Analisa-se com esses dados a diferença entre as propriedades das quadraturas numéricas e os métodos iterativos e, por fim, o capítulo 6 apresenta conclusões e considerações finais. Uma lista de referências bibliográficas citadas ao longo do trabalho é disposta ao final deste.

2 MÉTODOS ITERATIVOS PARA SOLUÇÃO DE SISTEMAS LINEARES

Na área de Matemática Aplicada, o estudo de sistemas lineares é um tópico de estudo sempre em evolução. Pesquisa-se ainda hoje em dia novos métodos de solução dos sistemas e aceleração de métodos conhecidos [70]. Um sistema de m equações lineares consiste de um conjunto de relações algébricas na forma

$$\sum_{j=1}^n a_{ij}x_j = b_j \quad i = 1, \dots, m, \quad (2.1)$$

onde x_j são as n incógnitas, a_{ij} são os coeficientes do sistema e b_i são os termos independentes das equações. O sistema (2.1) pode ser convenientemente reescrito na forma matricial

$$A\vec{x} = \vec{b}. \quad (2.2)$$

Uma solução do sistema é qualquer n -upla \vec{x} que satisfaça (2.1).

Métodos numéricos vêm sendo desenvolvidos para a solução de sistemas lineares há décadas e podem ser classificados como métodos diretos e métodos iterativos. Os chamados métodos diretos alcançam a solução \vec{x} em um número finito de operações que manipulam diretamente as linhas do sistema. A escolha de se usar um método direto depende da eficiência teórica do método, assim como da estrutura da matriz em particular e de requerimentos de memória ou até mesmo da arquitetura do computador [70].

Teoricamente, métodos iterativos produzem a solução \vec{x} de um sistema depois de um número infinito de iterações. Na prática, a cada iteração é requerido o cálculo do resíduo da solução e, quando esse resíduo é suficientemente pequeno, toma-se essa aproximação como solução do sistema. Para matrizes completas, métodos iterativos podem competir com métodos diretos se o número de iterações necessárias para convergência aumentar sutilmente em relação a ordem do

sistema ou não depender dela [81]. No caso de matrizes esparsas, métodos diretos podem ser inconvenientes, dando-se ênfase para o uso dos métodos iterativos.

A ideia básica empregada nos métodos iterativos é construir uma sequência de vetores $\vec{x}^{(k)}$ cuja principal característica é a convergência para a solução \vec{x} do sistema, ou seja,

$$\vec{x} = \lim_{k \rightarrow \infty} \vec{x}^{(k)}. \quad (2.3)$$

Na prática, o processo iterativo é inicializado com uma estimativa inicial $\vec{x}^{(0)}$ e finalizado na primeira iteração que obedecer à condição de parada, usualmente dada pela norma do erro

$$\|\vec{x} - \vec{x}^{(k)}\| < \varepsilon, \quad (2.4)$$

onde ε é uma tolerância previamente definida e $\|\cdot\|$ é qualquer norma de vetor que seja conveniente [81]. No entanto, a solução \vec{x} não é conhecida, é necessário um método para monitorar a convergência da sequência $\vec{x}^{(k)}$.

Para o caso dos sistemas de equações lineares algébricas, as duas principais classes de métodos iterativos são os métodos estacionários e os mais genéricos não-estacionários, onde se destacam os métodos baseados em subespaços de Krylov [81]. Os métodos estacionários mais simples partem do princípio de que existe uma matriz de iteração B tal que

$$\vec{x}^{(k+1)} = B\vec{x}^{(k)} + \vec{f}, \quad (2.5)$$

onde \vec{f} é um vetor associado ao vetor \vec{b} do lado direito da equação original (2.2). Nota-se que tanto B quanto \vec{f} são independentes da atual iteração k . Um importante teorema diz que um método iterativo dessa classe é convergente se, e somente se, o raio espectral $\rho(B)$ de sua matriz de iteração é menor que a unidade. De forma mais precisa, segundo [81]:

Teorema 2.1. *Seja (2.5) um método consistente. Então, a sequência de vetores $\{\vec{x}^{(k)}\}$ converge para a solução de (2.2) para qualquer escolha inicial $\vec{x}^{(0)}$ se, e somente se, $\rho(B) < 1$.*

Diferentes formas de construir a matriz de iteração levam a diferentes métodos iterativos estacionários. Mais comum entre eles são os métodos de Jacobi, Gauss-Seidel (com suas respectivas formas variantes de sobre relaxação) e o método estacionário de Richardson. [70]

Neste trabalho será dado enfoque aos métodos não-estacionários. Nesse caso, parâmetros que dependem da iteração k são introduzidos. Uma forma de visualizar o método é um caminho em \mathbb{R}^n partindo de $\vec{x}^{(0)}$ em que o primeiro passo é dado na direção de um vetor \vec{p} e então, a cada iteração, o parâmetro α_k ajusta o caminho até a convergência. Assim,

$$\vec{x}^{(k+1)} = \vec{x}^{(k)} + \alpha_k \vec{p}^{(k)}. \quad (2.6)$$

Nesse contexto, destaca-se inicialmente o Método do Gradiente, ou método do máximo declive. Para o caso de uma matriz simétrica e definida positiva, encontrar a solução do sistema original é equivalente a encontrar o vetor $\vec{x} \in \mathbb{R}^n$ que minimiza a forma quadrática [81]

$$\Phi(\vec{x}) = \frac{1}{2} \vec{x}^T A \vec{x} - \vec{x}^T \vec{b} \quad (2.7)$$

que é chamada de *energia do sistema* e tem gradiente

$$\nabla \Phi(\vec{x}) = \frac{1}{2} (A^T + A) \vec{x} - \vec{b} = A \vec{x} - \vec{b}. \quad (2.8)$$

Usa-se esse gradiente aplicado em $\vec{x}^{(k)}$ como escolha de vetor direção \vec{p} no processo iterativo. Devido a (2.8), isso é o mesmo que o resíduo $\vec{r}^{(k)}$ na k -ésima iteração. Isso permite que o resíduo seja facilmente calculado a cada iteração.

O parâmetro α_k em cada iteração é dado pela fórmula [81]

$$\alpha_k = \frac{\vec{r}^{(k)T} \vec{r}^{(k)}}{\vec{r}^{(k)T} A \vec{r}^{(k)}}. \quad (2.9)$$

No Método do Gradiente, as direções ao longo dos resíduos são ortogonais entre si, mas apesar disso, a taxa de convergência pode ser baixa. Isso levou

ao desenvolvimento do *Método do Gradiente Conjugado (CG)* por Hestenes e Stiefel [54], onde substitui-se os vetores direção $\vec{r}^{(k)}$ por vetores $\vec{q}^{(k)}$ **conjugados** entre si (alguns autores usam o termo “A-ortogonais”), ou seja, $\vec{q}_i^T A \vec{q}_j = 0$ para todo $i \neq j$ [70].

Mostra-se [70], em aritmética exata, que as sequências de vetores formadas por esses algoritmos são bases para um mesmo subespaço

$$\text{span}\{\vec{x}^{(1)}, \dots, \vec{x}^{(j)}\} = \text{span}\{\vec{q}^{(1)}, \dots, \vec{q}^{(j)}\} = \text{span}\{\vec{r}^{(0)}, \dots, \vec{r}^{(j-1)}\}. \quad (2.10)$$

Esse subespaço é um subespaço de Krylov, que pode ser definido como todos os vetores \vec{u} que podem ser escritos como $\vec{u} = p_{m-1}(A)\vec{v}$, onde $p_{m-1}(A)$ é um polinômio em A . Outra forma de definir um subespaço de Krylov \mathcal{K}_m é

$$\mathcal{K}_m(\vec{v}, A) = \text{span}\{\vec{v}, A\vec{v}, A^2\vec{v}, \dots, A^{m-1}\vec{v}\}. \quad (2.11)$$

Além dos Métodos do Gradiente e Gradiente Conjugado, subespaços de Krylov são a base para outros métodos iterativos como o método generalizado do resíduo mínimo (*GMRES*, do inglês, *Generalized Minimal Residual*), elaborado por Yousef Saad e Martin H. Schultz em 1986 [84] e principal método utilizado nesse trabalho devido a sua importância na atualidade.

2.1 Método do Resíduo Mínimo Generalizado (*GMRES*)

Embora muito efetivo para a solução de sistemas esparsos, o método do Gradiente Conjugado é restrito a matrizes simétricas e definidas positivas. Para a solução de matrizes simétricas indefinidas, Paige e Saunders [73] propuseram um algoritmo *MINRES* (do inglês, *Minimal Residual*). Esse método foi generalizado para matrizes não-simétricas por Saad e Schultz com base no processo iterativo de Arnoldi [4]. Esse processo é um método iterativo para encontrar autovetores de uma matriz baseado no método da potência. De acordo com Arnoldi, os elementos da

base do espaço de Krylov $\mathcal{K}_n(\vec{v}, A)$, $\{\vec{v}, A\vec{v}, \dots, A^{n-1}\vec{v}\}$, são boas aproximações para os autovetores da matriz A , contanto que sejam ortogonais entre si. Teoricamente, o processo de Gram-Schmidt poderia ser usado para encontrar uma base ortonormal para \mathcal{K}_n . No entanto, esse processo é instável. O método iterativo de Arnoldi é então uma alternativa para a ortonormalização da base.

Partindo de um vetor unitário arbitrário \vec{q}_1 , o algoritmo para o processo da Iteração de Arnoldi, também conhecido como processo de A -ortogonalização e semelhante ao processo de ortogonalização modificado de Gram-Schmidt, é:

Algoritmo 1: Iteração de Arnoldi

```

1: para  $k \leftarrow 1$  até  $n$  faça
2:    $\vec{q}_{k+1} \leftarrow A\vec{q}_k$ 
3:   para  $j \leftarrow 1$  até  $k$  faça
4:      $h_{j,k} \leftarrow \langle \vec{q}_j, \vec{q}_{k+1} \rangle$ 
5:      $\vec{q}_{k+1} \leftarrow \vec{q}_{k+1} - h_{j,k}\vec{q}_j$ 
6:   fim para
7:    $h_{k+1,k} \leftarrow \|\vec{q}_{k+1}\|$ 
8:    $\vec{q}_{k+1} \leftarrow \frac{\vec{q}_{k+1}}{h_{k+1,k}}$ 
9: fim para

```

onde $\langle \vec{u}, \vec{v} \rangle$ representa o produto interno entre os vetores \vec{u} e \vec{v} e $\|\vec{v}\|$ é a norma euclidiana do vetor \vec{v} .

Após cada iteração do processo de Arnoldi, os coeficientes $h_{i,j}$ formam uma matriz \tilde{H}_k de ordem $(k+1) \times k$ que provém da concatenação de uma matriz de Hessenberg superior H_k e uma linha adicional com apenas o elemento não-nulo $h_{k+1,k}$ e os vetores \vec{q}_i formam uma base ortonormal para \mathcal{K}_{k+1} cuja forma matricial é $Q_{k+1} = [\vec{q}_1 \ \vec{q}_2 \ \dots \ \vec{q}_{k+1}]$. Essas matrizes têm a importante propriedade

$$AQ_k = Q_{k+1}\tilde{H}_k. \quad (2.12)$$

O método *GMRES* parte de uma estimativa inicial $\vec{x}^{(0)}$, computa o resíduo inicial $\vec{r}^{(0)} = b - A\vec{x}^{(0)}$ e procura em cada iteração uma aproximação para a solução \vec{x} como $\vec{x} \approx \vec{x}^{(0)} + \vec{z}^{(k)}$, tal que $\vec{z}^{(k)} \in \mathcal{K}_k(\vec{r}^{(0)}, A)$.

Para a melhor aproximação da solução, objetiva-se minimizar

$$\|\vec{b} - A[\vec{x}^{(0)} + \vec{z}^{(k)}]\| = \|\vec{r}^{(0)} - A\vec{z}^{(k)}\|. \quad (2.13)$$

Como o vetor $\vec{z}^{(k)}$ está em \mathcal{K}_k , pode-se usar a matriz Q_k como uma matriz projeção de um vetor $\vec{y}^{(k)} \in \mathbb{R}^n$ sobre o subespaço de forma que

$$\vec{z}^{(k)} = Q_k \vec{y}^{(k)}. \quad (2.14)$$

Pode-se então ver a norma a ser minimizada (2.13) como a função

$$J(\vec{y}) = \|\vec{r}^{(0)} - A\vec{z}^{(k)}\| = \|\beta \vec{q}^{(1)} - A Q_k \vec{y}^{(k)}\|, \quad (2.15)$$

onde β indica a norma euclidiana de $\vec{r}^{(0)}$ por conveniência. Utilizando (2.12) e novamente lembrando que Q_{k+1} pode ser vista como uma matriz de projeção sobre \mathcal{K}_{k+1} , tem-se

$$J(\vec{y}) = \|Q_{k+1}[\beta \vec{e}_1 - \tilde{H}_k \vec{y}^{(k)}]\| = \|\beta \vec{e}_1 - \tilde{H}_k \vec{y}^{(k)}\|, \quad (2.16)$$

onde \vec{e}_1 indica o primeiro elemento da base canônica de \mathbb{R}^{k+1} . Vale lembrar que a igualdade em (2.16) é válida porque Q_{k+1} é uma matriz ortogonal.

A solução para o problema de mínimos quadráticos é então utilizada para a aproximação $\vec{x} \approx \vec{x}^{(0)} + Q_k \vec{y}^{(k)}$. Se a norma do resíduo não atende ao critério de parada, repete-se o processo. De forma resumida, o Método do Resíduo Mínimo Generalizado é dado pela iteração esquematizada no Algoritmo 2: GMRES.

A cada iteração k do *GMRES*, o resíduo está no subespaço de Krylov \mathcal{K}_k e, como cada subespaço está contido no próximo ($\mathcal{K}_k \subset \mathcal{K}_{k+1}$), a norma do resíduo não aumenta. Depois de n iterações, sendo n a ordem da matriz A em (2.2), o subespaço \mathcal{K}_n é todo o espaço vetorial \mathbb{R}^n e, portanto, o método *GMRES* converge para a solução exata [81]. No entanto, o custo computacional para isso pode ser muito elevado e espera-se que o método convirja em poucas iterações. Existem duas principais formas de evitar esse problema, a saber, o GMRES reinicializado

Algoritmo 2: GMRES

```

1: enquanto  $\|\vec{b} - A\vec{x}_k\| < \varepsilon$  faça
2:    $\vec{r}_{k-1} \leftarrow \vec{b} - A\vec{x}_{k-1}$ 
3:    $\vec{q}_k \leftarrow \frac{\vec{r}_{k-1}}{\|\vec{r}_{k-1}\|}$ 
4:    $\vec{q}_{k+1} \leftarrow A\vec{q}_k$ 
5:   para  $j \leftarrow 1$  até  $k$  faça
6:      $h_{j,k} \leftarrow \langle \vec{q}_j, \vec{q}_{k+1} \rangle$ 
7:      $\vec{q}_{k+1} \leftarrow \vec{q}_{k+1} - h_{j,k}\vec{q}_j$ 
8:   fim para
9:    $h_{k+1,k} \leftarrow \|\vec{q}_{k+1}\|$ 
10:   $\vec{q}_{k+1} \leftarrow \frac{\vec{q}_{k+1}}{h_{k+1,k}}$ 
11:   $\vec{x}_k \leftarrow \vec{x}_{k-1} + Q_k\vec{y}_k$ 
12:   $k \leftarrow k + 1$ 
13: fim enquanto

```

▷ Computa-se as matrizes \tilde{H}_k e Q_k
 ▷ onde \vec{y}_k minimiza (2.13).

e o Loose Generalized Minimal Residual (LGMRES). A primeira foi proposta por Yousef e Schultz já em 1986, quando desenvolveram o Método Generalizado do Resíduo Mínimo [84].

2.1.1 *GMRES* Reinicializado

A primeira maneira de diminuir o custo computacional do método é pelo chamado Método Generalizado do Resíduo Mínimo Reinicializado, denotado por *GMRES*(m). Ele consiste em reinicializar a iteração de Arnoldi a cada m passos, efetivamente limitando a dimensão do subespaço de Krylov em m . O método reinicializado, no entanto, não goza da propriedade do método original de convergir em no máximo n iterações. De fato, é possível provar [84] que o método *GMRES*(m) pode não convergir para matrizes não definidas positivas.

2.1.2 *LGMRES*

Proposto por Baker em 2003 [12], o *Loose Generalized Minimal Residual* (LGMRES) é uma técnica para aceleração do GMRES. O método reinicializado

utiliza uma base de Krylov em cada ciclo de reinicialização, o que significa que a base anterior é descartada e o primeiro vetor do ciclo não mantém ortogonalidade com os vetores deste subespaço. A solução que caracteriza o método LGMRES é a inclusão de l vetores erro à base do novo ciclo, agora com dimensão $m + l$. O LGMRES(m, l) tipicamente não requer mais iterações que o GMRES(m) e possui custo computacional quase igual a este.

Nesse trabalho, serão utilizados tanto o método reinicializado GMRES(m) quanto a técnica de aceleração *LGMRES*(m, l), cujos parâmetros são, como definidos acima, a dimensão máxima para a base de Krylov (m) e o número de vetores a serem adicionados à base de Krylov a cada ciclo de reinicialização (l).

2.2 Pré-condicionadores

Na resolução de sistemas lineares via métodos numéricos iterativos, é comum buscar-se melhorar o condicionamento do sistema a ser resolvido através de alguma transformação. Essa transformação é usualmente dada por uma matriz de *pré-condicionamento* P . Embora existam formas de pré-condicionamento à direita e até central, a técnica mais utilizada é o pré-condicionamento à esquerda. Dessa forma, busca-se a solução do sistema linear (2.2) através do sistema pré-condicionado

$$P^{-1}A\vec{x} = P^{-1}\vec{b}. \quad (2.17)$$

Ambos os sistemas têm a mesma solução contanto que P seja não singular. Também é comum na literatura se referir a P^{-1} como o pré-condicionador do sistema, já que a própria matriz P normalmente não é explicitamente apresentada. O objetivo de um sistema pré-condicionado é reduzir o *número de condicionamento* da matriz do problema.

A aplicação do pré-condicionador tem seu custo na resolução do sistema e a escolha deste deve ser feita de acordo com o problema. Como o pré-condicionador

P^{-1} deve ser aplicado no sistema a cada passo do processo iterativo, espera-se que tenha um custo computacional baixo. A escolha mais econômica computacionalmente seria então $P = I$, mas essa escolha obviamente resulta no sistema pré-condicionado sendo igual ao original. A escolha ótima para que o número de condicionamento do sistema pré-condicionado seja igual a 1 (fazendo com que uma única iteração alcance a solução do sistema) é $P = A$, pois assim $P^{-1}A = I$. Nesse caso, no entanto, aplicar o pré-condicionador é tão complicado quanto resolver o sistema original, já que $P^{-1} = A^{-1}$. Deve-se então escolher P entre esses dois extremos na tentativa de alcançar a solução do sistema com o menor número de iterações ao mesmo tempo que se mantém o operador P^{-1} tão simples quanto possível.

De acordo com Quarteroni [81], não há uma maneira pré definida de escolher um pré-condicionador ótimo. No entanto, a regra geral é que P é um bom pré-condicionador para A , se o produto $P^{-1}A$ for próximo de ser uma matriz normal e que seus autovalores estejam agrupados em uma região suficientemente pequena do plano complexo. Como mencionado anteriormente, o Método Generalizado de Resíduo Mínimo produz a solução do sistema (2.2) em até n iterações, mas o custo pode ser alto. Em adição aos métodos de economia computacional já mencionados na seção anterior, a escolha de um bom pré-condicionador pode diminuir consideravelmente o número de iterações necessárias para a convergência do método.

Para uma aplicação das técnicas aqui descritas, no próximo capítulo, busca-se apresentar de forma breve a geração dos sistemas lineares de interesse nesse estudo.

3 APROXIMAÇÃO EM ORDENADAS DISCRETAS DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE PARTÍCULAS

Neste capítulo, apresenta-se a equação de transporte de nêutrons multidimensional em coordenadas cartesianas e, em vista da utilização do método de ordenadas discretas, os quatro tipos de quadraturas numéricas que definem as direções discretas e seus pesos: Quadratura Simétrica de Nível (LQ_N), Quadraturas Legendre-Chebyshev Quadrangular ($P_N T_N$) e Triangular ($P_N T_N S_N$) e a Quadratura Quadruple Range (QR). A equação integro-diferencial fornece uma descrição quantitativa da distribuição espacial, direcional, energética e temporal de partículas em meios materiais [43]. A equação foi apresentada por Ludwig Boltzmann no final do século XIX para cinética de gases. A equação de transporte é conhecida como equação linear de Boltzmann. Na década de 1940, foi proposto por Wick o método das ordenadas discretas, método que aproxima o termo integral da equação de transporte por uma fórmula de quadraturas e que foi exaustivamente desenvolvido por Subrahmanyam Chandrasekhar em estudos de transferência radiativa [29].

