

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

Métodos de Aceleração para a Solução da Equação de Transporte

por

Daniella Machado Schulz

Trabalho submetido como requisito parcial
para a obtenção do grau de
Doutora em Matemática Aplicada

Profa. Dra. Liliane Basso Barichello
Orientadora

Prof. Dr. Rudnei Dias da Cunha
Co-orientador

Porto Alegre, outubro de 2018.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Schulz, Daniella Machado

Métodos de Aceleração para a Solução da Equação de Transporte / Daniella Machado Schulz.—Porto Alegre: PPG-MAp da UFRGS, 2018.

91 p.: il.

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

Orientadora: Barichello, Liliane Basso; Co-orientador: da Cunha, Rudnei Dias

Tese: Matemática Aplicada,
Teoria de Transporte, Métodos de Aceleração, Wynn-Epsilon,
DSA, ADO unidimensional, CMFD, ADO bidimensional

Métodos de Aceleração para a Solução da Equação de Transporte

por

Daniella Machado Schulz

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

Doutora em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Teoria de Transporte de Partículas

Orientadora: Profa. Dra. Liliane Basso Barichello

Co-orientador: Prof. Dr. Rudnei Dias da Cunha

Banca examinadora:

Prof. Dr. Roberto David Martinez Garcia
IEAv-DCTA

Prof. Dr. Cláudio Zen Petersen
PPGMMAT-UFPel

Prof. Dr. João Batista da Paz Carvalho
PPGMap-UFRGS

Tese apresentada e aprovada em
outubro de 2018.

Prof. Dr. Carlos Hoppen
Coordenador

Voici mon secret. Il est très simple:

on ne voit bien qu'avec le cœur.

L'essentiel est invisible pour les yeux.

Antoine de Saint-Exupéry

AGRADECIMENTOS

Aos meus pais, Carlos e Juraci, por todo o apoio, paciência e incentivo. Que mesmo sem muitas vezes entenderem tudo que eu fiz ou passei, estiveram ao meu lado. Por todo o exemplo de vida que me deram, por serem meu porto seguro, de onde eu vim e para onde sei que sempre poderei voltar. Vocês são tudo na minha vida.

Ao meu companheiro, Eliseu, por estar ao meu lado durante toda essa trajetória. Perto ou longe sempre me entendeu, me incentivou e quando eu mais precisei não permitiu que eu me sentisse sozinha. Só nós dois sabemos tudo que passamos, e o quanto crescemos juntos. Toda a minha gratidão e o meu amor são teus.

À Eliseu, Cláudia, Louise e Ivone, por serem minha família no Rio Grande do Sul, por torcerem por mim e me ampararem sempre. Ao Gauss por todo companheirismo, companhia e distração. Amo vocês.

À minha orientadora, professora Dra. Liliane Basso Barichello, por permitir que o desenvolvimento desse trabalho fosse possível.

Ao professor Dr. Rudnei Dias da Cunha, por toda orientação, sabedoria e conhecimento compartilhado, por não permitir que eu desistisse, por me ajudar em cada desafio e me motivar a cada dia. Terei o seu exemplo como norte na minha carreira, obrigada.

À Cristina e Cássio pela amizade, ajuda e companhia nas fases mais difíceis desse trabalho.

Aos meus amigos e familiares que participaram dessa fase, que torceram por mim, em especial ao colega Paulo Bernt, por todo ensinamento e companheirismo

durante a fase final do trabalho, que muito me ensinou da profissão que escolhi para a vida.

Ao PPGMAP, à UFRGS e à CAPES pela oportunidade e apoio financeiro durante parte desse trabalho.

Sumário

LISTA DE FIGURAS	ix
LISTA DE TABELAS	xi
LISTA DE SÍMBOLOS E SIGLAS	xii
1 INTRODUÇÃO	1
2 EQUAÇÃO DE TRANSPORTE UNIDIMENSIONAL	7
2.1 Discretizações nas Variáveis Angular e Espacial	7
2.1.1 Aproximação em Ordenadas Discretas	7
2.1.2 Método <i>Diamond Difference</i>	8
3 MÉTODO DE ITERAÇÃO DE FONTE	13
3.1 SI: <i>Source Iteration</i>	13
4 MÉTODO EPSILON PAR	16
4.1 Método Epsilon- k Par em Problemas de Transporte	16
5 ACELERAÇÃO VIA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO	20
5.1 DSA: <i>Diffusion Synthetic Acceleration</i>	23
6 DIFERENÇAS FINITAS EM MALHA GROSSA	27
6.1 CMFD: <i>Coarse-Mesh Finite Difference</i>	31
7 ESTIMATIVA INICIAL ADO PARA O MÉTODO SI	33
7.1 Método Analítico de Ordenadas Discretas	33
7.1.1 Solução Particular ($c \neq 1$)	37
7.1.2 ADO multirregiões	38