Em geral, a equação de transporte é estudada como um problema de sete variáveis independentes: três espaciais, duas angulares, uma de energia e uma variável temporal. Procura-se como solução da equação o fluxo angular de partículas Ψ . Para um vetor posição $\vec{r} = (x, y, z)$, um vetor direção $\vec{\Omega}(\phi, \theta) = (\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z)$, no caso de transporte de nêutrons independente do tempo em meio não multiplicativo a um grupo de energia, a equação pode ser escrita como [96]

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \sigma_t \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_S \sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' + Q(\vec{r}, \vec{\Omega}) \quad (3.1)$$

onde σ_t representa a seção de choque macroscópica total, $\sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega})$ a seção de choque macroscópica de espalhamento diferencial e $Q(\vec{r}, \vec{\Omega})$ é o termo de fonte externa de nêutrons.

Por conveniência, a direção angular do movimento das partículas $\vec{\Omega}$ é descrita utilizando os cossenos diretores, tal que

$$\Omega_x = \mu = \cos(\phi) \sin(\theta) = \cos(\phi) \sqrt{1 - \xi^2}$$

$$\Omega_y = \eta = \sin(\phi) \sin(\theta) = \sin(\phi) \sqrt{1 - \xi^2}$$

e

$$\Omega_z = \xi = \cos(\theta), \quad (3.2)$$

sendo os mesmos relacionados da forma

$$\Omega_x^2 + \Omega_y^2 + \Omega_z^2 = 1. \quad (3.3)$$

Aqui, θ é o ângulo polar medido a partir do eixo z e ϕ é o ângulo azimutal medido a partir do eixo x .

A integral na Eq. (3.1) é avaliada sobre todas as direções $\vec{\Omega}$ na esfera unitária S , onde $\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$ é o fluxo angular das partículas em $\vec{r} = (x, y, z)$ com

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \Omega_x \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \Omega_y \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \Omega_z \frac{\partial \Psi}{\partial z}. \quad (3.4)$$

Em problemas bidimensionais, o último termo dessa equação (3.4) passa a ser ignorado.

O tratamento analítico desta equação é muito complexo (um método proposto por Case em 1960 pode ser utilizado apenas para problemas de transporte idealizados [26]) e devido a isso, métodos numéricos com enfoque probabilístico e determinístico têm sido usados na obtenção de sua solução [72, 88, 92, 95]. Quanto às variáveis que compõem o domínio angular da equação de transporte, é frequente o seu tratamento através do método dos harmônicos esféricos [40, 41, 57, 64] ou do método de ordenadas discretas [8, 17, 21, 47, 52, 69, 108].

3.1 Método de Ordenadas Discretas

O método de ordenadas discretas aproxima a integral do termo de espalhamento da equação de transporte de partículas (3.1), usualmente calculada sobre todas as infinitas possíveis direções da esfera unitária, por um somatório de uma quadratura angular sobre um conjunto finito de direções angulares discretas (ordenadas discretas). Como consequência, o número M de direções discretas escolhidos e sua distribuição sobre a esfera unitária governam o grau de exatidão da aproximação

$$\int_S \sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' \approx \sigma_s(\vec{r}, \vec{\Omega}' \cdot \vec{\Omega}) \sum_{n=1}^M w_n \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}_n). \quad (3.5)$$

Assim, cada ordenada discreta $\vec{\Omega}_n$ é associada a um peso w_n . A princípio, a escolha do esquema de quadratura a ser utilizado, assim como o número de ordenadas discretas, pode ser arbitrária. Estudos como o de Barichello et al. [19] analisam a precisão com que estas quadraturas aproximam o termo integral da fonte de espalhamento. Como mencionado anteriormente, este trabalho utiliza os quatro esquemas de quadratura listados a seguir.

3.2 Esquemas Numéricos de Quadraturas

Quando discretizada a variável angular da equação de transporte através de ordenadas discretas, a aproximação angular produz uma distribuição distorcida do fluxo angular. Isto é conhecido como efeito raio e acontece independentemente do esquema de quadratura utilizado, usualmente em problemas cujas fontes ou fluxos possuem forte dependência angular, ou quando a fonte externa está localizada em uma pequena região do espaço, em meios de baixa densidade ou altamente absorvedores [96]. De uma forma geral, não é possível eliminar os efeitos raio na solução da equação em ordenadas discretas, mas pode-se reduzir sua influência nela

e, conseqüentemente, melhorar a precisão na determinação das soluções em ordenadas discretas. Isso pode ser obtido aumentando o número de direções discretas utilizadas ou através da utilização de específicos esquemas de quadratura.

No intuito de reduzir os efeitos raio, várias metodologias vêm sendo aplicadas. Uma possível abordagem é a utilização de esquemas de quadratura numéricas capazes de satisfazer momentos de ordem superior do fluxo angular, em relação aos cossenos diretores. Dentre os esquemas mais comumente utilizados, tem destaque a quadratura simétrica de nível LQ_N (*Level Symmetric*), que mantém simetria em todos os octantes da esfera unitária. Porém, o uso desta quadratura apresenta uma limitação. Quando a ordem de quadratura assume valores maiores que 20, alguns pesos passam a ter valores negativos, implicando em uma solução fisicamente impossível [64].

A fim de contornar esse problema, esquemas de quadratura alternativos foram propostos, como a quadratura de pesos iguais EQ_N , desenvolvida por Carlson [80, 96], ou os conjuntos de quadratura de pesos positivos UE_N e UG_N , desenvolvidos por Carew e Zamonsky [85, 96]. Neste trabalho, dá-se ênfase para os esquemas de quadratura Legendre-Chebyshev triangular e quadrangular [66], desenvolvidos tanto para o tratamento de problemas bidimensionais quanto tridimensionais, e o esquema de quadratura Quadruple Range (QR), criada por Abu-Shumays [2] para o tratamento exclusivo de problemas de transporte bidimensionais.

3.2.1 Quadratura Simétrica de Nível

A quadratura simétrica de nível (LQ_N) tem como propriedade principal a simetria em relação à origem para todos os octantes. Dessa forma, um conjunto de pontos é definido em um eixo e então refletido nos outros com as devidas mudanças de sinal. Esse processo define então o conjunto de quadratura em toda a esfera unitária.

Para a escolha dos $N/2$ pontos de quadratura em cada eixo, pode ser mostrado que existe um grau único de liberdade, ou seja, depois de escolhido μ_1 , os outros pontos são definidos pela relação [25, 61, 64]

$$\mu_i^2 = \mu_1^2 + (i - 1) \frac{2(1 - 3\mu_1^2)}{N - 2} \quad 1 \leq i \leq N/2. \quad (3.6)$$

Não há na literatura uma forma definitiva para a escolha de μ_1 , salvo para o caso $N = 2$, no qual a única possibilidade é $\mu_1^2 = 1/3$. Uma vez escolhida uma direção – ordenada – (μ_i, η_i, ξ_i) , obedecendo a restrição $\mu_i^2 + \eta_i^2 + \xi_i^2 = 1$, a permutação de suas componentes leva a ordenadas de um mesmo grupo de permutação. Tais grupos de permutação são compostos por classes de 1, 3 ou 6 pontos cada, de modo que dentro de uma determinada classe, todos os pontos têm o mesmo peso.

As direções são dispostas na esfera unitária em um padrão triangular, com $N/2$ níveis diferentes por hemisfério e $N/2 - i + 1$ pontos em cada nível i , apresentando simetria rotacional em relação aos pesos determinados pelas classes de permutação anteriormente mencionadas. As figuras 3.1 e 3.2 exemplificam esse fato.

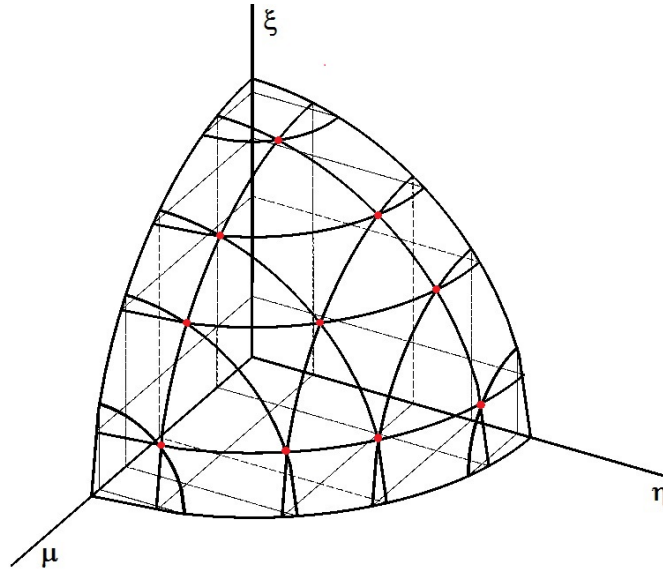


Figura 3.1: Distribuição de direções na quadratura LQ_N para $N = 8$.

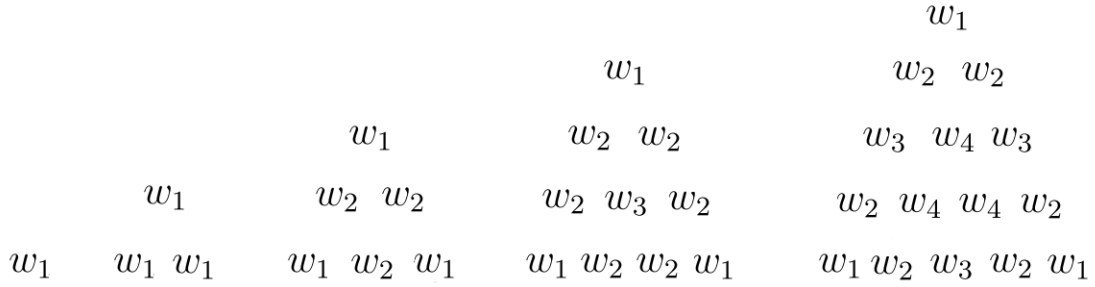


Figura 3.2: Configuração dos pesos por octantes, para $N = 2, 4, 6, 8$ e 10 .

É importante ressaltar novamente que, para ordens de quadratura $N > 20$ algumas classes de permutação tendem a apresentar pesos negativos, o que acarreta em uma solução fisicamente impossível para o problema de transporte.

3.2.2 Conjunto de Quadraturas Legendre-Chebyshev

Uma possível alternativa para a quadratura simétrica de nível é o uso de um dos dois esquemas de quadratura Legendre-Chebyshev [66]. Estes são gerados pelo produto de dois esquemas de quadratura unidimensionais: a quadratura de Gauss-Legendre no tratamento da variável polar $\xi = \cos\theta$ e a quadratura de Chebyshev de primeira classe para a variável azimutal ϕ .

O uso desses conjuntos de quadratura não apresenta pesos negativos, ignorando o problema encontrado na quadratura simétrica de nível LQ_N quando $N > 20$.

A quadratura unidimensional de Gauss-Legendre consiste em definir valores para a variável polar ξ como raízes de um polinômio de Legendre (P_N) de grau N . Esses polinômios podem ser obtidos através da fórmula de recorrência

$$(j + 1)P_{j+1}(\xi) = (2j + 1)\xi P_j(\xi) - jP_{j-1}(\xi), \quad (3.7)$$

onde $P_{-1}(\xi) = 0$ e $P_0(\xi) = 1$ para $-1 < \xi < 1$ e $j = 0, 1, \dots, N$. Depois de encontradas as raízes de P_N , os pesos associados a cada nível ξ_i são determinados por meio da seguinte fórmula:

$$\omega_i = \frac{2}{(1 - \xi_i^2) \left[\left(\frac{dP_N}{d\xi} \right)_{\xi_i} \right]^2} \quad (3.8)$$

No tratamento da variável angular azimutal, a quadratura unidimensional de Chebyshev define seus valores como as raízes do polinômio de Chebyshev de primeira espécie (T_N), que podem ser obtidos através da fórmula de recorrência

$$T_{j+1}(\varpi) = 2\varpi T_j(\varpi) - T_{j-1}(\varpi), \quad (3.9)$$

onde $T_0(\varpi) = 1$ e $T_1(\varpi) = \varpi$ para $j = 1, \dots, N$.

3.2.2.1 Quadratura Legendre-Chebyshev Quadrangular

Na construção da quadratura Legendre-Chebyshev quadrangular (aqui denotada por $P_N T_N$), as ordens das quadraturas unidimensionais devem ser as mesmas. Assim, para cada nível polar ξ , que é definido como as raízes dos polinômios de Legendre P_N de ordem N , são associados N pontos provenientes da quadratura de Chebyshev. O conjunto discreto de ângulos azimutais para cada nível ξ_i é definido através da relação

$$\varpi_j = \frac{\pi}{2} \left(1 - \frac{N - 2j + 1}{N} \right), \quad (3.10)$$

para $j = 1, \dots, N$.

Uma vez obtidos os valores de ϖ_j , define-se o conjunto de pontos da quadratura produto Legendre-Chebyshev por

$$\mu_{i,j} = \sqrt{1 - \xi_i^2} \cos(\varpi_j), \quad (3.11)$$

com $i = 1, \dots, N/2$ e $j = 1, \dots, N$. A seguir, os pontos $\eta_{i,j}$ são definidos para cada nível i através da relação

$$\eta_{i,j} = \sqrt{1 - \mu_{i,j}^2 - \xi_i^2}. \quad (3.12)$$

Os pesos da quadratura correspondente são dados em termos dos pesos da quadratura de Gauss-Legendre ω_i como

$$\omega_{i,j} = \frac{\omega_i}{N}. \quad (3.13)$$

Dessa forma, em cada nível ξ_i , as direções correspondentes possuem o mesmo peso. A distribuição das ordenadas em cada quadrante da esfera unitária então toma uma forma quadrangular, com um total de $M = (N/2)^2$ direções por octante, como exemplifica a Figura 3.3.

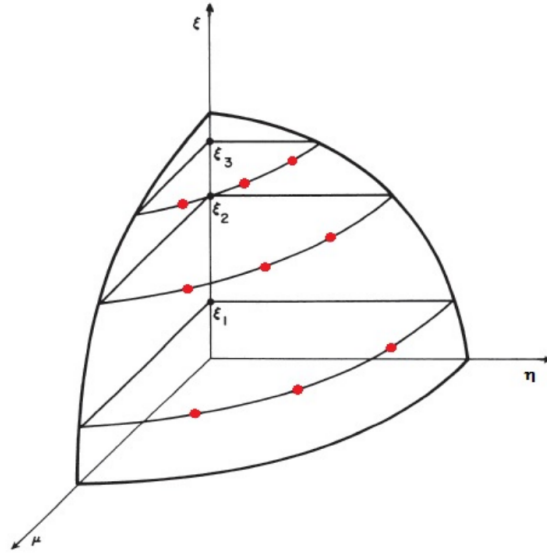


Figura 3.3: Distribuição de direções na quadratura $P_N T_N$ para $N = 6$.

3.2.2.2 Quadratura Legendre-Chebyshev Triangular

Diferentemente da quadratura quadrangular, o esquema de quadratura Legendre-Chebyshev triangular (aqui definida por $P_N T_N S_N$) combina as quadraturas unidimensionais de forma diferente, a fim de apresentar uma configuração de ordenadas que se assemelha à configuração triangular da quadratura simétrica de nível LQ_N [96]. Os valores para a variável polar ξ são novamente definidos como as raízes do polinômio de Gauss-Legendre de grau N . A seguir, a discretização da

variável angular azimutal é feita de modo que no primeiro nível polar usa-se a quadratura de Chebyshev de ordem $N = 2$, para o segundo nível polar a quadratura de ordem $N = 4$, para o terceiro nível polar a quadratura de ordem $N = 6$, e assim por diante. O total de direções discretas por octante então é dado por $M = N(N+2)/8$.

Na quadratura Legendre-Chebyshev triangular, a determinação do conjunto de ângulos azimutais segue a relação

$$\varpi_{i,j} = \frac{\pi}{2} \left(1 - \frac{N - 2j - 2i + 3}{N - 2i + 2} \right), \quad (3.14)$$

onde $j = 1, \dots, N - 2i + 2$ e $i = 1, \dots, N/2$.

Uma vez determinados os pesos e os valores de $\varpi_{i,j}$, o conjunto de pontos da quadratura Legendre-Chebyshev triangular é definido por

$$\mu_{i,j} = \sqrt{1 - \xi_i^2} \cos(\varpi_{i,j}). \quad (3.15)$$

e os valores para $\eta_{i,j}$ são definidos, como na quadratura quadrangular, pela relação 3.12.

Os pesos correspondentes $\omega_{i,j}$ são dados em função dos pesos de quadratura de Gauss-Legendre ω_i como

$$\omega_{i,j} = \frac{\omega_i}{N - 2i + 2}, \quad (3.16)$$

onde $i = 1, \dots, N/2$ e $j = 1, \dots, N - 2i + 2$.

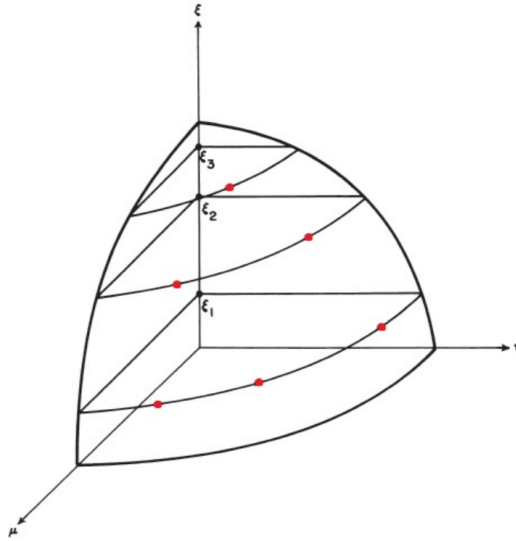


Figura 3.4: Distribuição de direções na quadratura $P_N T_N S_N$ para $N = 6$.

3.2.3 Quadratura Quadruple Range

A quadratura Quadruple Range (QR) foi proposta na década de 70 por Abu-Shumays [2] com o intuito de integrar precisamente funções para problemas altamente heterogêneos com inúmeras singularidades nos contornos. Na construção da quadratura QR , o ângulo azimutal ϕ é dividido em quatro intervalos e então as ordenadas e seus respectivos pesos são definidos para o intervalo principal ($\phi \in [0, \pi/2]$) e depois estendidos para os demais intervalos.

Para a análise sobre o ângulo polar θ , usa-se uma transformação de integrais para então aproximá-la pela quadratura unidimensional de Gauss-Christoffel. Não é apresentada nesse trabalho a construção analítica da quadratura de Gauss-Christoffel, mas esta pode ser encontrada em [1] juntamente com o código computacional em FORTRAN para sua geração.

Utiliza-se outra quadratura no tratamento da variável azimutal ϕ , de forma que:

$$\int_0^{\pi/2} f(\cos \phi, \sin \phi) d\phi \approx \sum_{i=1}^{N_\phi} w_i f(\cos \phi_i, \sin \phi_i), \quad (3.17)$$

onde as coordenadas ϕ_i e pesos w_i são encontrados pela solução de um sistema não-linear de equações e incógnitas, cujo sistema é resolvido pelo método iterativo de Newton. Assim como a quadratura de Gauss-Christoffel, o processo para obter estas coordenadas e pesos não é apresentado em detalhes neste trabalho, mas pode ser encontrado em Abu-Shumays [2]. De acordo com o autor, esta quadratura unidimensional na variável azimutal ϕ é exata por integrar funções polinomiais para $l+m \leq N_\phi - 1$, onde N_ϕ é a ordem da quadratura. O autor também afirma que, para que a quadratura QR gerada pela combinação dessas quadraturas unidimensionais seja consistente, o dobro de coordenadas e pesos são necessários para a variável polar θ do que para a variável azimutal ϕ . Desta forma, ao utilizar-se essa quadratura, tem-se um total de $M = N_\phi \times N_\theta = N_\phi \times (2N_\phi) = 2N_\phi^2$ direções discretas por octante.

A utilização de diferentes quadraturas afeta diretamente na expressão para a solução do problema bidimensional de transporte de partículas. O Capítulo 4 foca na solução analítica para os fluxos médios das equações integradas em formulações nodais, utilizando uma quadratura genérica, enquanto o Capítulo 5 usa os diferentes esquemas apresentados aqui na implementação e solução de casos testes diversos.

4 FORMULAÇÃO NODAL PARA A EQUAÇÃO BIDIMENSIONAL DE TRANSPORTE

A discretização da variável angular em ordenadas discretas permite a utilização de diferentes métodos de solução para o problema de transporte, particularmente no que diz respeito ao tratamento das variáveis espaciais através de métodos nodais.

Diferentes métodos têm sido desenvolvidos para o tratamento da variável espacial para o caso de aproximações em ordenadas discretas da equação de transporte [6, 9, 21, 53, 63, 65, 67, 68, 93, 94, 102, 111]. Neste trabalho, dá-se ênfase ao método Analítico de Ordenadas Discretas (ADO, do inglês, *Analytical Discrete Ordinates*), proposto por Barichello e Siewert [17]. Este método tem se destacado na literatura e é caracterizado por possibilitar, no tratamento de problemas unidimensionais, o uso de esquemas de quadratura arbitrário do tipo *half-range*. A abordagem ADO também possibilita uma redução pela metade na ordem do problema de autovalores que determina as autofunções que compõem a solução das equações em ordenadas discretas, o que implica em ganho no custo computacional. Em problemas unidimensionais, o método ADO tem sido amplamente utilizado, apresentando soluções explícitas e precisas em termos das variáveis espaciais, como já listado no Capítulo 1.

Devido à versatilidade do método ADO na resolução desses problemas, sua aplicação foi estendida para problemas multidimensionais. Para encontrar a solução destes, usam-se métodos nodais para reduzir o problema a um conjunto de equações unidimensionais, nas quais são aplicadas o método ADO. Esses métodos nodais baseiam-se em dividir o domínio em nodos onde a equação multidimensional em ordenadas discretas é integrada transversalmente, reduzindo-a a equações

unidimensionais e conseqüentemente, diminuindo a complexidade do modelo. Contudo, devido à integração, termos de fuga transversais desconhecidos no contorno dos nodos são introduzidos nas equações e é comum o uso de equações auxiliares para representar a dependência espacial desses termos de fuga transversais.

Neste capítulo, são apresentadas ideias básicas do método, ressaltando a geração do sistema linear que será base de estudos neste trabalho.

4.1 Equações Nodais

Buscando reduzir a complexidade do modelo e da equação de transporte, esquemas nodais são utilizados em problemas de transporte de nêutrons bidimensionais. A partir da equação de transporte (3.1) e da aproximação por ordenadas discretas (3.5), escreve-se a versão bidimensional em ordenadas discretas da equação de transporte como

$$\mu_m \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \vec{\Omega}_m) + \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \vec{\Omega}_m) + \sigma_t \Psi(x, y, \vec{\Omega}_m) = Q(x, y) + \sigma_s \sum_{k=1}^M w_k \Psi(x, y, \vec{\Omega}_k) \quad (4.1)$$

para $m = 1, 2, \dots, M$. Aqui, M é o número de direções discretas, proveniente do esquema de quadratura, como em (3.5). Os demais parâmetros são os mesmos presentes no Capítulo 3: σ_t representa a seção de choque macroscópica total, σ_s a seção de choque macroscópica de espalhamento diferencial e $Q(x, y)$ é o termo de fonte externa de nêutrons. $\vec{\Omega}_m$ são as direções discretas consideradas e $\Psi(x, y, \vec{\Omega}_m)$ é o fluxo angular calculado sobre esta direção.

Para este trabalho, seguindo a proposta de trabalhos anteriores [16, 76], considerou-se um domínio retangular com $x \in [0, a]$ e $y \in [0, b]$. Esse domínio foi então dividido em R subregiões (nodos) de forma que, em cada nodo, $x \in [a_{k-1}^r, a_k^r]$ e $y \in [b_{l-1}^r, b_l^r]$, onde $a_0^r = 0 < a_1^r < \dots < a_k^r < \dots < a$ e $b_0^r = 0 < b_1^r < \dots < b_l^r < \dots < b$. Aqui, $k = 0, \dots, K$ e $l = 0, \dots, L$ são associados ao número de subintervalos

considerados nos eixos x e y , respectivamente, para definir os nodos. Um processo de integração, que pode ser definido no domínio todo ou individualmente nos nodos, é então aplicado.

Para as M ordenadas discretas da aproximação, opta-se por ordená-las, assim como seus pesos, de forma que a primeira metade ($m = 1, \dots, M/2$), $\vec{\Omega}_m$ represente as direções incidentes (entrada) do fluxo de nêutrons em uma determinada fronteira e a segunda metade ($m = M/2 + 1, \dots, M$) represente as direções emergentes (saída). Dessa forma, temos a equação (4.1) reescrita na forma de dois conjuntos, onde cada um é associado a $M/2$ equações discretas. Essa escolha de ordenamento, estipulada por Barichello e Cabrera [13], afeta a construção do problema de autovalores na determinação da solução para a equação bidimensional em ordenadas discretas.

Assim, ao se analisar o fluxo angular médio de nêutrons dependente da variável x , associam-se as direções definidas para $\mu_m > 0$ aos índices $m = 1, \dots, M/2$ e $\mu_m < 0$ aos índices $m = M/2 + 1, \dots, M$, chegando à equação (4.1) reescrita como o conjunto

$$\begin{aligned} \mu_m \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \vec{\Omega}_m) + \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \vec{\Omega}_m) + \sigma_t \Psi(x, y, \vec{\Omega}_m) = \\ Q(x, y) + \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k \left[\Psi(x, y, \vec{\Omega}_k) + \Psi(x, y, \vec{\Omega}_{M/2+k}) \right] \end{aligned} \quad (4.2)$$

e

$$\begin{aligned} -\mu_m \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \vec{\Omega}_{M/2+m}) + \eta_{M/2+m} \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \vec{\Omega}_{M/2+m}) + \sigma_t \Psi(x, y, \vec{\Omega}_{M/2+m}) = \\ Q(x, y) + \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k \left[\Psi(x, y, \vec{\Omega}_k) + \Psi(x, y, \vec{\Omega}_{M/2+k}) \right] \end{aligned} \quad (4.3)$$

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

De forma análoga, se a variação do fluxo angular médio for mais significativo em relação à variável y , associa-se as direções definidas por $\eta_m > 0$ aos índices $m = 1, \dots, M/2$ e $\eta_m < 0$ aos índices $m = M/2 + 1, \dots, M$, de maneira que

a equação (4.1) seja reescrita da forma

$$\begin{aligned} \mu_m \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \vec{\Omega}_m) + \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \vec{\Omega}_m) + \sigma_t \Psi(x, y, \vec{\Omega}_m) = \\ Q(x, y) + \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k \left[\Psi(x, y, \vec{\Omega}_k) + \Psi(x, y, \vec{\Omega}_{M/2+k}) \right] \end{aligned} \quad (4.4)$$

e

$$\begin{aligned} \mu_{M/2+m} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \vec{\Omega}_{M/2+m}) - \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \vec{\Omega}_{M/2+m}) + \sigma_t \Psi(x, y, \vec{\Omega}_{M/2+m}) = \\ Q(x, y) + \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k \left[\Psi(x, y, \vec{\Omega}_k) + \Psi(x, y, \vec{\Omega}_{M/2+k}) \right] \end{aligned} \quad (4.5)$$

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

4.2 Equações Nodais Unidimensionais

O processo de integração transversal, que é a base dos métodos nodais, reduz o sistema de equações diferenciais parciais de duas variáveis em dois sistemas de equações diferenciais ordinárias, um na variável x e o outro na variável y . Partindo das equações (4.2)-(4.5), integra-se em cada uma das variáveis espaciais a fim de obter-se as chamadas equações nodais integradas transversalmente. Assim, a fim de obter um sistema de equações nodais unidimensionais dependentes da variável x , para cada nodo do domínio em estudo, integra-se as equações (4.2) e (4.3) na variável $y \in [b_{r-1}, b_r]$, obtendo-se

$$\begin{aligned} \mu_m \frac{d}{dx} \Psi_{yr}(x, \vec{\Omega}_m) + \sigma_t \Psi_{yr}(x, \vec{\Omega}_m) = \\ Q_{yr}(x, \vec{\Omega}_m) + \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k \left[\Psi_{yr}(x, \vec{\Omega}_k) + \Psi_{yr}(x, \vec{\Omega}_{M/2+k}) \right] \end{aligned} \quad (4.6)$$

e

$$\begin{aligned} -\mu_m \frac{d}{dx} \Psi_{yr}(x, \vec{\Omega}_{M/2+m}) + \sigma_t \Psi_{yr}(x, \vec{\Omega}_{M/2+m}) = \\ Q_{yr}(x, \vec{\Omega}_{M/2+m}) + \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k \left[\Psi_{yr}(x, \vec{\Omega}_k) + \Psi_{yr}(x, \vec{\Omega}_{M/2+k}) \right] \end{aligned} \quad (4.7)$$

para $m = 1, \dots, M/2$, onde os fluxos angulares médios em cada nodo r são definidos como

$$\Psi_{yr}(x, \vec{\Omega}_m) = \frac{1}{b_r - b_{r-1}} \int_{b_{r-1}}^{b_r} \Psi(x, y, \vec{\Omega}_m) dy \quad (4.8)$$

e a fonte integrada

$$Q_{yr}(x, \vec{\Omega}_m) = \frac{1}{b_r - b_{r-1}} \int_{b_{r-1}}^{b_r} Q(x, y) dy - \frac{\eta_m}{b_r - b_{r-1}} \left[\Psi(x, b_r, \vec{\Omega}_m) - \Psi(x, b_{r-1}, \vec{\Omega}_m) \right]. \quad (4.9)$$

Analogamente, para obter-se o sistema de equações nodais unidimensionais dependentes da variável y , para cada nodo r do domínio em estudo, integra-se as equações (4.4) e (4.5) na variável $x \in [a_{r-1}, a_r]$,

$$\begin{aligned} \eta_m \frac{d}{dy} \Psi_{xr}(y, \vec{\Omega}_m) + \sigma_t \Psi_{xr}(y, \vec{\Omega}_m) = \\ Q_{xr}(y, \vec{\Omega}_m) + \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k \left[\Psi_{xr}(y, \vec{\Omega}_k) + \Psi_{xr}(y, \vec{\Omega}_{M/2+k}) \right] \end{aligned} \quad (4.10)$$

e

$$\begin{aligned} -\eta_m \frac{d}{dy} \Psi_{xr}(y, \vec{\Omega}_{M/2+m}) + \sigma_t \Psi_{xr}(y, \vec{\Omega}_{M/2+m}) = \\ Q_{xr}(y, \vec{\Omega}_{M/2+m}) + \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k \left[\Psi_{xr}(y, \vec{\Omega}_k) + \Psi_{xr}(y, \vec{\Omega}_{M/2+k}) \right] \end{aligned} \quad (4.11)$$

para $m = 1, \dots, M/2$, onde os fluxos angulares médios em cada nodo r são definidos como

$$\Psi_{xr}(y, \vec{\Omega}_m) = \frac{1}{a_r - a_{r-1}} \int_{a_{r-1}}^{a_r} \Psi(x, y, \vec{\Omega}_m) dx \quad (4.12)$$

e a fonte integrada

$$Q_{xr}(y, \vec{\Omega}_m) = \frac{1}{a_r - a_{r-1}} \int_{a_{r-1}}^{a_r} Q(x, y) dx - \frac{\mu_m}{a_r - a_{r-1}} \left[\Psi(a_r, y, \vec{\Omega}_m) - \Psi(a_{r-1}, y, \vec{\Omega}_m) \right]. \quad (4.13)$$

Um ponto importante a notar-se é que, nas equações (4.6),(4.7),(4.10) e (4.11), os fluxos angulares $\Psi(x, b_r, \vec{\Omega}_m)$, $\Psi(x, b_{r-1}, \vec{\Omega}_m)$, $\Psi(a_r, y, \vec{\Omega}_m)$ e $\Psi(a_{r-1}, y, \vec{\Omega}_m)$ só podem ser conhecidos no contorno do domínio nas direções incidentes, sendo

desconhecidos nas demais direções e no interior do domínio. Isso leva a um sistema de equações em ordenadas discretas nas variáveis x e y com mais incógnitas do que equações e faz-se necessário o uso de alguma forma auxiliar para tornar os sistemas determináveis. Vários métodos vêm sendo propostos, mas destaca-se na abordagem ADO o trabalho de Barichello et al. [16], que faz aproximações por constantes para essas incógnitas. É esse método que será utilizado nesse trabalho.

4.3 O Método ADO em Problemas Bidimensionais

Aplicando-se a técnica nodal no sistema de equações bidimensionais em ordenadas discretas, reduz-se o sistema de equações diferenciais parciais a um sistema de equações diferenciais ordinárias, possibilitando-se o uso do método ADO para sua resolução. A abordagem ADO trata de encontrar uma solução para o problema homogêneo associado através da resolução de um problema simplificado de autovalores, onde a solução é obtida de forma analítica na variável espacial. Os autovalores encontrados dão origem às chamadas *constantes de separação* (ν e γ). O método propõe soluções homogêneas para as equações em termos das autofunções exponenciais

$$\Psi_{yr}^H(x, \vec{\Omega}_m) = \Phi_{yr}(\nu_r, \vec{\Omega}_m) e^{-x/\nu_r} \quad (4.14)$$

e

$$\Psi_{xr}^H(y, \vec{\Omega}_m) = \Phi_{xr}(\gamma_r, \vec{\Omega}_m) e^{-y/\gamma_r}. \quad (4.15)$$

Substituindo a equação (4.14) na versão homogênea das equações (4.6) e (4.7) e diferenciando, temos

$$-\frac{\mu_m}{\nu_r} \Psi_{yr}(\nu_r, \vec{\Omega}_m) + \sigma_t \Phi_{yr}(\nu_r, \vec{\Omega}_m) = \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k \left[\Phi_{yr}(\nu_r, \vec{\Omega}_k) + \Phi_{yr}(\nu_r, \vec{\Omega}_{M/2+k}) \right] \quad (4.16)$$

e

$$\frac{\mu_m}{\nu_r} \Psi_{yr}(\nu_r, \vec{\Omega}_{M/2+m}) + \sigma_t \Phi_{yr}(\nu_r, \vec{\Omega}_{M/2+m}) = \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k \left[\Phi_{yr}(\nu_r, \vec{\Omega}_k) + \Phi_{yr}(\nu_r, \vec{\Omega}_{M/2+k}) \right] \quad (4.17)$$

para $m = 1, \dots, M/2$. Define-se agora

$$U_{yr}(\nu_r, \vec{\Omega}_m) = \Phi_{yr}(\nu_r, \vec{\Omega}_m) + \Phi_{yr}(\nu_r, \vec{\Omega}_{M/2+m}) \quad (4.18)$$

e

$$V_{yr}(\nu_r, \vec{\Omega}_m) = \Phi_{yr}(\nu_r, \vec{\Omega}_m) - \Phi_{yr}(\nu_r, \vec{\Omega}_{M/2+m}). \quad (4.19)$$

Agora, somando as equações (4.16) e (4.17) obtém-se

$$V_{yr}(\nu_r, \vec{\Omega}_m) = \frac{\nu_r}{\mu_m} \sigma_t U_{yr}(\nu_r, \vec{\Omega}_m) + \frac{2\sigma_s \nu_r}{\mu_m} \sum_{k=1}^{M/2} w_k U_{yr}(\nu_r, \vec{\Omega}_k) \quad (4.20)$$

e, se for subtraída a equação (4.16) de (4.17), tem-se

$$V_{yr}(\nu_r, \vec{\Omega}_m) = \frac{\mu_m}{\nu_r \sigma_t} U_{yr}(\nu_r, \vec{\Omega}_m). \quad (4.21)$$

Se agora for substituída a equação (4.21) em (4.20), toda essa manipulação leva ao problema de autovalores de meia ordem $M/2 \times M/2$

$$[D_{yr} - A_{yr}] \vec{U}_{yr} = \lambda_{yr} \vec{U}_{yr}, \quad (4.22)$$

onde

$$\lambda_{yr} = \frac{1}{\nu_r^2}. \quad (4.23)$$

Aqui, \vec{U}_{yr} é o autovetor associado ao autovalor λ_{yr} e as matrizes D_{yr} e A_{yr} são de ordem $M/2 \times M/2$ e definidas como

$$D_{yr} = \text{diag} \left\{ \left(\frac{\sigma_t}{\mu_1} \right)^2, \left(\frac{\sigma_t}{\mu_2} \right)^2, \dots, \left(\frac{\sigma_t}{\mu_{M/2}} \right)^2 \right\} \quad (4.24)$$

e

$$A_{yr}(i, j) = \frac{2w_j \sigma_s \sigma_t}{\mu_i^2}, \quad (4.25)$$

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

Da solução do problema de autovalores, podem-se encontrar as auto-funções (4.14) em termos de \vec{U}_{yr} utilizando

$$\Phi_{yr}(\nu_{jr}, \vec{\Omega}_m) = \frac{U_{yr}(\nu_{jr}, \vec{\Omega}_m)}{2} \left[1 + \frac{\mu_m}{\nu_{jr}\sigma_t} \right] \quad (4.26)$$

e

$$\Phi_{yr}(\nu_{jr}, \vec{\Omega}_{M/2+m}) = \frac{U_{yr}(\nu_{jr}, \vec{\Omega}_{M/2+m})}{2} \left[1 - \frac{\mu_m}{\nu_{jr}\sigma_t} \right]. \quad (4.27)$$

De (4.23), vêem-se que as constantes de separação ν_r aparecem em pares positivo-negativo. Com isso em mente, escrevem-se a forma geral da solução homogênea, na direção x , como

$$\begin{aligned} \Psi_{yr}^H(x, \vec{\Omega}_m) = & \sum_{j=1}^{M/2} \left[A_{j,r} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \vec{\Omega}_m) e^{-(x-a_{r-1})/\nu_{jr}} \right. \\ & \left. + A_{M/2+j,r} \Psi_{yr}(\nu_{jr}, \vec{\Omega}_{M/2+m}) e^{-(a_r-x)/\nu_{jr}} \right] \end{aligned} \quad (4.28)$$

e

$$\begin{aligned} \Psi_{yr}^H(x, \vec{\Omega}_{M/2+m}) = & \sum_{j=1}^{M/2} \left[A_{j,r} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \vec{\Omega}_{M/2+m}) e^{-(x-a_{r-1})/\nu_{jr}} \right. \\ & \left. + A_{M/2+j,r} \Psi_{yr}(\nu_{jr}, \vec{\Omega}_m) e^{-(a_r-x)/\nu_{jr}} \right] \end{aligned} \quad (4.29)$$

onde os coeficientes $A_{i,r}$, para $i = 1, \dots, M$ devem ser determinados.

Para obter-se a solução homogênea na direção y na mesma região, utiliza-se um processo análogo, partindo da substituição de (4.15) em (4.10) e (4.11). Depois de encontrar a solução para o problema de autovalores e os valores de separação γ_r , tem-se a solução geral na forma

$$\begin{aligned} \Psi_{xr}^H(y, \vec{\Omega}_m) = & \sum_{j=1}^{M/2} \left[B_{j,r} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \vec{\Omega}_m) e^{-(y-b_{r-1})/\gamma_{jr}} \right. \\ & \left. + B_{M/2+j,r} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \vec{\Omega}_{M/2+m}) e^{-(b_r-y)/\gamma_{jr}} \right] \end{aligned} \quad (4.30)$$

e

$$\begin{aligned} \Psi_{xr}^H(y, \vec{\Omega}_{M/2+m}) = \sum_{j=1}^{M/2} & \left[B_{j,r} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \vec{\Omega}_{M/2+m}) e^{-(y-b_{r-1})/\gamma_{jr}} \right. \\ & \left. + B_{M/2+j,r} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \vec{\Omega}_m) e^{-(b_r-y)/\gamma_{jr}} \right] \end{aligned} \quad (4.31)$$

onde os coeficientes $B_{i,r}$, para $i = 1, \dots, M$ devem também ser determinados.

Vale ressaltar uma importante característica do método ADO: utilizando um conjunto de M ordenadas discretas, obtém-se problemas de autovalores de ordem $M/2$, uma significativa redução quando comparado com outros métodos de aproximações nodais utilizando ordenadas discretas [76].

4.4 Solução Geral em Problemas de Fonte-Fixa

Para se obter a solução geral de um problema de transporte de nêutrons bidimensional na presença de uma fonte fixa, uma solução particular $(\Psi_{yr}^P(x, \vec{\Omega}_m))$ ou $(\Psi_{xr}^P(y, \vec{\Omega}_m))$ deve ser encontrada. Para tanto, diferentes técnicas foram desenvolvidas como a utilização de funções de Green [38] ou a definição do termo fonte como uma função constante. Com a solução particular em mãos e a solução homogênea do método ADO, as soluções gerais são

$$\Psi_{yr}(x, \vec{\Omega}_m) = \Psi_{yr}^H(x, \vec{\Omega}_m) + \Psi_{yr}^P(x, \vec{\Omega}_m) \quad (4.32)$$

e

$$\Psi_{xr}(y, \vec{\Omega}_m) = \Psi_{xr}^H(y, \vec{\Omega}_m) + \Psi_{xr}^P(y, \vec{\Omega}_m). \quad (4.33)$$

para $r = 1, \dots, R$.

Para a construção da solução particular utilizando aproximação por constante, equações auxiliares se fazem necessárias. Como mencionado anteriormente, os fluxos angulares no contorno do domínio só são conhecidos nas direções incidentes e, dentre outras, uma forma de diminuir o impacto desse problema é aproximar os fluxos desconhecidos por polinômios de ordem zero, ou seja, constantes.

Outros métodos, como aproximações lineares ou exponenciais, também são presentes na literatura [31], embora não sejam abordadas nesse trabalho.