7.1.3	ADO acelerando o processo iterativo de solução da Equação de Transporte	40
8	RESULTADOS NUMÉRICOS: PROBLEMAS UNIDIMENSIONAIS	41
8.1	Problema Homogêneo	42
8.1.1	Problema 1	42
8.2	Problemas Heterogêneos	49
8.2.1	Problema 2	49
8.2.2	Problema 3	54
8.2.3	Problema 4	59
9	MÉTODO DE ITERAÇÃO DE FONTE EM GEOMETRIA BIDIMENSIONAL	63
9.1	Varredura Bidimensional	64
10	RESULTADOS NUMÉRICOS: PROBLEMAS BIDIMENSIONAIS	69
10.1	Problema 5	69
10.2	Problema 6	71
10.3	Problema 7	73
11	CONCLUSÕES	76
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	78
APÊNDICE A	DESENVOLVIMENTO DO MÉTODO DSA	85

Lista de Figuras

Figura 2.1	Grade Espacial	9
Figura 6.1	Malha Grossa	28
Figura 7.1	Meio Heterogêneo	38
Figura 8.1	Efeito do aumento do valor de N_{ADO} no método ADO+SI. . .	45
Figura 8.2	Razão do tempo computacional entre o método SI e os esquemas de aceleração DSA, Epsilon- k e CMFD	46
Figura 8.3	Razão do tempo computacional entre o método SI e os esquemas de aceleração DSA, Epsilon e CMFD, tendo os fluxos escalares iniciais em todos os métodos sido gerado pelo método ADO para o Problema 1	47
Figura 8.4	Razão do tempo computacional entre o método SI e o esquema de aceleração Epsilon- k , sem e com a inicialização do fluxo escalar inicial gerado pelo método ADO, para o Problema 1	48
Figura 8.5	Razão do tempo computacional entre o método SI e os esquemas de aceleração DSA e CMFD, sem e com a inicialização do fluxo escalar inicial gerado pelo método ADO	49
Figura 8.6	Razão do tempo computacional entre o método SI e os esquemas de aceleração DSA, Epsilon- k e CMFD, tendo o fluxo escalar inicial gerado pelo método ADO para o Problema 2	51
Figura 8.7	Razão do tempo computacional entre o método SI e o esquema de aceleração Epsilon- k , sem e com a inicialização do fluxo escalar inicial gerado pelo método ADO, para o Problema 2	53
Figura 8.8	Razão do tempo computacional entre o método SI e os esquemas de aceleração Epsilon- k , DSA e CMFD, sem e com a inicialização do fluxo escalar inicial gerado pelo método ADO, para o Problema 2	54
Figura 8.9	Razão do tempo computacional entre o método SI e os esquemas de aceleração DSA, Epsilon- k e CMFD para o Problema 3 . . .	56
Figura 8.10	Razão do tempo computacional entre o método SI e o esquema de aceleração Epsilon- k , sem e com a inicialização do fluxo escalar inicial gerado pelo método ADO, para o Problema 3	58

Figura 8.11 Razão do tempo computacional entre o método SI e os esquemas de aceleração Epsilon- k , DSA e CMFD, sem e com a inicialização do fluxo escalar inicial gerado pelo método ADO, para o Problema 3	59
Figura 8.12 Representação do Problema 4 apresentado em [48]	60
Figura 8.13 Fluxo escalar para o Problema 4	62
Figura 9.1 Esquema de Quadratura Simétrica de Nível para o conjunto S_8 de ordenadas discretas	64
Figura 9.2 Direções para o esquema de Quadratura Simétrica de Nível bidimensional.	65
Figura 10.1 Geometria do Problema 5	70