Os fluxos desconhecidos são aproximados por constantes dependentes da direção como

$$\Psi_r(x, b_m, \Omega_i) = K_{m,r,i} \quad (4.34)$$

$$\Psi_r(x, b_{m-1}, \Omega_i) = K_{m-1,r,i} \quad (4.35)$$

$$\Psi_r(x, a_m, \Omega_i) = L_{m,r,i} \quad (4.36)$$

$$\Psi_r(x, a_{m-1}, \Omega_i) = L_{m-1,r,i} \quad (4.37)$$

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

As equações auxiliares são agrupadas ao termo fonte, passando a ser considerado como

$$Q_{yr}(x, \Omega_i) = \begin{cases} 1 - \frac{\eta_i}{b_m - b_{m-1}} [K_{m,r,i} - K_{m-1,r,i}] & \text{para } r = 1 \\ -\frac{\eta_i}{b_m - b_{m-1}} [K_{m,r,i} - K_{m-1,r,i}] & \text{para as demais regiões.} \end{cases} \quad (4.38)$$

e

$$Q_{xr}(y, \Omega_i) = \begin{cases} 1 - \frac{\mu_i}{a_m - a_{m-1}} [L_{m,r,i} - L_{m-1,r,i}] & \text{para } r = 1 \\ -\frac{\mu_i}{a_m - a_{m-1}} [L_{m,r,i} - L_{m-1,r,i}] & \text{para as demais regiões.} \end{cases} \quad (4.39)$$

onde $i = 1, \dots, M$ e $r = 1, \dots, R$. A partir do uso de aproximações constantes, a forma final do termo não-homogêneo também será constante. Assim, para $i = 1, \dots, M$, propõe-se

$$\Psi_{yr}^P(x, \Omega_i) = C_{i,r} \quad (4.40)$$

e

$$\Psi_{xr}^P(y, \Omega_i) = D_{i,r} \quad (4.41)$$

com $r = 1, \dots, R$.

Depois de estabelecidas expressões para as soluções homogêneas e particulares para as equações unidimensionais integradas transversalmente, a saber

(4.28)–(4.29) e (4.30)–(4.31), a solução geral para o fluxo angular integrado na região r e direção x pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \Psi_{yr}(x, \vec{\Omega}_m) = \sum_{j=1}^{M/2} \left[A_{j,r} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \vec{\Omega}_m) e^{-(x-a_{r-1})/\nu_{jr}} \right. \\ \left. + A_{M/2+j,r} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \vec{\Omega}_{M/2+m}) e^{-(a_r-x)/\nu_{jr}} \right] + C_{m,r} \end{aligned} \quad (4.42)$$

e

$$\begin{aligned} \Psi_{yr}(x, \vec{\Omega}_{M/2+m}) = \sum_{j=1}^{M/2} \left[A_{j,r} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \vec{\Omega}_{M/2+m}) e^{-(x-a_{r-1})/\nu_{jr}} \right. \\ \left. + A_{M/2+j,r} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \vec{\Omega}_m) e^{-(a_r-x)/\nu_{jr}} \right] + C_{M/2+m,r} \end{aligned} \quad (4.43)$$

para $x \in [a_{r-1}, a_r]$, e

$$\begin{aligned} \Psi_{xr}(y, \vec{\Omega}_m) = \sum_{j=1}^{M/2} \left[B_{j,r} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \vec{\Omega}_m) e^{-(y-b_{r-1})/\gamma_{jr}} \right. \\ \left. + B_{M/2+j,r} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \vec{\Omega}_{M/2+m}) e^{-(b_r-y)/\gamma_{jr}} \right] + D_{m,r} \end{aligned} \quad (4.44)$$

e

$$\begin{aligned} \Psi_{xr}(y, \vec{\Omega}_{M/2+m}) = \sum_{j=1}^{M/2} \left[B_{j,r} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \vec{\Omega}_{M/2+m}) e^{-(y-b_{r-1})/\gamma_{jr}} \right. \\ \left. + B_{M/2+j,r} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \vec{\Omega}_m) e^{-(b_r-y)/\gamma_{jr}} \right] + D_{M/2+m,r} \end{aligned} \quad (4.45)$$

para $y \in [b_{r-1}, b_r]$.

As expressões (4.42)–(4.45) envolvem, em cada região, $4M$ coeficientes arbitrários a serem determinados: $2M$ provenientes da solução homogênea (coeficientes A e B) e $2M$ da solução particular (coeficientes C e D). Sendo R o número total de regiões no domínio, um sistema linear de ordem $4MR$ deve ser então resolvido para a obtenção da expressão final para o fluxo angular médio em todas as regiões. No capítulo a seguir são analisados problemas onde esses sistemas lineares surgem e que são então resolvidos através de diferentes métodos numéricos.

5 RESULTADOS

Problemas de transporte de fonte fixa em geometria bidimensional são um aspecto frequentemente estudado em anos recentes pelo grupo de estudo do Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, do qual o autor deste trabalho faz parte. Em diversos trabalhos publicados por autores do grupo dá-se ênfase à aplicação do métodos ADO nesses problemas. Conseqüentemente, os sistemas lineares provenientes dessa aplicação surgem como aspecto fundamental desse estudo. Em alguns casos, matrizes de alta ordem apresentam-se como uma limitação computacional para a resolução dos problemas de transporte, principalmente pela escolha de solução dos sistemas lineares através de métodos diretos. A principal motivação para este trabalho é, portanto, a implementação de métodos diretos na solução dos sistemas lineares provenientes de problemas de transporte previamente estudados pelo grupo de estudo. A seguir, são apresentados casos teste cuja origem encontra-se em trabalhos publicados por membros desse grupo.

Nesse trabalho, os sistemas oriundos dos problemas de transporte bidimensional foram abordados como uma extensão do trabalho de da Cunha et al. [32]. Nele, um típico problema de transporte bidimensional é estudado e os sistemas lineares provenientes do método exibido no capítulo 4 são resolvidos através de métodos iterativos como o GMRES e o LGMRES. A implementação dos métodos é parte do pacote NUMERICO, de da Cunha [33], escrito em Fortran 95. O pacote inclui, entre outras características, outros métodos iterativos, diferentes modos de armazenamento de matrizes esparsas e a possibilidade de uso de pré-condicionadores, como os pré-condicionadores Jacobiano, ILU(0) e IC(0) [32]. O pacote NUMERICO também abrange implementação dos códigos para processamento em paralelo utilizando MPI (*Message Passing Interface*), permitindo maior eficiência nos métodos numéricos. Diferentemente do trabalho supracitado [32], processamento em para-

lelo não foi utilizado nesse trabalho. As simulações numéricas foram realizadas em um cluster SGI ALTix no Centro Nacional de Supercomputação (CESUP/UFRGS) equipado com 64 unidades de processamento, cada uma com dois processadores dodecacore e 64 GB de memória RAM e interconectados por uma rede InfiniBand.

A principal motivação para a utilização de métodos iterativos na solução dos sistemas lineares é a abordagem de sistemas de alta ordem provenientes de problemas com um grande número de regiões ou de direções discretas, essas diretamente relacionadas com a ordem de quadratura utilizada. Os problemas aqui apresentados possuem solução discutidas em [31] e [74], entre outros, onde a ordem das matrizes dos sistemas lineares se mostrou um limite devido ao custo computacional envolvido. O uso dos métodos baseados em iterações em espaços de Krylov nos permitem resolver sistemas de ordens maiores sem um custo proibitivo. Além disso, o uso de métodos diretos em matrizes esparsas leva a inconveniências que podem tornar tais métodos impraticáveis [81].

Os métodos iterativos muitas vezes são associados a pré-condicionadores. Para este trabalho, foram utilizados inicialmente os pré-condicionadores presentes no pacote NUMERICO [33], muitos dos quais não auxiliaram na convergência dos métodos. Por fim, voltou-se à escolha de pré-condicionamento presente no trabalho de da Cunha et al. Neste, optou-se pelo uso de equações normais na solução dos sistemas lineares, evitando assim problemas de convergência nos métodos iterativos. Além disso, fez-se uso de um pré-condicionador Jacobiano no sistema para acelerar a convergência. Dessa forma, encontrar a solução para o sistema $A\vec{x} = \vec{b}$ passa a ser o mesmo que encontrar uma solução para o sistema $JA^T A\vec{x} = JA^T \vec{b}$ e pode-se considerar a matriz JA^T como um pré-condicionador final para o sistema original. Essa opção traz vantagens em alocação de memória, visto que apenas a matriz esparsa A é armazenada e é a mesma abordagem escolhida para a solução de sistemas lineares neste trabalho. A escolha dessa matriz de pré-condicionamento foi feita seguindo um estudo que analisou aspectos das matrizes como estrutura de seus elementos

não nulos e distribuição dos autovalores no plano complexo. A figura 5.1 mostra os resultados presentes em [32]. A mesma abordagem foi feita para os problemas aqui presentes.

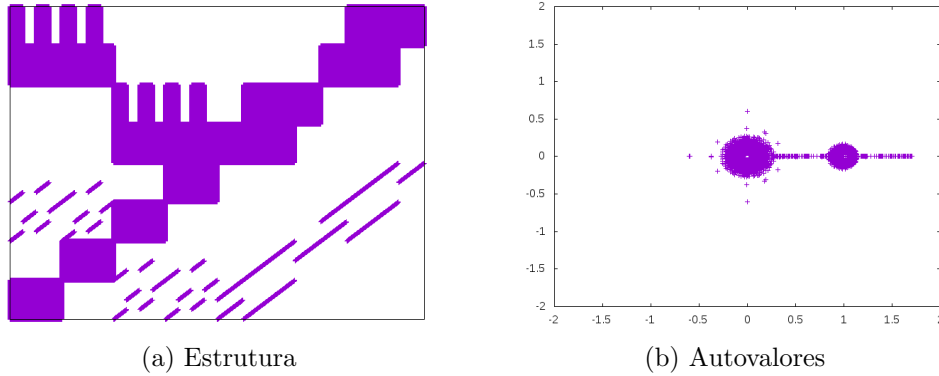


Figura 5.1: Estrutura e autovalores das matrizes presentes em [32]

Para todos os problemas aqui resolvidos, utilizou-se as mesmas nove variações dos métodos iterativos mencionados no capítulo 2: GMRES(m) reinicializado com $m \in \{10, 20, 30\}$ e LGMRES(m, l) com as mesmas escolhas de m e $l \in \{5, 10, 15\}$, satisfazendo a condição $l < m$ de acordo com o capítulo 2. Isso nos gera as seguintes combinações:

- GMRES(10) • GMRES(20) • GMRES(30)
- LGMRES(10, 5) • LGMRES(20, 5) • LGMRES(20, 10)
- LGMRES(30, 5) • LGMRES(30, 10) • LGMRES(30, 15)

Além disso, os métodos iterativos foram aplicados tomando como critérios de parada a norma do resíduo ($\|\vec{r}\| < 10^{-12}$ indicando uma convergência) ou o número de iterações ($k > n/2$ indicando uma divergência). Cada problema foi resolvido cinco vezes através de cada escolha de parâmetros dos métodos iterativos e tomou-se a média aritmética de medidas como o tempo computacional (medido em segundos), apresentadas a seguir.

As escolhas para os parâmetros m e l foram feitas ao longo do trabalho. Inicialmente, estudou-se a possibilidade de trabalhar com o método GMRES sem

reinicialização (onde a dimensão m da base de Krylov é igual à ordem n da matriz do sistema linear), mas essa escolha se mostrou ineficiente, muitas vezes ultrapassando um número tolerável de iterações antes de chegar à convergência. A reinicialização do método mostrou-se algo essencial para economia computacional e convergência em tempos hábeis. Testes foram feitos com escolhas de m tão grandes quanto $n/2$ e outros valores em função de n mas, no final, optou-se pelo uso de valores constantes para m (10, 20 e 30) e l (5, 10 e 15), de acordo com as escolhas feitas em [32]. É importante mencionar que os métodos GMRES(m) e LGMRES(m, l) implementados no pacote NUMERICO são adaptativos em relação à dimensão da base do subespaço de Krylov, ou seja, o valor de m pode ser alterado entre iterações para garantir uma melhor base para a convergência do método. É comum que, quando a escolha inicial de m não é grande o suficiente, o método o aumenta de acordo; se a taxa de convergência é suficientemente grande, m é reduzido. Diferentes trabalhos apresentam métodos de adaptatividade para a escolha ideal de m entre iterações [11, 12, 48, 49]. Portanto, a escolha do parâmetro m representa apenas um valor inicial para a dimensão da base de Krylov, podendo esta ser alterada durante o processo.

5.1 Problema 1

Iniciou-se esse trabalho com a verificação dos resultados obtidos por Cromianski em [31]. O problema considerado consiste de um meio homogêneo, com espalhamento isotrópico definido em um domínio retangular $a = b = 1.0\text{cm}$. O domínio é dividido em quatro regiões, como na figura 5.2. A região I , em $[0, 0.5] \times [0, 0.5]$, contém uma fonte fixa isotrópica $Q(x, y) = 1.0$ e as seções de choque são definidas como $\sigma_t = 1.0\text{cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0.5\text{cm}^{-1}$ nas quatro regiões.

Em [31], os sistemas de equações associados ao problema de transporte bidimensional foram resolvidos através de métodos diretos da biblioteca LAPACK,

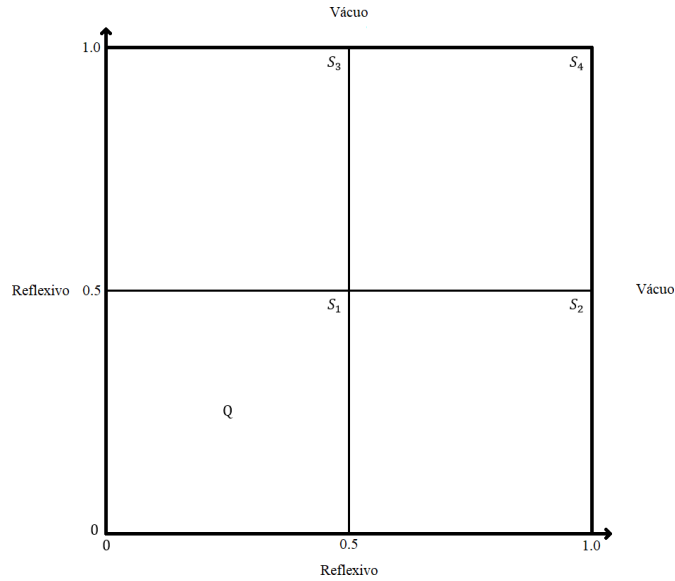
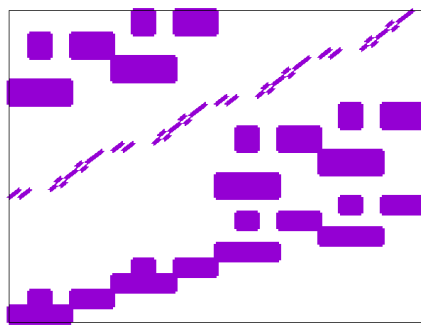


Figura 5.2: Geometria do problema 1.

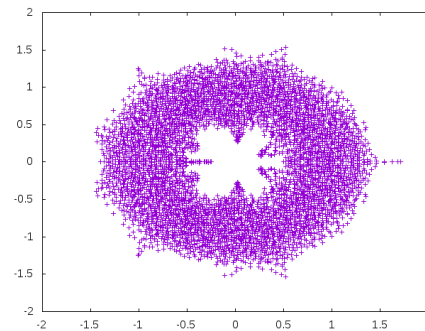
em linguagem Fortran 77. Diferentes escolhas foram feitas para o número M de direções ordenadas e as quatro quadraturas mencionadas no Capítulo 3 foram utilizadas na aproximação das variáveis angulares.

Após a verificação das soluções via métodos diretos, a abordagem mudou para a utilização dos métodos iterativos. Para encontrar as constantes das soluções gerais do problema de transporte, os sistemas lineares foram resolvidos através dos métodos iterativos GMRES(m) e LGMRES(m, l) afim de comparar e validar os resultados. As tabelas 5.1 - 5.4 apresentam os dados obtidos nos testes numéricos para este problema nas diferentes quadraturas numéricas apresentadas no Capítulo 3.

O posicionamento dos valores não nulos das matrizes desse problema, assim como a distribuição de seus autovalores no plano complexo, foi estudado em acordo com o trabalho de da Cunha [32]. As diferentes quadraturas numéricas afetam de forma não perceptiva esses resultados e, portanto, a fim de exemplificar, a figura 5.3 mostra esses resultados para a quadratura $P_N T_N$ e ordem $n = 5120$.



(a) Estrutura



(b) Autovalores

Figura 5.3: Estrutura e autovalores das matrizes do Problema 1.

Os dados são organizados de acordo com a ordem da quadratura N , associada a um número de direções bidimensionais ND de acordo com a formulação na seção 3.2 que, por sua vez, determina a ordem do sistema linear n de acordo com a formulação na seção 4.4. O caso particular da quadratura QR apresenta N_ϕ como ordem da quadratura, representando a ordem da quadratura unidimensional na variável azimutal, de acordo com a seção 3.2.3.

Apresenta-se nas tabelas o número de iterações k do método iterativo em particular, assim como o tempo computacional t , medido em segundos, tomado por este. Além disso, apresenta-se também o tempo computacional total T , também em segundos, tomado pelo programa como um todo. Esse processo inclui a leitura do arquivo com as entradas da matriz A do sistema linear, a construção do pré-condicionador JA^T e o próprio método iterativo de solução do sistema.

Tabela 5.1: Problema 1, quadratura LQ_N

N	ND	n	GMRES(10)			GMRES(20)			GMRES(30)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	80	31	0,01	0,01	21	0,01	0,01	10	0,00	0,01
4	3	240	32	0,05	0,09	24	0,04	0,09	18	0,05	0,09
6	6	480	35	0,18	0,32	30	0,19	0,33	21	0,16	0,31
8	10	800	35	0,40	0,69	28	0,43	0,72	22	0,40	0,73
12	21	1680	160	16,76	17,87	45	7,30	8,43	34	6,70	7,93
16	36	2880	197	60,92	64,28	57	28,09	31,39	41	27,23	30,38
N	ND	n	LGMRES(10,5)			LGMRES(20,5)			LGMRES(20,10)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	80	18	0,00	0,01	13	0,00	0,01	14	0,00	0,01
4	3	240	28	0,04	0,08	21	0,04	0,08	22	0,05	0,09
6	6	480	35	0,14	0,28	24	0,14	0,28	23	0,13	0,27
8	10	800	31	0,37	0,67	30	0,38	0,68	27	0,41	0,73
12	21	1680	59	5,62	6,74	46	5,54	6,65	42	5,80	6,93
16	36	2880	78	23,09	26,32	45	20,87	24,12	46	21,45	24,64
N	ND	n	LGMRES(30,5)			LGMRES(30,10)			LGMRES(30,15)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	80	9	0,00	0,01	10	0,01	0,01	10	0,01	0,01
4	3	240	14	0,04	0,08	15	0,04	0,08	17	0,04	0,09
6	6	480	20	0,14	0,28	15	0,12	0,26	17	0,14	0,28
8	10	800	22	0,44	0,76	17	0,33	0,62	19	0,34	0,64
12	21	1680	41	5,41	6,52	33	5,50	6,62	29	4,87	5,98
16	36	2880	39	20,73	24,14	36	19,50	22,78	34	18,43	21,63

Tabela 5.2: Problema 1, quadratura $P_N T_N$

N	ND	n	GMRES(10)			GMRES(20)			GMRES(30)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	80	26	0,01	0,01	23	0,01	0,01	12	0,01	0,01
4	4	320	29	0,06	0,13	28	0,08	0,15	17	0,07	0,14
6	9	720	33	0,22	0,48	20	0,20	0,46	18	0,21	0,47
8	16	1280	31	0,74	1,40	26	0,78	1,44	23	0,83	1,49
12	36	2880	33	4,42	7,71	26	4,30	7,56	25	4,96	8,17
14	49	3920	33	8,00	14,12	26	7,58	13,66	24	8,33	14,35
16	64	5120	30	12,02	22,74	27	13,70	24,22	25	14,81	25,26
20	100	8000	31	30,64	57,87	27	32,55	61,07	26	36,38	64,88
N	ND	n	LGMRES(10,5)			LGMRES(20,5)			LGMRES(20,10)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	80	17	0,00	0,01	13	0,01	0,01	14	0,01	0,01
4	4	320	26	0,07	0,14	19	0,06	0,13	20	0,06	0,14
6	9	720	29	0,22	0,48	21	0,19	0,43	17	0,18	0,44
8	16	1280	33	0,73	1,40	23	0,66	1,32	18	0,64	1,30
12	36	2880	38	4,84	8,17	26	4,09	7,40	21	4,14	7,37
14	49	3920	35	8,45	14,55	26	7,44	13,52	20	7,19	13,26
16	64	5120	38	14,52	25,01	27	13,07	23,82	23	13,17	23,76
20	100	8000	34	34,39	62,47	28	33,02	62,62	23	33,06	62,64
N	ND	n	LGMRES(30,5)			LGMRES(30,10)			LGMRES(30,15)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	80	9	0,00	0,01	11	0,01	0,01	12	0,01	0,01
4	4	320	13	0,06	0,13	14	0,06	0,13	16	0,07	0,14
6	9	720	14	0,17	0,44	15	0,18	0,43	17	0,19	0,45
8	16	1280	15	0,57	1,24	16	0,61	1,29	18	0,66	1,33
12	36	2880	17	3,64	6,91	18	3,90	7,11	20	4,22	7,44
14	49	3920	17	6,54	12,66	18	7,11	13,26	19	7,45	13,58
16	64	5120	18	11,32	21,92	19	12,89	23,49	20	12,85	23,54
20	100	8000	18	29,02	58,39	19	31,50	59,62	21	33,24	62,17

Tabela 5.3: Problema 1, quadratura $P_N T_N S_N$

			GMRES(10)			GMRES(20)			GMRES(30)		
N	ND	n	k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	80	26	0,01	0,01	23	0,01	0,01	12	0,01	0,01
4	3	240	28	0,04	0,08	28	0,04	0,08	16	0,04	0,08
6	6	480	31	0,10	0,24	31	0,13	0,27	18	0,11	0,25
8	10	800	36	0,32	0,62	25	0,30	0,61	22	0,33	0,64
10	15	1200	34	0,68	1,29	25	0,60	1,20	21	0,66	1,26
12	21	1680	33	1,54	2,69	26	1,47	2,65	23	1,62	2,73
16	36	2880	34	4,68	7,99	26	4,42	7,79	24	4,83	8,14
20	55	4400	34	10,29	18,23	26	9,73	17,67	24	10,94	18,91
22	66	5280	36	15,84	27,32	26	14,43	25,78	24	15,43	27,18
28	105	8400	33	35,16	66,99	26	34,20	65,26	25	38,06	71,61
			LGMRES(10,5)			LGMRES(20,5)			LGMRES(20,10)		
N	ND	n	k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	80	17	0,00	0,01	13	0,00	0,01	14	0,00	0,01
4	3	240	26	0,04	0,09	18	0,03	0,07	19	0,04	0,08
6	6	480	31	0,10	0,24	20	0,09	0,23	21	0,10	0,25
8	10	800	31	0,28	0,58	22	0,25	0,54	17	0,23	0,51
10	15	1200	37	0,70	1,30	24	0,60	1,26	25	0,68	1,30
12	21	1680	33	1,54	2,69	24	1,33	2,46	19	1,35	2,49
16	36	2880	37	4,79	8,12	26	4,24	7,54	21	4,42	7,72
20	55	4400	36	10,49	18,62	26	9,65	17,59	22	9,96	17,90
22	66	5280	36	15,30	26,88	27	13,72	25,26	22	14,41	26,06
28	105	8400	37	38,18	70,21	27	35,02	67,20	23	36,62	68,22
			LGMRES(30,5)			LGMRES(30,10)			LGMRES(30,15)		
N	ND	n	k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	80	9	0,01	0,01	11	0,01	0,01	12	0,00	0,01
4	3	240	13	0,04	0,08	14	0,04	0,07	16	0,04	0,08
6	6	480	13	0,09	0,23	14	0,10	0,23	16	0,11	0,25
8	10	800	14	0,21	0,52	15	0,24	0,52	18	0,26	0,55
10	15	1200	15	0,55	1,16	17	0,60	1,23	18	0,61	1,21
12	21	1680	16	1,22	2,37	17	1,31	2,45	19	1,42	2,59
16	36	2880	17	3,71	7,04	18	4,10	7,43	19	4,25	7,54
20	55	4400	17	8,64	16,64	19	9,40	18,67	20	9,76	17,83
22	66	5280	17	12,16	23,56	19	13,19	24,89	20	13,68	25,10
28	105	8400	18	30,22	61,32	19	33,73	67,09	20	34,65	66,14

Tabela 5.4: Problema 1, quadratura QR

N_ϕ	ND	n	GMRES(10)			GMRES(20)			GMRES(30)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	2	160	22	0,01	0,03	15	0,01	0,03	10	0,02	0,04
4	8	640	30	0,19	0,42	23	0,18	0,39	19	0,18	0,40
6	18	1440	32	1,06	1,94	25	1,04	1,90	23	1,10	1,95
10	50	4000	32	8,31	14,90	26	8,18	14,87	25	9,42	16,12
12	72	5760	33	16,72	30,73	27	17,00	30,97	24	18,04	32,31
14	98	7840	32	30,58	57,63	27	29,93	57,93	25	34,08	65,25
N_ϕ	ND	n	LGMRES(10,5)			LGMRES(20,5)			LGMRES(20,10)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	2	160	23	0,02	0,03	13	0,02	0,04	15	0,02	0,04
4	8	640	32	0,18	0,40	21	0,15	0,35	21	0,17	0,38
6	18	1440	32	1,02	1,87	23	0,91	1,76	18	0,87	1,74
10	50	4000	35	8,79	15,35	27	8,18	14,90	21	7,90	14,47
12	72	5760	39	18,90	32,70	26	16,03	30,13	21	16,17	30,07
14	98	7840	34	33,11	59,95	28	30,72	57,41	23	30,98	58,89
N_ϕ	ND	n	LGMRES(30,5)			LGMRES(30,10)			LGMRES(30,15)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	2	160	9	0,01	0,03	10	0,01	0,03	10	0,01	0,03
4	8	640	13	0,14	0,34	14	0,14	0,36	17	0,16	0,38
6	18	1440	15	0,76	1,64	15	0,82	1,69	18	0,92	1,76
10	50	4000	17	7,03	13,59	18	7,52	14,10	19	7,76	14,57
12	72	5760	17	14,49	28,63	18	15,39	29,24	20	16,23	30,24
14	98	7840	18	28,34	55,20	19	30,14	58,02	20	31,24	59,89

Inicialmente, pode-se notar que, como esperado, o número de iterações (k) necessárias para a convergência do método cresce juntamente com a ordem da matriz do problema (n). No entanto, comparando diretamente os resultados para a quadratura de nível simétrica (LQ_N) e a quadratura triangular de Legendre-Chebyshev ($P_N T_N S_N$) – que possuem disposição parecida de ordenadas discretas na esfera unitária e, portanto, mesma ordem de sistema para determinada ordem

de quadratura – vê-se que a quadratura LQ_N apresenta números de iterações (k) muito maiores do que os sistemas de mesma ordem (n) na quadratura $P_N S_N$. Isto ocorre nas simulações com todas as variações dos esquemas iterativos, sugerindo que os sistemas de equações provenientes de problemas aplicados à quadratura LQ_N sejam menos propícios à utilização de métodos iterativos que os sistemas dos mesmos problemas aplicados à quadratura $P_N T_N S_N$. Levando em consideração que esta quadratura não apresenta a mesma limitação física daquela (que proíbe ordens de quadratura maiores que 20, como visto no capítulo 3), afirma-se inicialmente que, para este problema, a quadratura $P_N T_N S_N$ é preferível à quadratura LQ_N nas mesmas condições. Também como esperado, o tempo tomado pelo método iterativo cresce ao passo que o número de iterações cresce (consequentemente, ao passo que a ordem do sistema cresce), tornando a quadratura de nível simétrica muito mais lenta que a outra.

Embora as quadraturas $P_N T_N S_N$, $P_N T_N$ e QR não tenham mesmas ordens nas matrizes dos sistemas lineares – devido a diferentes formulações relacionando a ordem da quadratura N com o número de ordenadas discretas ND – pode-se comparar matrizes de ordem similar para analisar a discrepância entre as grandezas analisadas. Por exemplo, pode-se comparar com certa equabilidade os sistemas de ordem 8400 na quadratura $P_N T_N S_N$ ($N = 28, ND = 105$, Tabela 5.3), de ordem 8000 na quadratura $P_N T_N$ ($N = 20, ND = 100$, Tabela 5.2) e ordem 7840 na quadratura QR ($N_\phi = 14, ND = 98$, Tabela 5.4). Nesta comparação, vê-se que o número de iterações é praticamente o mesmo para as três quadraturas em cada método iterativo – por exemplo, $k = 18$ em todas para LGMRES(30, 5) ou $k = 26$ para a $P_N T_N S_N$ e $k = 27$ nas outras duas para GMRES(20). Ressalta-se ainda que, para esse problema, o número de iterações semelhante entre as quadraturas também implica em tempo computacional similar. Dessa forma, uma conclusão preliminar é que a escolha da quadratura não influencia significativamente no tempo de processamento até a convergência.

No entanto, ainda é de interesse a diferença entre as escolhas dos parâmetros para os métodos iterativos. Com exceção da quadratura LQ_N , todas as demais apresentam resultados semelhante quanto à escolha de parâmetros com menor tempo computacional para o método iterativo: LGMRES(30, 5). Como todos os testes numéricos convergiram em um tempo considerável, uma análise das outras opções apresenta resultados aparentemente mais rápidos com o método LGMRES do que com o GMRES, como é esperado visto que aquele é um método de aceleração deste.

5.2 Problema 2

Como segundo caso teste, considera-se um meio heterogêneo com espalhamento isotrópico conforme proposto por Azmy [6], também com domínio retangular, de tamanho $a = b = 10.0\text{cm}$ e fonte fixa isotrópica $Q(x, y) = 1.0$ na região $[0, 5.0] \times [0, 5.0]$. A figura 5.4 representa o domínio para esse problema. Na região da fonte, temos $\sigma_t = 1.0\text{cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0.5\text{cm}^{-1}$ enquanto que, nas demais, a seção de choque macroscópica total é $\sigma_t = 2.0\text{cm}^{-1}$ e a seção de choque de espalhamento é $\sigma_s = 0.1\text{cm}^{-1}$.

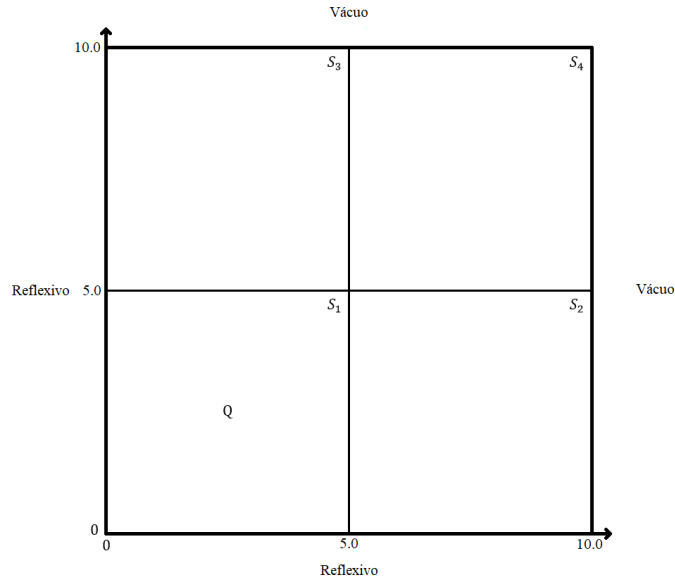
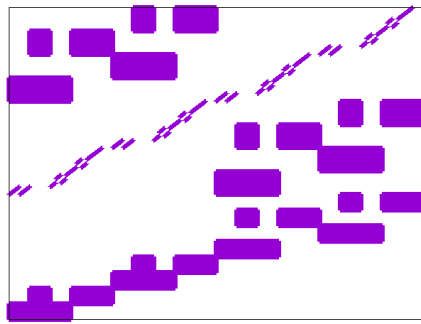


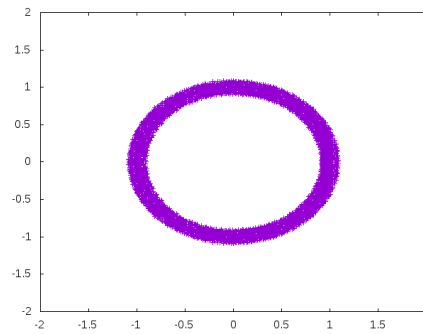
Figura 5.4: Geometria do problema 2.

Esse problema foi resolvido em trabalhos como os de Cromianski [31] e Picoloto [74] com diferentes ênfases. Resultados para este problema também estão presentes em [16, 76]

Novamente, as tabelas 5.5 – 5.8 são organizadas de acordo com a ordem da quadratura (N e N_ϕ) e apresentam o número de iterações (k), o tempo tomado computacionalmente pelo método (t) e o tempo total do processo (T) para as diferentes quadraturas e diferentes métodos iterativos. Também apresentam-se na figura 5.5 a estrutura e distribuição dos autovalores de uma matriz exemplo (quadratura $P_N T_N S_N$, $n = 4400$) deste Problema.



(a) Estrutura



(b) Autovalores

Figura 5.5: Estrutura e autovalores das matrizes do Problema 2.

Tabela 5.5: Problema 2, quadratura LQ_N

N	ND	n	GMRES(10)			GMRES(20)			GMRES(30)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	80	5	0,00	0,01	2	0,00	0,00	1	0,00	0,01
4	3	240	6	0,00	0,05	3	0,00	0,05	2	0,01	0,05
6	6	480	13	0,03	0,17	6	0,02	0,17	4	0,02	0,11
8	10	800	24	0,12	0,42	10	0,08	0,39	6	0,08	0,38
12	21	1680	54	4,21	5,38	31	3,51	4,62	26	3,34	4,46
16	36	2880	60	14,95	18,26	30	9,10	12,36	32	11,49	14,78
N	ND	n	LGMRES(10,5)			LGMRES(20,5)			LGMRES(20,10)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	80	5	0,00	0,00	2	0,00	0,00	2	0,00	0,00
4	3	240	6	0,01	0,05	3	0,01	0,05	3	0,00	0,05
6	6	480	11	0,03	0,17	6	0,03	0,17	6	0,03	0,17
8	10	800	17	0,10	0,41	8	0,08	0,38	10	0,08	0,39
12	21	1680	49	3,03	4,18	29	2,94	4,07	31	2,98	4,11
16	36	2880	47	9,04	12,29	31	8,40	11,71	33	9,26	12,49
N	ND	n	LGMRES(30,5)			LGMRES(30,10)			LGMRES(30,15)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	80	1	0,00	0,00	1	0,00	0,00	1	0,00	0,00
4	3	240	2	0,01	0,05	2	0,01	0,05	2	0,00	0,05
6	6	480	4	0,02	0,16	4	0,02	0,16	4	0,03	0,17
8	10	800	6	0,08	0,38	6	0,08	0,39	6	0,08	0,38
12	21	1680	30	3,01	4,14	21	2,87	4,01	23	3,08	4,27
16	36	2880	25	8,24	11,56	20	7,82	11,07	23	8,68	11,98

Tabela 5.6: Problema 2, quadratura $P_N T_N$

N	ND	n	GMRES(10)			GMRES(20)			GMRES(30)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	80	5	0,00	0,01	2	0,00	0,00	1	0,00	0,00
4	4	320	6	0,01	0,08	3	0,00	0,08	2	0,01	0,08
6	9	720	6	0,02	0,28	3	0,02	0,29	2	0,02	0,28
8	16	1280	6	0,08	0,74	3	0,06	0,76	2	0,06	0,78
12	36	2880	6	0,42	3,82	3	0,36	3,73	2	0,34	3,72
14	49	3920	6	0,77	7,25	3	0,66	7,02	2	0,64	7,20
16	64	5120	6	1,31	12,44	3	1,14	12,27	2	1,10	12,21
20	100	8000	6	3,21	33,17	3	2,64	32,48	2	2,66	32,06
N	ND	n	LGMRES(10,5)			LGMRES(20,5)			LGMRES(20,10)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	80	5	0,00	0,01	2	0,00	0,01	2	0,00	0,01
4	4	320	6	0,01	0,08	3	0,00	0,08	3	0,00	0,08
6	9	720	6	0,02	0,28	3	0,02	0,28	3	0,02	0,28
8	16	1280	6	0,08	0,81	3	0,07	0,77	3	0,06	0,78
12	36	2880	6	0,42	3,80	3	0,36	3,73	3	0,36	3,74
14	49	3920	6	0,77	7,12	3	0,66	7,02	3	0,66	7,05
16	64	5120	6	1,26	12,14	3	1,13	12,02	3	1,12	12,05
20	100	8000	6	3,08	32,70	3	2,81	32,31	3	2,80	32,61
N	ND	n	LGMRES(30,5)			LGMRES(30,10)			LGMRES(30,15)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	80	1	0,00	0,00	1	0,00	0,01	1	0,00	0,00
4	4	320	2	0,00	0,07	2	0,01	0,07	2	0,01	0,08
6	9	720	2	0,02	0,28	2	0,02	0,28	2	0,02	0,27
8	16	1280	2	0,06	0,74	2	0,06	0,76	2	0,06	0,76
12	36	2880	2	0,34	3,70	2	0,33	3,72	2	0,34	3,78
14	49	3920	2	0,64	7,00	2	0,65	7,20	2	0,66	7,14
16	64	5120	2	1,10	12,12	2	1,11	13,02	2	1,17	13,62
20	100	8000	2	2,56	32,18	2	2,64	32,28	2	2,57	32,21

Tabela 5.7: Problema 2, quadratura $P_N T_N S_N$

N	ND	n	GMRES(10)			GMRES(20)			GMRES(30)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	80	5	0,00	0,00	2	0,00	0,00	1	0,00	0,00
4	3	240	5	0,00	0,05	3	0,00	0,04	2	0,00	0,04
6	6	480	6	0,01	0,15	3	0,01	0,16	2	0,01	0,15
8	10	800	6	0,02	0,32	3	0,02	0,32	2	0,02	0,32
10	15	1200	6	0,06	0,74	3	0,05	0,70	2	0,05	0,66
12	21	1680	6	0,13	1,31	3	0,12	1,28	2	0,11	1,25
16	36	2880	6	0,39	3,80	3	0,35	3,73	2	0,33	3,70
20	55	4400	6	0,89	9,00	3	0,77	9,00	2	0,73	8,82
28	105	8400	6	3,04	34,60	3	2,63	34,72	2	2,45	33,19
N	ND	n	LGMRES(10,5)			LGMRES(20,5)			LGMRES(20,10)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	80	5	0,00	0,01	2	0,00	0,00	2	0,00	0,00
4	3	240	5	0,00	0,05	3	0,00	0,05	3	0,00	0,05
6	6	480	6	0,01	0,14	3	0,01	0,15	3	0,01	0,15
8	10	800	6	0,04	0,34	3	0,02	0,34	3	0,02	0,33
10	15	1200	6	0,06	0,68	3	0,06	0,68	3	0,06	0,66
12	21	1680	6	0,14	1,28	3	0,12	1,26	3	0,12	1,27
16	36	2880	6	0,39	3,68	3	0,34	3,70	3	0,35	3,74
20	55	4400	6	0,88	8,93	3	0,76	8,82	3	0,76	8,81
28	105	8400	6	3,06	34,62	3	2,74	34,18	3	2,81	35,52
N	ND	n	LGMRES(30,5)			LGMRES(30,10)			LGMRES(30,15)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	80	1	0,00	0,01	1	0,00	0,00	1	0,00	0,00
4	3	240	2	0,00	0,05	2	0,00	0,04	2	0,00	0,05
6	6	480	2	0,01	0,16	2	0,01	0,15	2	0,01	0,16
8	10	800	2	0,02	0,34	2	0,02	0,33	2	0,02	0,33
10	15	1200	2	0,05	0,66	2	0,05	0,67	2	0,05	0,66
12	21	1680	2	0,11	1,27	2	0,11	1,28	2	0,11	1,29
16	36	2880	2	0,33	3,67	2	0,33	3,71	2	0,32	3,71
20	55	4400	2	0,73	8,74	2	0,72	8,93	2	0,74	8,92
28	105	8400	2	2,45	32,88	2	2,57	33,93	2	2,55	34,25

Tabela 5.8: Problema 2, quadratura QR

N_ϕ	ND	n	GMRES(10)			GMRES(20)			GMRES(30)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	2	160	5	0,00	0,02	2	0,00	0,02	2	0,00	0,02
4	8	640	6	0,02	0,23	3	0,02	0,24	2	0,02	0,24
6	18	1440	6	0,11	0,98	3	0,09	0,94	2	0,09	0,95
8	32	2560	7	0,41	3,04	3	0,36	3,00	2	0,32	2,99
10	50	4000	7	0,93	7,64	4	0,80	7,43	2	0,74	7,29
12	72	5760	8	1,92	15,96	4	1,71	15,50	3	1,61	15,43
14	98	7840	11	5,14	31,88	5	4,41	31,19	3	4,07	32,14
N_ϕ	ND	n	LGMRES(10,5)			LGMRES(20,5)			LGMRES(20,10)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	2	160	5	0,00	0,02	2	0,00	0,02	2	0,00	0,02
4	8	640	6	0,02	0,24	3	0,02	0,24	3	0,02	0,24
6	18	1440	6	0,10	0,96	3	0,09	0,95	3	0,10	0,93
8	32	2560	7	0,41	3,15	3	0,34	2,96	3	0,34	3,01
10	50	4000	7	0,92	7,53	4	0,81	7,36	4	0,80	7,37
12	72	5760	7	1,89	15,90	4	1,68	15,62	4	1,68	16,16
14	98	7840	10	5,43	32,91	5	4,42	31,15	5	4,42	31,23
N_ϕ	ND	n	LGMRES(30,5)			LGMRES(30,10)			LGMRES(30,15)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	2	160	2	0,00	0,02	2	0,00	0,02	2	0,00	0,02
4	8	640	2	0,02	0,23	2	0,02	0,22	2	0,02	0,22
6	18	1440	2	0,08	0,94	2	0,08	0,96	2	0,09	0,95
8	32	2560	2	0,32	3,00	2	0,32	2,99	2	0,32	2,96
10	50	4000	2	0,75	7,47	2	0,74	7,40	2	0,75	7,44
12	72	5760	3	1,67	15,55	3	1,61	15,56	3	1,61	15,53
14	98	7840	3	3,99	31,88	3	3,94	30,59	3	3,93	30,46

Seguindo a análise feita no problema anterior, vê-se que a quadratura de nível simétrica continua apresentando números de iterações muito altos quando comparados com outras quadraturas, particularmente a de Legendre-Chebyshev triangular, que tem os mesmos números de ordenadas e, conseqüentemente, mesmas

ordens de sistemas. Devido a isso, o tempo computacional para a convergência dos métodos iterativos também é bem maior na quadratura LQ_N do que nas outras quando comparada com sistemas de ordem similar.

Diferentemente do problema anterior, os tempos não são tão consistentes entre as quadraturas quando analisados sistemas de ordem similares. Tomando novamente os sistemas de ordem $n = 8400$ na quadratura $P_N T_N S_N$ ($N = 28, ND = 105$), de ordem $n = 8000$ na quadratura $P_N T_N$ ($N = 20, ND = 100$) e ordem $n = 7840$ na quadratura QR ($N_\phi = 14, ND = 98$), vê-se que a quadratura Quadruple Range apresenta tempo computacional levemente maior que as outras duas. Por exemplo, no método iterativo LGMRES(30, 5) o método levou 2.45 segundos com a quadratura $P_N T_N S_N$, 2.56 segundos com a quadratura $P_N T_N$, mas 3.99 segundos com a quadratura QR . A discrepância entre os dois primeiros resultados pode ser atribuída à diferença entre a ordem dos sistemas ou outros pormenores da simulação computacional, mas o valor bem maior da última quadratura pode indicar menor predisposição para o uso de métodos numéricos.

Também é diferente do problema anterior o comportamento entre as diferentes escolhas de parâmetros para os métodos em si. Neste problema, não há unanimidade quanto ao método mais eficiente, embora o LGMRES(30, 5) continue apresentando bons resultados. Outras escolhas com resultados satisfatórios são GMRES(30) e LGMRES(30, 15). O que parece ser definitivo é a escolha do parâmetro de reinicialização do método iterativo $m = 30$, apresentando tempos computacionais menores do que quando diretamente comparados com as outras escolhas ($m = 10$ e $m = 20$).

5.3 Problema 3

Ainda com o intuito de analisar a influência de diferentes quadraturas na solução de problemas bidimensionais de transporte, um terceiro caso teste foi con-

siderado. Com geometria similar à dos problemas anteriores e domínio heterogêneo com espalhamento isotrópico, mantém-se os parâmetros de seções de choque iguais ao caso teste anterior ($\sigma_t = 1.0\text{cm}^{-1}$, $\sigma_s = 0.5\text{cm}^{-1}$, $\sigma_t = 2.0\text{cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0.1\text{cm}^{-1}$). A região do domínio é definida com $a = b = 30.0\text{cm}$ e fonte externa $Q(x, y) = 1$ na região $[0, 10.0] \times [0, 10.0]$, conforme a figura 5.6

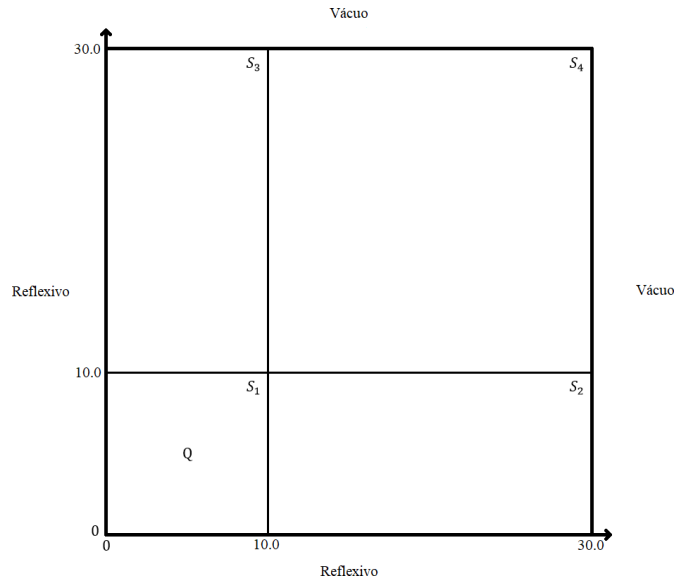


Figura 5.6: Geometria do problema 3.

Diferentemente dos problemas anteriores, a este foi dado um tratamento diferenciado no sentido de malhas mais refinadas. A geometria dividida em 4 regiões (2×2) foi subdividida em nodos respeitando os limites das regiões originais. As escolhas de refinamento presentes nesse trabalho são as malhas 6×6 , 15×15 e 30×30 . O maior número de sub-regiões (R) afeta diretamente na ordem do sistema linear (n) que deve ser resolvido para obter-se a expressão final para o fluxo angular médio em todas as regiões. As diferentes malhas foram usadas com todas as quadraturas numéricas analisadas nesse trabalho e os sistemas lineares resultantes foram resolvidos com as mesmas escolhas de parâmetros para os métodos GMRES(m) e LGMRES(m, l) até agora utilizadas.

Como nos problemas anteriores, as matrizes desse Problema foram analisadas quanto ao posicionamento de seus elementos não nulos e a distribuição de seus autovalores no plano complexo. Assim como a quadratura utilizada não parece afetar significativamente nesses resultados, também não é visível uma mudança devido à utilização de malhas mais finas. Assim, tomando uma matriz exemplo (quadratura QR , $n = 64800$, malha 15×15), apresentam-se na figura 5.7 esses resultados. Também como nos problemas anteriores, as tabelas 5.9 - 5.20 são organizadas de acordo com a ordem da quadratura (N e N_ϕ) e apresentam o número de iterações (k) do método iterativo, o tempo tomado por este (t) e o tempo total do programa (T). Esses resultados estão parcialmente presentes em [34].

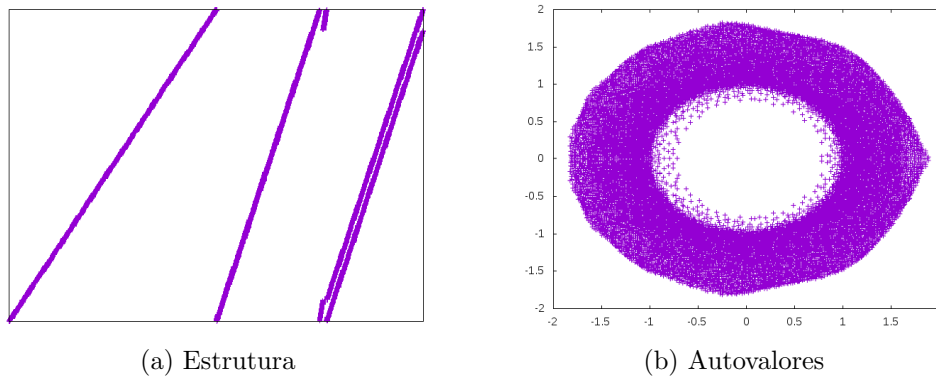


Figura 5.7: Estrutura e autovalores das matrizes do Problema 3.

Tabela 5.9: Problema 3, quadratura LQ_N , malha 6×6

N	ND	n	GMRES(10)			GMRES(20)			GMRES(30)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	144	13	0,01	0,02	5	0,00	0,00	3	0,00	0,00
4	3	432	15	0,02	0,04	6	0,00	0,01	4	0,00	0,01
6	6	864	15	0,07	0,10	6	0,01	0,03	4	0,01	0,04
8	10	1440	15	0,11	0,16	6	0,06	0,12	4	0,05	0,17
12	21	3024	16	0,31	1,20	6	0,15	0,88	4	0,21	0,87
16	36	5184	15	0,83	2,52	7	0,70	2,61	4	0,65	2,34
N	ND	n	LGMRES(10,5)			LGMRES(20,5)			LGMRES(20,10)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	144	10	0,00	0,01	6	0,00	0,01	6	0,00	0,01
4	3	432	10	0,01	0,03	6	0,02	0,05	6	0,01	0,04
6	6	864	10	0,03	0,10	6	0,04	0,26	6	0,02	0,07
8	10	1440	11	0,08	0,31	6	0,06	0,25	6	0,05	0,16
12	21	3024	11	0,78	1,55	7	0,51	1,13	6	0,68	1,35
16	36	5184	12	1,12	2,32	7	1,02	2,11	6	0,89	2,26
N	ND	n	LGMRES(30,5)			LGMRES(30,10)			LGMRES(30,15)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	144	3	0,00	0,00	4	0,00	0,01	3	0,00	0,00
4	3	432	3	0,01	0,03	4	0,01	0,03	4	0,02	0,03
6	6	864	4	0,02	0,05	4	0,03	0,07	4	0,03	0,09
8	10	1440	4	0,04	0,12	4	0,05	0,15	4	0,04	0,13
12	21	3024	4	0,22	0,66	4	0,21	0,66	4	0,24	0,72
16	36	5184	4	0,78	2,01	4	0,70	1,94	4	0,67	2,62

Tabela 5.10: Problema 3, quadratura LQ_N , malha 15×15

			GMRES(10)			GMRES(20)			GMRES(30)		
N	ND	n	k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	900	22	0,03	0,11	13	0,03	0,09	8	0,03	0,10
4	3	2700	23	0,11	0,54	13	0,10	0,41	9	0,10	0,68
6	6	5400	23	0,90	3,81	13	1,05	3,53	9	0,92	3,14
8	10	9000	23	1,15	6,34	13	1,09	4,99	9	0,71	3,06
12	21	18900	23	4,36	12,28	13	4,17	11,45	9	3,41	10,31
16	36	32400	23	11,02	18,36	15	12,01	18,88	10	10,39	18,07
			LGMRES(10,5)			LGMRES(20,5)			LGMRES(20,10)		
N	ND	n	k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	900	22	0,03	0,08	10	0,01	0,04	13	0,03	0,07
4	3	2700	22	0,11	0,47	10	0,08	0,41	13	0,10	0,38
6	6	5400	22	0,80	1,85	11	0,35	0,92	13	0,50	1,04
8	10	9000	22	1,21	4,02	11	0,57	1,50	13	0,68	1,89
12	21	18900	23	7,34	11,34	11	8,12	15,37	13	9,54	19,00
16	36	32400	24	10,58	21,11	12	9,00	17,55	14	9,50	33,34
			LGMRES(30,5)			LGMRES(30,10)			LGMRES(30,15)		
N	ND	n	k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	900	7	0,03	0,03	8	0,05	0,08	8	0,03	0,08
4	3	2700	8	0,18	0,29	8	0,20	0,50	9	0,15	0,50
6	6	5400	8	0,41	1,12	8	0,48	1,79	9	0,40	1,56
8	10	9000	8	1,03	3,53	9	2,02	4,83	9	1,66	4,51
12	21	18900	8	4,98	10,86	9	6,14	18,21	10	6,13	18,18
16	36	32400	8	9,30	18,12	10	9,74	23,28	10	10,58	27,34

Tabela 5.11: Problema 3, quadratura LQ_N , malha 30×30

N	ND	n	GMRES(10)			GMRES(20)			GMRES(30)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	3600	33	0,55	2,08	25	0,69	2,01	18	0,60	2,10
4	3	10800	33	6,04	7,67	25	6,78	7,00	18	3,86	6,28
6	6	21600	33	11,98	16,11	25	10,64	15,70	18	10,15	17,27
8	10	36000	33	29,27	39,31	26	27,52	40,21	19	30,46	40,40
12	21	75600	34	80,90	101,15	26	75,64	90,66	19	70,91	81,82
16	36	129600	34	169,96	204,14	27	170,99	229,31	19	149,99	185,05
N	ND	n	LGMRES(10,5)			LGMRES(20,5)			LGMRES(20,10)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	3600	31	0,29	1,40	22	0,31	2,23	21	0,83	1,76
4	3	10800	31	5,08	7,88	22	4,68	7,29	21	5,43	6,79
6	6	21600	31	11,65	15,23	24	12,00	15,05	21	9,11	10,89
8	10	36000	31	34,16	45,05	24	26,38	39,67	22	28,29	43,73
12	21	75600	32	75,64	107,28	24	75,99	101,20	22	72,25	76,09
16	36	129600	32	155,97	195,71	25	132,53	177,14	22	134,91	204,64
N	ND	n	LGMRES(30,5)			LGMRES(30,10)			LGMRES(30,15)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	3600	18	1,00	5,23	17	0,35	1,87	17	0,28	1,81
4	3	10800	19	6,72	7,85	17	4,55	6,30	17	6,22	8,11
6	6	21600	19	11,67	17,29	18	10,28	13,95	17	10,16	13,22
8	10	36000	19	29,71	40,06	19	27,91	40,00	18	25,58	41,59
12	21	75600	19	76,48	101,11	19	66,60	89,33	18	56,65	77,78
16	36	129600	20	162,66	215,98	19	163,51	225,62	18	163,64	218,43

Tabela 5.12: Problema 3, quadratura $P_N T_N S_N$, malha 6×6

			GMRES(10)			GMRES(20)			GMRES(30)		
N	ND	n	k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	144	12	0,00	0,01	5	0,00	0,00	3	0,00	0,00
4	3	432	14	0,01	0,03	5	0,00	0,00	3	0,00	0,00
6	6	864	15	0,03	0,07	6	0,00	0,02	4	0,00	0,02
8	10	1440	15	0,05	0,11	6	0,02	0,07	3	0,02	0,07
12	21	3024	16	0,22	1,01	6	0,12	0,48	4	0,10	0,56
16	36	5184	15	0,72	1,98	6	0,60	2,05	4	0,59	2,02
22	66	9504	16	2,49	7,40	6	2,02	7,26	4	1,81	6,23
32	136	19584	16	9,06	32,85	6	10,71	31,38	5	6,67	28,89
38	190	27360	16	19,41	62,94	6	28,22	67,68	5	17,01	61,81
46	276	39744	17	42,10	132,32	7	35,38	121,64	5	22,27	98,95
56	406	58464	20	133,46	320,36	7	61,86	252,89	5	80,24	261,28
			LGMRES(10,5)			LGMRES(20,5)			LGMRES(20,10)		
N	ND	n	k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	144	10	0,00	0,00	6	0,00	0,00	5	0,00	0,00
4	3	432	10	0,00	0,01	6	0,00	0,01	6	0,00	0,00
6	6	864	10	0,01	0,03	6	0,01	0,03	6	0,00	0,02
8	10	1440	11	0,03	0,08	6	0,02	0,06	6	0,01	0,04
12	21	3024	10	0,30	1,02	6	0,21	0,83	6	0,30	1,07
16	36	5184	12	0,60	1,89	6	0,54	1,97	6	0,51	2,02
22	66	9504	12	2,18	6,87	6	2,57	7,25	6	1,84	6,51
32	136	19584	12	9,30	30,92	7	6,77	29,50	7	6,78	28,78
38	190	27360	13	16,66	61,86	7	20,45	62,88	7	14,06	59,52
46	276	39744	13	57,88	151,70	7	28,81	105,72	8	21,13	99,91
56	406	58464	13	95,55	277,10	8	58,74	245,55	8	91,24	278,41
			LGMRES(30,5)			LGMRES(30,10)			LGMRES(30,15)		
N	ND	n	k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	144	3	0,00	0,00	3	0,00	0,00	3	0,00	0,00
4	3	432	3	0,00	0,00	4	0,00	0,00	3	0,00	0,00
6	6	864	4	0,00	0,01	4	0,01	0,02	4	0,00	0,01
8	10	1440	3	0,01	0,03	4	0,01	0,04	4	0,01	0,03
12	21	3024	4	0,18	0,58	4	0,15	0,41	4	0,19	0,58
16	36	5184	4	0,52	2,13	5	0,59	2,16	4	0,55	2,00
22	66	9504	4	0,84	2,04	4	1,84	6,37	4	1,78	7,33
32	136	19584	4	6,65	24,60	4	8,66	31,70	6	6,36	30,29
38	190	27360	4	18,23	61,98	5	13,97	54,61	5	18,37	60,81
46	276	39744	5	33,63	126,99	5	24,09	100,51	6	26,04	97,48
56	406	58464	5	64,79	256,78	6	63,36	248,81	7	64,10	249,19

Tabela 5.13: Problema 3, quadratura $P_N T_N S_N$, malha 15×15

N	ND	n	GMRES(10)			GMRES(20)			GMRES(30)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	900	21	0,02	0,05	13	0,02	0,04	8	0,02	0,04
4	3	2700	23	0,10	0,38	12	0,09	0,41	9	0,08	0,35
6	6	5400	23	0,88	3,18	12	1,01	3,35	9	0,85	2,98
8	10	9000	23	1,12	5,34	13	1,03	4,77	8	0,68	2,98
12	21	18900	23	4,32	11,81	13	3,97	10,69	9	3,05	9,61
16	36	32400	24	10,93	18,14	16	10,66	17,61	9	9,49	16,48
22	66	59400	24	31,64	64,22	15	30,93	61,40	9	22,91	54,32
32	136	122400	25	129,93	273,86	16	119,92	269,77	10	105,59	258,72
38	190	171000	27	245,56	535,23	16	231,32	541,46	10	338,00	514,19
N	ND	n	LGMRES(10,5)			LGMRES(20,5)			LGMRES(20,10)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	900	21	0,02	0,04	10	0,01	0,03	12	0,02	0,05
4	3	2700	22	0,08	0,37	10	0,07	0,37	12	0,10	0,45
6	6	5400	22	0,65	1,81	10	0,32	0,80	13	0,51	1,28
8	10	9000	23	0,78	2,27	11	0,58	1,54	13	0,60	1,62
12	21	18900	23	6,53	13,50	10	8,24	15,74	13	9,11	17,93
16	36	32400	23	10,06	19,43	11	8,82	16,76	13	9,50	32,52
22	66	59400	24	37,03	69,59	12	23,54	50,38	13	25,27	80,21
32	136	122400	24	138,51	276,32	12	96,63	242,80	14	121,54	229,16
38	190	171000	25	358,43	636,26	13	228,69	501,80	14	257,77	577,36
N	ND	n	LGMRES(30,5)			LGMRES(30,10)			LGMRES(30,15)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	900	7	0,01	0,03	8	0,02	0,04	8	0,02	0,04
4	3	2700	7	0,09	0,29	8	0,10	0,35	8	0,11	0,36
6	6	5400	7	0,31	1,12	8	0,41	1,65	9	0,40	1,56
8	10	9000	7	1,03	3,54	8	1,79	4,52	9	1,36	4,01
12	21	18900	8	5,11	12,11	9	5,98	17,82	9	5,50	17,05
16	36	32400	8	8,99	18,32	9	9,84	23,56	9	13,21	37,27
22	66	59400	8	25,67	57,42	9	28,45	81,44	10	28,16	78,67
32	136	122400	9	92,64	212,76	10	105,12	267,47	10	103,65	322,64
38	190	171000	9	206,77	515,72	11	229,67	568,60	11	222,39	523,19

Tabela 5.14: Problema 3, quadratura $P_N T_N S_N$, malha 30×30

			GMRES(10)			GMRES(20)			GMRES(30)		
N	ND	n	k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	3600	32	0,44	1,78	24	0,47	1,84	18	0,55	2,12
4	3	10800	32	5,83	7,01	25	5,78	6,83	18	4,36	5,81
6	6	21600	36	12,64	16,93	25	11,79	15,71	18	9,51	12,67
8	10	36000	33	28,36	37,94	25	26,36	36,31	19	27,22	38,16
12	21	75600	33	76,90	97,15	26	73,64	87,55	18	72,64	83,43
16	36	129600	33	155,17	198,87	25	162,82	208,68	19	152,39	188,82
22	66	237600	34	502,70	663,86	26	541,16	732,41	19	540,74	730,37
			LGMRES(10,5)			LGMRES(20,5)			LGMRES(20,10)		
N	ND	n	k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	3600	30	0,38	1,68	21	0,24	1,96	21	0,82	1,68
4	3	10800	31	4,55	6,86	22	4,26	6,41	21	5,05	6,41
6	6	21600	31	12,65	17,32	24	10,82	13,92	21	9,57	12,76
8	10	36000	31	32,81	43,04	24	25,92	37,24	22	27,19	40,37
12	21	75600	32	75,18	106,30	23	75,66	99,20	22	72,26	74,54
16	36	129600	33	156,17	197,51	25	130,77	173,28	22	135,58	204,12
22	66	237600	33	581,30	782,85	25	501,73	647,82	23	512,14	696,97
			LGMRES(30,5)			LGMRES(30,10)			LGMRES(30,15)		
N	ND	n	k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	1	3600	18	0,90	4,33	16	0,38	2,02	16	0,28	1,38
4	3	10800	17	5,61	7,01	17	3,69	5,83	17	5,82	7,61
6	6	21600	19	11,50	16,80	19	9,97	13,72	17	9,61	13,22
8	10	36000	19	30,17	39,12	19	28,81	40,63	18	25,47	41,30
12	21	75600	20	75,86	99,01	19	65,18	85,43	18	55,55	74,62
16	36	129600	20	163,04	215,45	20	160,85	217,45	18	160,06	215,54
22	66	237600	21	452,85	584,78	21	468,83	604,21	18	472,67	615,50

Tabela 5.15: Problema 3, quadratura $P_N T_N$, malha 6×6

N	ND	n	GMRES(10)			GMRES(20)			GMRES(30)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
4	4	576	12	0,02	0,04	6	0,01	0,03	3	0,01	0,03
12	36	5184	15	0,72	2,08	6	0,58	1,93	4	0,56	2,08
16	64	9216	14	2,06	6,35	6	1,64	5,95	4	1,50	5,99
24	144	20736	15	8,77	31,34	6	6,82	30,47	4	6,18	28,54
26	196	28224	15	20,27	62,89	6	15,72	58,62	4	15,40	58,69
32	256	36864	16	26,15	99,86	6	28,81	101,96	4	18,88	92,93
40	400	57600	16	117,70	309,59	7	60,74	249,80	4	57,72	246,36
N	ND	n	LGMRES(10,5)			LGMRES(20,5)			LGMRES(20,10)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
4	4	576	10	0,01	0,03	6	0,01	0,04	6	0,01	0,04
12	36	5184	11	0,69	2,18	6	0,58	1,96	6	0,58	1,96
16	64	9216	11	1,98	6,51	6	2,55	7,12	6	1,66	6,00
24	144	20736	12	9,32	31,62	6	6,75	29,48	6	6,76	29,13
26	196	28224	12	15,72	58,20	6	22,99	66,52	6	12,00	56,04
32	256	36864	12	49,32	122,76	6	28,61	102,37	6	19,75	93,36
40	400	57600	12	85,01	272,29	6	47,68	236,24	7	95,45	288,61
N	ND	n	LGMRES(30,5)			LGMRES(30,10)			LGMRES(30,15)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
4	4	576	3	0,01	0,04	3	0,01	0,04	3	0,01	0,04
12	36	5184	4	0,57	1,96	4	0,55	1,91	4	0,58	2,09
16	64	9216	4	1,54	5,96	4	1,51	5,86	4	1,51	6,29
24	144	20736	4	6,16	29,97	4	6,14	29,27	4	6,17	28,50
26	196	28224	4	18,82	63,62	4	14,30	55,90	4	18,89	61,72
32	256	36864	4	27,05	100,49	4	22,57	99,27	4	25,33	97,65
40	400	57600	4	64,48	252,90	4	62,51	250,34	4	63,69	250,73

Tabela 5.16: Problema 3, quadratura $P_N T_N$, malha 15×15

N	ND	n	GMRES(10)			GMRES(20)			GMRES(30)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
4	4	3600	23	0,19	0,30	14	0,23	0,36	9	0,22	0,34
12	36	32400	23	10,64	19,71	14	10,55	19,76	9	9,93	19,01
16	64	57600	24	27,55	56,51	14	26,33	55,29	9	25,05	54,92
24	144	129600	25	116,36	267,58	15	111,42	261,34	9	101,81	254,08
26	196	176400	26	245,50	524,71	15	222,71	508,13	9	327,77	612,56
N	ND	n	LGMRES(10,5)			LGMRES(20,5)			LGMRES(20,10)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
4	4	3600	22	0,22	0,34	11	0,19	0,32	13	0,21	0,34
12	36	32400	23	11,89	21,99	11	9,28	18,34	13	10,02	19,01
16	64	57600	23	29,93	58,14	12	24,15	52,99	13	25,76	54,70
24	144	129600	23	149,40	300,40	12	98,97	248,46	13	107,61	259,24
26	196	176400	23	362,55	646,81	12	208,20	487,26	13	227,26	514,69
N	ND	n	LGMRES(30,5)			LGMRES(30,10)			LGMRES(30,15)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
4	4	3600	8	0,23	0,37	9	0,25	0,37	9	0,24	0,36
12	36	32400	8	8,87	17,95	9	9,73	18,79	9	14,38	23,70
16	64	57600	8	22,25	51,29	9	24,81	53,58	9	24,81	53,36
24	144	129600	8	90,93	237,60	9	101,31	251,20	9	101,36	248,39
26	196	176400	8	193,23	473,52	9	215,14	501,86	9	215,28	506,67

Tabela 5.17: Problema 3, quadratura $P_N T_N$, malha 30×30

N	ND	n	GMRES(10)			GMRES(20)			GMRES(30)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
4	4	14400	36	6,64	7,28	26	5,82	6,38	21	5,37	5,95
12	36	129600	33	156,33	199,78	25	154,82	196,71	19	143,51	185,85
16	64	230400	33	399,56	534,54	25	469,63	613,43	19	438,36	583,87
N	ND	n	LGMRES(10,5)			LGMRES(20,5)			LGMRES(20,10)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
4	4	14400	31	4,77	5,34	25	4,70	5,27	23	5,01	5,58
12	36	129600	34	151,43	193,80	26	146,25	189,59	22	137,94	180,18
16	64	230400	35	490,39	624,48	26	424,83	562,94	22	441,43	581,90
N	ND	n	LGMRES(30,5)			LGMRES(30,10)			LGMRES(30,15)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
4	4	14400	20	5,38	5,97	16	5,76	6,35	17	5,39	5,98
12	36	129600	18	161,19	204,34	19	134,99	176,93	18	147,00	189,13
16	64	230400	18	401,69	540,87	19	433,46	572,08	18	445,34	582,54

Quando analisadas as tabelas 5.9 - 5.11, referentes à quadratura LQ_N , e comparadas diretamente com as tabelas 5.12 - 5.14, por exemplo, referentes à quadratura $P_N T_N S_N$, vê-se que a diferença entre número de iterações ou até mesmo tempo computacional dos métodos não é tão relevante quanto nos casos anteriores. Isso leva a acreditar que, nessa formulação, a principal desvantagem da quadratura simétrica de nível é a limitação física mencionada na seção 3.2.1.

Quando comparados resultados de uma mesma quadratura mas em malhas diferentes, é importante que não seja considerado como ponto de equabilidade a ordem dos sistemas lineares. Por exemplo, na quadratura de Legendre-Chebyshev quadrangular ($P_N T_N$), malha 6×6 (tabela 5.15), tem-se um sistema de ordem $n = 57600$ para ordem de quadratura $N = 40$, com $ND = 400$ ordenadas discretas. O caso com mesma ordem do sistema na tabela 5.16, no entanto, representa uma ordem de quadratura bem menor ($N = 16$) e, conseqüentemente, um número de

ordenadas também menor ($ND = 64$). Se comparados os dados desses dois casos, vê-se que há grande discrepância tanto no número de iterações quanto no tempo computacional apresentados em ambos. Foi evitado esse tipo de comparação nesse trabalho. Quando comparados resultados de uma mesma quadratura mas em malhas diferentes, é importante que não seja considerado como ponto de equabilidade a ordem dos sistemas lineares. Por exemplo, na quadratura de Legendre-Chebyshev quadrangular ($P_N T_N$), malha 6×6 (tabela 5.15), tem-se um sistema de ordem $n = 57600$ para ordem de quadratura $N = 40$, com $ND = 400$ ordenadas discretas. O caso com mesma ordem do sistema na tabela 5.16, no entanto, representa uma ordem de quadratura bem menor ($N = 16$) e, conseqüentemente, um número de ordenadas também menor ($ND = 64$). Se compararmos os dados desses dois casos, vê-se que há grande discrepância tanto no número de iterações quanto no tempo computacional apresentados em ambos. Vamos evitar esse tipo de comparação nesse trabalho.

Tabela 5.18: Problema 3, quadratura QR , malha 6×6

N_ϕ	ND	n	GMRES(10)			GMRES(20)			GMRES(30)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	8	1152	12	0,04	0,11	6	0,03	0,10	4	0,03	0,10
4	32	4608	15	0,54	1,64	6	0,42	1,50	4	0,40	1,47
6	72	10368	16	2,72	8,29	7	2,12	7,74	4	2,14	7,91
8	128	18432	16	8,42	26,42	7	10,03	27,69	5	6,52	24,30
10	200	28800	16	17,32	61,36	7	24,69	69,30	5	17,33	61,66
12	288	41472	16	55,88	153,16	7	42,90	144,25	5	28,97	122,11
14	392	56448	20	143,11	325,02	9	68,70	251,65	6	104,83	285,65
N_ϕ	ND	n	LGMRES(10,5)			LGMRES(20,5)			LGMRES(20,10)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	8	1152	10	0,04	0,10	6	0,03	0,10	6	0,03	0,11
4	32	4608	11	0,48	1,57	6	0,42	1,52	6	0,42	1,49
6	72	10368	12	2,44	7,87	6	2,10	7,58	7	2,75	8,28
8	128	18432	12	7,89	25,98	7	6,56	24,09	7	6,75	24,29
10	200	28800	13	16,57	60,88	7	13,48	57,68	7	13,60	58,22
12	288	41472	13	58,52	154,71	7	30,78	126,30	7	29,15	122,76
14	392	56448	17	110,81	296,11	9	71,59	252,51	9	68,61	251,89
N_ϕ	ND	n	LGMRES(30,5)			LGMRES(30,10)			LGMRES(30,15)		
			k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	8	1152	4	0,04	0,11	4	0,04	0,11	4	0,03	0,10
4	32	4608	4	0,40	1,51	4	0,41	1,50	4	0,41	1,48
6	72	10368	4	2,08	7,58	4	2,09	7,62	4	2,04	7,50
8	128	18432	5	6,56	24,36	5	10,36	28,22	5	6,49	23,91
10	200	28800	5	17,47	61,80	5	13,48	61,80	5	13,55	57,89
12	288	41472	5	41,45	135,89	5	41,68	137,61	5	29,08	122,94
14	392	56448	6	67,54	249,37	6	65,09	245,73	6	65,00	245,75

Tabela 5.19: Problema 3, quadratura QR , malha 15×15

			GMRES(10)			GMRES(20)			GMRES(30)		
N_ϕ	ND	n	k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	8	7200	27	0,68	1,15	12	0,61	1,07	8	0,62	1,09
4	32	28800	26	10,32	17,56	15	9,88	17,65	9	12,30	19,56
6	72	64800	26	40,75	78,78	16	37,11	74,04	10	49,58	87,21
8	128	115200	28	190,10	313,63	18	178,14	296,77	10	93,73	212,03
10	200	180000	28	361,25	660,17	18	330,15	628,43	11	364,01	676,65
			LGMRES(10,5)			LGMRES(20,5)			LGMRES(20,10)		
N_ϕ	ND	n	k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	8	7200	19	0,68	1,15	10	0,58	1,05	12	0,63	1,09
4	32	28800	23	20,13	27,47	12	8,24	15,54	13	9,02	16,15
6	72	64800	24	38,73	75,01	12	29,29	65,67	14	51,72	89,06
8	128	115200	25	166,25	284,82	13	119,82	239,58	14	139,30	258,84
10	200	180000	26	446,16	745,84	12	227,83	542,70	14	299,46	595,91
			LGMRES(30,5)			LGMRES(30,10)			LGMRES(30,15)		
N_ϕ	ND	n	k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	8	7200	7	0,58	1,05	8	0,62	1,08	8	0,66	1,14
4	32	28800	8	7,75	14,86	9	8,69	15,92	9	10,31	17,56
6	72	64800	8	29,65	67,86	10	32,83	69,23	10	32,65	69,33
8	128	115200	9	92,57	213,14	10	190,15	307,62	10	143,12	265,03
10	200	180000	9	294,39	595,52	11	353,72	651,95	11	264,82	563,32

Tabela 5.20: Problema 3, quadratura QR , malha 30×30

			GMRES(10)			GMRES(20)			GMRES(30)		
N_ϕ	ND	n	k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	8	28800	31	12,51	14,56	20	8,98	11,08	18	13,91	16,04
4	32	115200	34	126,23	159,45	26	153,03	186,73	19	112,59	145,63
6	72	259200	34	608,58	785,77	28	605,40	782,43	20	580,96	763,91
			LGMRES(10,5)			LGMRES(20,5)			LGMRES(20,10)		
N_ϕ	ND	n	k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	8	28800	34	16,01	18,07	20	8,89	11,01	21	9,89	11,93
4	32	115200	29	171,09	206,60	22	104,63	137,59	22	171,78	205,68
6	72	259200	30	564,44	740,43	24	553,29	730,41	23	576,70	751,80
			LGMRES(30,5)			LGMRES(30,10)			LGMRES(30,15)		
N_ϕ	ND	n	k	t	T	k	t	T	k	t	T
2	8	28800	14	8,43	10,53	15	9,00	11,12	16	9,51	11,68
4	32	115200	18	111,16	144,35	19	149,42	184,00	18	150,62	183,65
6	72	259200	19	501,07	675,57	20	556,77	731,83	19	562,34	735,93

As comparações entre ordens similares de sistemas lineares, no entanto, ainda podem ser utilizadas entre diferentes quadraturas mas mesma malha. Por exemplo, na malha 30×30 , as quadraturas $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$ apresentam sistemas de ordem $n = 129600$ ($N = 16, ND = 36$, tabela 5.14 e $N = 12, ND = 36$, tabela 5.17, respectivamente), que podem ser comparados com o sistema de ordem $n = 115200$ ($N_\phi = 4, ND = 32$, tabela 5.20). Nesse caso, vemos resultados levemente mais rápidos na quadratura QR . Isso é consistente com alguns outros resultados, mas a quadratura quadrangular de Legendre-Chebyshev ($P_N T_N$) apresenta mais frequentemente tempos menores de computação. Para ordens mais altas (fora do escopo da quadratura LQ_N), a quadratura $P_N T_N S_N$ é a que apresenta resultados menos satisfatórios, embora a diferença seja muitas vezes pouco significativa.

Nesse problema, a comparação entre resultados de uma mesma quadratura e malha mostra que novamente o método LGMRES(30,5) apresenta tempos

computacionais mais baixos que a maioria dos outros. Entretanto, na maioria dos casos, o método LGMRES(20, 5) se mostrou mais eficiente e, portanto, a melhor escolha entre os métodos testados. O primeiro, no entanto, apresenta em todos os casos menor número de iterações que o segundo. Isso se dá pelo maior número máximo de elementos na base de Krylov considerada.

Para esse problema, as soluções dos sistemas lineares obtidos através dos métodos numéricos foram aplicadas na solução geral do problema de transporte definida no capítulo anterior. O fluxo escalar médio foi avaliado em cada região da geometria do problema e é apresentado na tabela 5.21. É importante notar que as regiões S_2 e S_3 , devido à simetria do problema, apresentam valores iguais para o fluxo e, por isso, apenas uma região está presente na tabela. Esses resultados, também presentes em [34], foram comparados com resultados previamente obtidos [16] com o uso do método ADO para problemas de transporte bidimensionais. Os resultados são condizentes com os valores previamente obtidos, mas de principal relevância é a obtenção de resultados para sistemas de ordens mais altas do que fora possível obter em [16]. Nota-se que, anteriormente, não fora possível obter resultados para $ND = 36$ na malha 30×30 , enquanto que o uso de métodos iterativos nos permitiu alcançar, para a mesma malha, valores tão altos quanto $ND = 72$ (quadratura QR).

Tabela 5.21: Fluxo Escalar Médio por regiões

	ADO - $P_N T_N$						ADO - $LQ_N[16]$						AHOT - $LQ_N[16]$					
	6×6		15×15		30×30		15×15		30×30		15×15		30×30		15×15		240×240	
	ND	Fluxo	ND	Fluxo	ND	Fluxo	ND	Fluxo	ND	Fluxo	ND	Fluxo	ND	Fluxo	ND	Fluxo	ND	Fluxo
S	256	1,8369	64	1,8362	36	1,8354	21	1,8359	21	1,8358	21	1,8242	21	1,8242	12	1,8351	36	1,8354
1	400	1,8370	144	1,8366	64	1,8360	36	1,8363	36	1,8363	36	1,8247	36	1,8247	36	1,8354	36	1,8354
2	256	1,0604(-2)	64	1,0655(-2)	36	1,0706(-2)	36	1,0671(-2)	21	1,0683(-2)	21	1,1434(-2)	21	1,1434(-2)	21	1,0733(-2)	36	1,0714(-2)
4	400	1,0601(-2)	144	1,0630(-2)	64	1,0667(-2)	64	1,0652(-2)	36	1,0652(-2)	36	1,1405(-2)	36	1,1405(-2)	36	1,0714(-2)	36	1,0714(-2)
4	256	1,1991(-4)	64	1,1927(-4)	36	1,1879(-4)	36	1,1956(-4)	21	1,1701(-4)	21	1,2764(-4)	21	1,2764(-4)	21	1,1416(-4)	36	1,1333(-3)
4	400	1,1968(-4)	144	1,1782(-4)	64	1,1673(-4)	64	1,1863(-4)	36	1,1863(-4)	36	1,2654(-4)	36	1,2654(-4)	36	1,1333(-3)	36	1,1333(-3)

	ADO - $-QR$						ADO - $LQ_N[16]$						AHOT - $LQ_N[16]$					
	6×6		15×15		30×30		15×15		30×30		15×15		30×30		15×15		240×240	
	ND	Fluxo	ND	Fluxo	ND	Fluxo	ND	Fluxo	ND	Fluxo	ND	Fluxo	ND	Fluxo	ND	Fluxo	ND	Fluxo
S	288	1,8369	72	1,8362	32	1,8354	21	1,8359	21	1,8358	21	1,8242	21	1,8242	21	1,8351	36	1,8354
1	382	1,8370	200	1,8366	72	1,8360	36	1,8363	36	1,8363	36	1,8247	36	1,8247	36	1,8354	36	1,8354
2	288	1,0604(-2)	72	1,0655(-2)	32	1,0706(-2)	32	1,0671(-2)	21	1,0683(-2)	21	1,1434(-2)	21	1,1434(-2)	21	1,0733(-2)	36	1,0714(-2)
4	392	1,0601(-2)	200	1,0630(-2)	72	1,0667(-2)	72	1,0652(-2)	36	1,0652(-2)	36	1,1405(-2)	36	1,1405(-2)	36	1,0714(-2)	36	1,0714(-2)
4	288	1,1991(-4)	72	1,1927(-4)	32	1,1879(-4)	32	1,1956(-4)	21	1,1701(-4)	21	1,2764(-4)	21	1,2764(-4)	21	1,1416(-4)	36	1,1333(-3)
4	392	1,1968(-4)	200	1,1782(-4)	72	1,1673(-4)	72	1,1863(-4)	36	1,1863(-4)	36	1,2654(-4)	36	1,2654(-4)	36	1,1333(-3)	36	1,1333(-3)

6 CONCLUSÕES

Neste trabalho, métodos iterativos baseados em subespaços de Krylov foram utilizados na solução de sistemas lineares para determinar a expressão final para o fluxo angular médio de problemas bidimensionais de transporte de partículas. Em especial, foram utilizado os métodos GMRES reinicializado e um método de aceleração (LGMRES). Ao lidar com a equação bidimensional de transporte, a abordagem analítica do método ADO foi unida a métodos numéricos nodais a fim de reduzir o problema a um conjunto de equações unidimensionais. Em cada nodo, a equação multidimensional de transporte foi integrada transversalmente e esse processo de iteração introduziu termos desconhecidos às equações, como é usual no uso de formulações nodais. Algumas formas distintas são utilizadas na literatura para a aproximação desses termos, mas, independentemente da escolha tomada, o método ADO, devido às condições de contorno e tal aproximação, define a solução geral para o problema de transporte em função de coeficientes constantes que devem ser definidos através de um sistema linear.

Diferentes casos testes foram estudados e os sistemas lineares provenientes dos problemas aplicados a diversos esquemas de quadratura foram resolvidos através desses métodos iterativos. Os resultados encontrados mostram que o uso de esquemas de quadraturas como a *Quadruple Range (QR)* e a Legendre-Chebyshev Quadrangular ($P_N T_N$) são escolhas melhores que a clássica quadratura de nível simétrica (LQ_N), apresentando tempos computacionais para convergência dos métodos iterativos levemente menores que essa. O uso de métodos iterativos para a solução dos sistemas lineares nos permitiu lidar com sistemas de ordens previamente inalcançadas e a análise dos tempos de simulações numéricas mostra que o método de aceleração LGMRES(m, l) é uma opção viável e rápida para os sistemas esparsos. Isso se dá quando as escolhas dos parâmetros é conveniente. De acordo com os resultados aqui presentes, concluímos que boas escolhas para esses

parâmetros são $m = 20$ ou $m = 30$ para $l = 5$. As simulações numéricas realizadas com essas escolhas apresentaram tempos computacionais mais baixos em quase todos os casos testes.

Com base nos resultados aqui apresentados, alguns tópicos surgem como interesse na continuidade desse estudo. Entre eles, o uso da implementação paralela em uma gama maior de problemas e os métodos iterativos usados em problemas de malhas mais finas que as aqui utilizadas.

Referências Bibliográficas

- [1] ABU-SHUMAYS, I. *Low-Order Gauss-Christofel Quadrature*. Argonne National Laboratory, ANL-7914, Lemont, IL, 1972.
- [2] ABU-SHUMAYS, I. Compatible product angular quadrature for neutron transport in x-y geometry. *Nuclear Science and Engineering* 64 (1977), 299–316.
- [3] AL-BASHEER, A. K., SJODEN, G. E., AND GHITA, M. Critical discretization issues in 3-d s_n simulations relevant to dosimetry and medical physics. *Nuclear Technology* 169 (2010), 252–262.
- [4] ARNOLDI, W. The principle of minimized iterations in the solution of the matrix eigenvalue problem. *Quarterly of Applied Mathematics* 9 (1951), 17–29.
- [5] AXELSSON, O., AND BARKER, V. *Finite Element Solution of Boundary Value Problems-Theory and Computation*. Academic Press, 1984.
- [6] AZMY, Y. Y. Comparison of three approximations to the linear-linear nodal transport method in weighted diamond-difference form. *Nuclear Science and Engineering*, 98 (1988), 190–200.
- [7] AZMY, Y. Y. The weighted diamond-difference form of nodal transport methods. *Nuclear Science and Engineering* 98 (1988), 29–40.
- [8] AZMY, Y. Y. Arbitrarily high order characteristic methods for solving the neutron transport equation. *Annals of Nuclear Energy* 19 (1992), 593–606.
- [9] BADRUZZAMAN, A. An efficient algorithm for nodal-transport solutions in multidimensional geometry. *Nuclear Science and Engineering* 89 (1985), 281–290.

- [10] BAKER, A. H., DENNIS, J. M., AND JESSUP, E. R. On improving linear solver performance: a block variant of GMRES. *SIAM Journal of Scientific and Statistical Computing* 27 (2003), 1608–1625.
- [11] BAKER, A. H., JESSUP, E. R., AND KOLEV, T. V. A simple strategy for varying the restart parameter in GMRES(m). *Journal of Computational and Applied Mathematics* 230 (2009), 751–761.
- [12] BAKER, A. H., JESSUP, E. R., AND MANTEUFFEL, T. A technique for accelerating the convergence of restarted GMRES. *SIAM Journal on Matrix Analysis and Applications* 26 (2004), 962–984.
- [13] BARICHELLO, L. B., AND CABRERA, L. C. An analytical approach for a nodal scheme of two-dimensional neutron transport problems. *Annals of Nuclear Energy* 38 (2011), 1310–1317.
- [14] BARICHELLO, L. B., CABRERA, L. C., CAMARGO, M., KNACKFUSS, R. F., RODRIGUES, P., AND SCHERER, C. S. On the application of the discrete-ordinates method in rarefied gas dynamics. *International Nuclear Atlantic Conference* (2005).
- [15] BARICHELLO, L. B., GARCIA, R. D. M., AND SIEWERT, C. E. Particular solutions of the discrete-ordinates method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 64 (2000), 219–226.
- [16] BARICHELLO, L. B., PICOLOTO, C. B., AND DA CUNHA, R. D. The ADO-nodal method for solving two-dimensional discrete ordinates transport problems. *Annals of Nuclear Energy* 108 (2017), 376–385.
- [17] BARICHELLO, L. B., AND SIEWERT, C. E. A discrete-ordinates solution for a non-grey model with complete frequency redistribution. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 62 (1999), 665–675.

- [18] BARICHELLO, L. B., AND SIEWERT, C. E. A new version of the discrete-ordinates method. *In: Proceedings of the 2nd International Conference on Computational Heat and Mass Transfer 1* (2001), 340–347.
- [19] BARICHELLO, L. B., TRES, A., PICOLATO, C. B., AND AZMY, Y. Y. Recent studies on the asymptotic convergence of the spatial discretization for two-dimensional discrete ordinates solutions. *Journal of Computational and Theoretical Transport* 45 (2016), 299–313.
- [20] BARRET, R. *Templates for the Solution of Linear Systems: Building Blocks for Iterative Methods*. Society for Industrial and Applied Mathematics, 1994.
- [21] BARROS, R. C., AND LARSEN, E. W. A spectral nodal method for one-group x, y -geometry discrete ordinates problems. *Nuclear Science and Engineering* 111 (1992), 34–35.
- [22] BELL, G. I., AND GLASTONE, S. *Nuclear Reactor Theory*. Van Nostrand Reinhold Company, New York, 1970.
- [23] BITTENCOURT, M. L., AND JEIJÓ, R. A. Análise comparativa de métodos diretos e iterativos para a solução de sistema de equações. *Revista Internacional de Métodos Numéricos para Cálculo y Diseño en Ingeniería* 13 (1997), 123–148.
- [24] BOLTZMANN, L. Weitere studien über das wärmeleichgewicht unter gas molekülen. *Sitzungsberichte Akademie der Wissenschaften* 60 (1872), 275–376.
- [25] CARLSON, B. G. *Transport Theory: Discrete Ordinate Quadrature Over the Unit Sphere*. Los Alamos Scientific Laboratory Report, Los Alamos, NM, 1970.

- [26] CASE, K. M., AND ZWEIFEL, P. F. *Linear Transport Theory*. Addison-Wesley, Reading, Massachusetts, 1967.
- [27] CERCIGNANI, C. *Theory and application of the Boltzmann Equation*. Elsevier, New York, 1975.
- [28] CERCIGNANI, C. *The Boltzmann Equation and its Applications*. Springer, New York, 1988.
- [29] CHANDRASEKHAR, S. *Radiative Transfer*. Oxford University Press, London, 1950.
- [30] CLAUDIO, D. M., AND MARINS, J. M. *Cálculo numérico computacional*. Atlas, São Paulo, 1989.
- [31] CROMIANSKI, S. R. *Formulações Espectronodais em Cálculos Neutrônicos Multidimensionais*. PhD thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2016.
- [32] DA CUNHA, R. D., TRES, A., AND BARICHELLO, L. B. 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. *ANS MC201* (April 19-23, 2015), Nashville, Tennessee.
- [33] DA CUNHA, R. D. NUMERICO: a software library for Numerical Analysis. FORTRAN 95 version, 2015–2017.
- [34] DE MOURA, F. W., BARICHELLO, L. B., DA CUNHA, R. D., AND PICOLOTO, C. B. On the influence of quadrature schemes for the iterative solution of linear systems in explicit two-dimensional discrete ordinates nodal formulations. *PHYSOR* (April 20-26, 2018), Cancún, México.
- [35] DUDERSTADT, J. J., AND HAMILTON, L. J. *Nuclear Reactor Analysis*. John Wiley, New York, 1976.

- [36] DUDERSTADT, J. J., AND HAMILTON, L. J. *Nuclear reactor analysis*. John Wiley & Sons, New York, 1976.
- [37] FAN, J., BOYD, I. D., CAI, C. P., HENNIGHAUSEN, K., AND CANDLER, G. V. Computation of rarefied gas flows around a naca 0012 airfoil. *AIAA Journal* 68 (2001), 618–625.
- [38] FILHO, J. F. P. *Abordagens Espectronodais para Modelos Multidimensionais em Transporte de Partículas*. PhD thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2011.
- [39] FIVELAND, W. A. Discrete-ordinate solutions of the radiative transport equation for rectangular enclosures. *Journal Heat Transfer* 106 (1984), 699–706.
- [40] FLETCHER, J. K. The solution of the time-independent multi-group neutron transport equation using spherical harmonics. *Annals of Nuclear Energy* 4 (1977), 401–405.
- [41] FLETCHER, J. K. A solution of the neutron transport equation using spherical harmonics. *Journal of Physics A: Mathematical and General* 16 (1983), 2827–2835.
- [42] FRANCO, N. B. *Cálculo Numérico*. Pearson Prentice Hall, São Paulo, 2006.
- [43] GARCIA, R. D. M. Métodos para solução da equação de transporte de partículas integro-diferencial. Escola de verão em teoria de transporte de partículas nêutras, PUCRS, Porto Alegre, 2002.
- [44] GARCIA, R. D. M., AND SIEWERT, C. E. Channel flow of a binary mixture of rigid spheres described by the linearized Boltzmann equation and driven by temperature, pressure and density gradients. *SIAM Journal on Applied Mathematics* 67 (2007), 1041–1063.

- [45] GARCIA, R. D. M., SIEWERT, C. E., AND YACOUT, A. Radiative transfer in a multilayer medium subject to fresnel boundary and interface conditions and uniform illumination by obliquely parallel rays. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 109 (2008), 2151–2170.
- [46] GERMAN, M. L., NEKRASOV, V. P., AND NOGOTOV, E. F. Numerical method for calculating the radiation transfer in two-phase media of complex geometry. *Dokl. Akad. Nauk Belarusi* 40 (1996), 122–126.
- [47] GOMES, R. R., AND BARROS, R. C. Computational modeling of monoenergetic neutral particle inverse transport problems in slab geometry. *American Institute of Physics* 1479 (2012), 2225–2228.
- [48] GONÇALEZ, T. T., AND DA CUNHA, R. D. Seleção dinâmica da dimensão do subespaço de krylov no método GMRES(m) e suas variantes. *TEMA* 7 (2006), 277–286.
- [49] GONÇALVES, T. T. Algoritmos adaptativos para o método GMRES(m). Master’s thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2005.
- [50] GONZÁLES, M., FERNÁNDEZ, P., AND VELARDE, C. G. 2d numerical comparison between s_n and m_1 radiation transport methods. *Annals of Nuclear Energy* 36 (2009), 886–895.
- [51] HAGEMAN, L., AND YOUNG, D. *Applied Iterative Methods*. Academic Press, 1981.
- [52] HAUSER, E. B., PAZOS, R. P., AND DE VILHENA, M. T. An error bound estimate and convergence of the nodal- lts_n solution in a rectangle. *Annals of Nuclear Energy* 32 (2005), 1146–1156.
- [53] HÉBERT, A. High-order diamond differencing schemes. *Annals of Nuclear Energy* 33 (2006), 1479–1488.

- [54] HESTENES, M., AND STIEFEL, E. Methods of conjugate gradients for solving linear systems. *Journal of Research of the National Bureau of Standards* 49, 6 (1952), 409–436.
- [55] HESTHAVEN, J. S., AND WARBURTON, T. *Nodal Discontinuous Galerkin Methods*. Springer, 2008.
- [56] JÚDICE, J. J., AND PATRÍCIO, J. *Sistemas de Equações Lineares*. Imprensa da Universidade de Coimbra, 1996.
- [57] JEANS, J. H. The equations of radiative transfer of energy. *Mon. Not. Royal Astron. Soc.* 78 (1917), 28–36.
- [58] KNACKFUSS, R. F., AND BARICHELLO, L. B. On the temperature-jump problem in rarefied gas dynamics: the effect of the Cercignani-Lampis boundary condition. *SIAM Journal of Applied Mathematics* 66 (2006), 2149–2186.
- [59] KÓPHÁZI, J., LATHOUWERS, D., AND KLOOSTERMAN, J. L. Development of a three-dimensional time-dependent calculation scheme for molten salt reactors and validation of the measurement data of the molten salt reactor experiment. *Nuclear Science and Engineering* 163 (2009), 118–131.
- [60] LATHROP, K. D., AND BRINKLEY, F. W. *TWOTRAN-II, Two-dimensional multigroup discrete ordinates transport code*. Los Alamos Scientific Laboratory Report, Los Alamos, 1973.
- [61] LATHROP, K. D., AND CARLSON, B. G. *Transport Theory: Discrete Ordinate Quadrature Over the Unit Sphere*. Los Alamos Scientific Laboratory Report, Los Alamos, NM, 1965.

- [62] LATHROP, K. D., AND CARLSON, B. G. *Discrete ordinates angular quadrature of the neutron transport equation*. Tech. rep., Los Alamos Scientific Lab, New Mexico, 1964.
- [63] LAWRENCE, R. D. Progress in nodal methods for the solution of the neutron diffusion and transport equations. *Progress in Nuclear Energy* 17 (1986), 271–301.
- [64] LEWIS, E. E., AND JR, W. F. M. *Computational Methods of Neutron Transport*. John Wiley and Sons, New York, NY, 1984.
- [65] LEWIS, E. E., JR, W. F. M., AND HENRY, T. P. A two-dimensional finite element method for integral neutron transport calculations. *Nuclear Science and Engineering* 58 (1975), 203–212.
- [66] LONGONI, G., AND HAGHIGHAT, A. Development of new quadrature sets with the “Ordinate Splitting” technique. *Joint International Conference on Mathematics and Computation* (2001).
- [67] MARTIN, N., AND HÉBERT, A. A three-dimensional s_n high-order diamond differencing discretization with a consistent acceleration scheme. *Annals of Nuclear Energy* 36 (2009), 1787–1796.
- [68] MARTIN, W. R., AND DUDERSTADT, J. J. Finite element solutions of the neutron transport equation with applications to strong heterogeneities. *Nuclear Science and Engineering* 62 (1977), 371–390.
- [69] MENEZES, A. W., FILHO, H. A., BARROS, R. C., MORAES, C. S., AND DOMINGUEZ, D. S. Analytical spatial reconstruction scheme for the coarse-mesh solutions generated by the constant spectral nodal method for monoenergetic discrete ordinates transport calculations in x,y geometry fission-chain reacting systems. *Annals of Nuclear Energy* 53 (2013), 274–279.

- [70] MEYER, C. D. *Matrix Analysis and Applied Linear Algebra*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, 2000.
- [71] MODEST, F. M. *Radiative Heat Transfer*. Mc Graw-Hill, New York, 1993.
- [72] OHWADA, T., AOKI, K., AND SONE, Y. Heat transfer and temperature distribution in a rarefied gas between two parallel plates with different temperatures: numerical analysis of the Boltzmann equation for a hard sphere molecule. *Rarefied Gas Dynamics: Theoretical and Computational Techniques* (1989).
- [73] PAIGE, C., AND SAUNDERS, M. A. Solution of sparse indefinite systems of linear equations. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing* 7, 3 (1986), 856–869.
- [74] PICOLOTO, C. B. *Um Estudo Sobre Equações Auxiliares em Formulações Nodais Explícitas para Solução da Equação de Transporte de Nêutrons Bidimensional*. PhD thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2015.
- [75] PICOLOTO, C. B., TRES, A., DA CUNHA, R. D., AND BARICHELLO, L. B. An analytical approach for a nodal scheme of two-dimensional neutron transport problems. *Annals of Nuclear Energy* 38 (2011), 1310–1317.
- [76] PICOLOTO, C. B., TRES, A., DA CUNHA, R. D., AND BARICHELLO, L. B. Closed-form solutions for nodal formulations of two dimensional transport problems in heterogeneous media. *Annals of Nuclear Energy* 86 (2015), 65–71.
- [77] PISSANETZKY, S. *Sparse Matrix Technology*. Academic Press, 1984.

- [78] PROLO FILHO, J., AND BARICHELLO, L. B. General expressions for auxiliary equations of a nodal formulation for two-dimensional transport calculations. *Journal of Computational and Theoretical Transport* 43 (2014), 352–373.
- [79] PUTMAN, W. M., AND LIN, S. Finite-volume transport on various cubed-sphere grids. *Journal of Computational Physics* 227 (2007), 55–78.
- [80] QUARTERONI, A., SACCO, R., AND SALERI, F. *Tables of Equal Weight Quadrature EQN Over the Unit Sphere*. SLos Alamos Scientific Laboratory Report, LA-4734, Los Alamos, NM, 1971.
- [81] QUARTERONI, A., SACCO, R., AND SALERI, F. *Numerical Mathematics*, second ed. Texts in Applied Mathematics. Springer, Berlin, 2007.
- [82] RHOADES, W., AND CHILDS, R. *DORT/TORT two- and threedimensional discrete ordinates transport, Version 2.7.3*. ORNL Radiation Shielding Information Center, Oak Ridge, 1993.
- [83] RODRIGUES, P. *Dinâmica de gases rarefeitos e transferência radiativa: aplicações em geometria cilíndrica*. PhD thesis, PROMEC/UFRGS, 2003.
- [84] SAAD, Y., AND SCHULTZ, M. H. GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 12, 4 (1975), 617–629.
- [85] SAAD, Y., AND SCHULTZ, M. H. Uniform positive-weight quadratures for discrete ordinate transport calculations. *Nuclear Science and Engineering* 131 (1999), 199–207.
- [86] SAUTER, E., AZEVEDO, F. S., THOMPSON, M., AND VILHENA, M. T. Solution of the one-dimensional transport equation by the vector green

- function method: Error bounds and simulation. *Applied Mathematics and Computation* 219 (2013), 1291–1301.
- [87] SCHERER, C., PROLO FILHO, J., AND BARICHELLO, L. B. An analytical approach to the unified solution of kinetic equations in rarefied gas dynamics. i. flow problems. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik* 60 (2009), 90–117.
- [88] SHARIPOV, F., AND BERTOLDO, G. Numerical solution of the linearized Boltzmann equation for an arbitrary intermolecular potential. *Journal of Computational Physics* 228 (2009), 3345–3357.
- [89] SHARIPOV, F., AND SELEZNEV, V. Data on internal rarefied gas flows. *J. Phys. Chem. Ref. Data* 27 (1998), 657–706.
- [90] SIEWERT, C. E. Poiseuille, thermal creep and Couette flow: results based on the CES model of the linearized Boltzmann equation. *European Journal of Mechanics B/Fluids* 21 (2002), 579–597.
- [91] SJODEN, G., AND HAGHIGHAT, A. PENTRAN, a 3-d scalable transport code with complete phase space decomposition. *Transactions of the American Nuclear Society* 74 (1996), 181–183.
- [92] STAMNES, K., TSAY, S. C., WISCOMBE, W. J., AND JAYAWEERA, K. Numerically stable algorithm for discrete-ordinate-method radiative transfer in multiple scattering and emitting layered media. *Applied Optics* 27 (1988), 2502–2509.
- [93] TANDALL, J. L. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge University Press, 2002.
- [94] TANDALL, J. L. *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations - Steady State and Time Dependent Problems*. SIAM, 2007.

- [95] TIMOSHPOL'SKII, V. I., GERMAN, M. L., GRINCHUK, P. S., AND OZNOBISHIN, A. N. Numerical solution of the radiative-transfer equation for an absorbing, emitting and scattering medium with a complex 3-d geometry. *Journal of Engineering and Thermophysics* 78 (2005), 144–154.
- [96] TRES, A. *Análise de Esquemas de Aproximações Angulares para a Equação de Transporte Bidimensional em Ordenadas Discretas via Formulações Nodais*. PhD thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2015.
- [97] TRES, A., PICOLOTO, C. B., FILHO, J. F. P., DA CUNHA, R. D., AND BARICHELO, L. B. Explicit formulation of a nodal transport method for discrete ordinates calculations in two-dimensional fixed-source problems. *Kerntechnik* 79 (2014), 155.
- [98] TRUELOVE, J. S. Three-dimensional radiation in absorbing-emitting-scattering media using the discrete-ordinates approximation. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 39 (1998), 27–31.
- [99] VORST, H. A. Bi-CGStab: a fast and smoothly converging variant of Bi-CG for the solution of nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal of Scientific and Statistical Computing* 13 (1992), 631–644.
- [100] WAGNER, J. C., MOSHER, S. W., EVANS, T. M., PELOW, D. E., AND TURNER, J. A. Hybrid and parallel domain-decomposition methods development to enable Monte Carlo for reactor analyses. *Progress in Nuclear Science and Technology* 2 (2011), 815–820.
- [101] WALKER, H. F., AND ZHOU, L. A simples GMRES. *Numerical Linear Algebra with Applications* 1 (1994), 571–581.

- [102] WALTERS, F. W., AND O'DELL, R. D. Nodal methods for discrete ordinates transport problems in (x, y) geometry. *ANS/ENS* (1981), Munique, Alemanha.
- [103] WANG, Y., AND RAGUSA, J. C. A high-order discontinuous Galerkin method for the s_n transport equations on 2d unstructured triangular meshes. *Annals of Nuclear Energy* 36 (2009), 931–939.
- [104] WANG, Y., AND RAGUSA, J. C. On the convergence of DGFEM applied to the discrete ordinates transport equation for structured and unstructured triangular meshes. *Nuclear Science and Engineering* 163 (2009), 56–72.
- [105] WICK, G. C. Uber ebene diffusions problem. *Z. Phys.* 120 (1943), 702–705.
- [106] WOOD, J. *Computational Methods in Reactor Shielding*. Pergamon Press, Oxford, England, 1982.
- [107] X-5 TEAM MONTE CARLO. *MCNP - A General N-Particle Transport Code, Version 5, Volume I: Overview and Theory*. Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM, 2003.
- [108] YI, C., AND HAGHIGHAT, A. A three-dimensional block-oriented hybrid discrete ordinates and characteristics method. *Nuclear Science and Engineering* 164 (2010), 221–247.
- [109] ZABADAL, J. R., VILHENA, M. T., AND BARICHELLO, L. B. Solution of the three- dimensional one- group discrete ordinates problems by the LTS_N method. *Annals of Nuclear Energy* 22 (1991), 131–134.
- [110] ZHANG, Q., AND ABDEL-KHALIK, H. Global variance reduction for monte carlo reactor physics calculations. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 64 (2000), 219–226.

- [111] ZIVER, A., SHAHDATULLAH, M., EATON, M., OLIVEIRA, C., UMPLEBY, C., AND GODDARD, A. Finite element spherical harmonics (P_N) solutions of the three-dimensional takeda benchmark problems. *Annals of Nuclear Energy* 32 (2005), 925–948.