Lista de Tabelas

Tabela 4.1	Dependência dos valores da sequência inicial para gerar o método Epsilon- k	17
Tabela 4.2	Procedimento matricial para executar Aceleração Epsilon- k	18
Tabela 8.1	Resultados do Problema 1	43
Tabela 8.2	Resultados do Problema 1 inicializando com o fluxo escalar gerado pelo ADO	44
Tabela 8.3	Descrições dos parâmetros usados no Problema 2	50
Tabela 8.4	Resultados do Problema 2	50
Tabela 8.5	Resultados do Problema 2 inicializando com o fluxo escalar gerado pelo ADO	52
Tabela 8.6	Descrição dos parâmetros usados no Problema 3	55
Tabela 8.7	Resultados do Problema 3	55
Tabela 8.8	Resultados do Problema 3 inicializando com o fluxo escalar gerado pelo ADO	57
Tabela 8.9	Parâmetros do Problema 4 apresentado em [48]	60
Tabela 8.10	Fluxos escalares para o Problema 4	61
Tabela 8.11	Número de iterações utilizados pelos métodos SI, DSA e CMFD na resolução do Problema 4	62
Tabela 9.1	Direções e pesos utilizados para a Quadratura Simétrica de Nível	66
Tabela 9.2	Distribuição dos pesos para a Quadratura Simétrica de Nível	67
Tabela 10.1	Fluxo escalar médio para $\sigma_{s0} = 0,9$	71
Tabela 10.2	Fluxo escalar médio para $\sigma_{s0} = 0,3$	72
Tabela 10.3	Fluxo escalar médio para o Problema 6	73
Tabela 10.4	Fluxo escalar médio para Problema 7	74
Tabela 10.5	Número de iterações utilizando o método SI e o método ADO+SI para o Problema 7	75

LISTA DE SÍMBOLOS E SIGLAS

θ	Ângulo polar
φ	Ângulo azimutal
μ, η, ξ	Variáveis angulares
x	Variável espacial
σ_t	Seção de choque total
σ_{s_j}	Seção de choque de espalhamento de ordem j
σ_a	Seção de choque de absorção
σ_{tr}	Seção de choque de transporte
ψ	Fluxo angular de nêutrons
ϕ	Fluxo escalar de nêutrons
J	Corrente
Q	Fonte externa
L	Comprimento da barra
c	Razão de espalhamento
F_1, F_2	Condições de contorno
α_1, α_2	Constantes para condição de contorno reflexiva
N	Número de variáveis angulares discretas
k	Número de células para a malha grossa
Δ_k	Espessura da célula grossa

$\Phi_{0,k}$	Média do fluxo escalar na célula grossa
$\Phi_{1,k+1/2}$	Corrente na célula grossa
$\Sigma_{u,k}$	Média da seção de choque na célula grossa ($u = t, s_0, s_1$)
\hat{D}	Coefficiente de difusão
τ	Variável espacial adimensional
β_l	Constantes da lei de espalhamento
P	Grau de anisotropia
ω_k	Pesos da quadratura de Gauss Legendre
M	Matriz diagonal com os nós da quadratura
W	Matriz diagonal com os pesos da quadratura
$Y(\nu, \mu)$	Soluções propostas para o sistema de equações diferenciais ordinárias
$\Upsilon_{\pm}(\nu)$	Vetores $N \times 1$ das soluções propostas para o sistema de equações diferenciais ordinárias
r	Região
k^*	Número de iterações
M	Número de células
ϵ	Tolerância
Ω	Variável angular
V	Número de direções para problemas bidimensionais
\vec{r}	Variável espacial

$\pm 9,9999(-9)$ Números em notação científica são apresentados dessa forma nas tabelas, representando $\pm 9,9999 \times 10^{-9}$

<i>SI</i>	<i>Source Iteration</i>
<i>DSA</i>	<i>Diffusion Synthetic Acceleration</i>
<i>ADO</i>	<i>Analytical Discrete Ordinates</i>
<i>HO</i>	Alta Ordem
<i>LO</i>	Baixa Ordem
<i>S_N</i>	Ordenadas Discretas
<i>NDA</i>	<i>Nonlinear Diffusion Acceleration</i>
<i>CMFD</i>	<i>Coarse-Mesh Finite Difference</i>
<i>CMDSA</i>	<i>Coarse-Mesh Diffusion Synthetic Acceleration</i>
<i>LCMFD</i>	<i>Linearized Coarse-Mesh Finite Difference</i>
<i>TSA</i>	<i>Transport Synthetic Acceleration</i>
<i>DD</i>	<i>Diamond Difference</i>
<i>MRE</i>	Máximo Erro Relativo
<i>LQ_N</i>	Quadratura Simétrica de Nível

RESUMO

Neste trabalho, técnicas para aceleração do método *Source Iteration* (SI) para solução de problemas de transporte de partículas neutras em geometrias unidimensional e bidimensional são propostas. Adicionalmente, comparações entre métodos numéricos conhecidos na literatura para aceleração da convergência da solução gerada pelo SI para problemas unidimensionais são abordados, incluindo o *Diffusion Synthetic Acceleration* (DSA) e *Coarse Mesh Finite Difference* (CMFD). Um novo método de aceleração é proposto utilizando o método de Ordenadas Discretas Analítico (ADO) como estimativa inicial, mostrando-se eficiente no caso unidimensional. Uma possível generalização desse esquema de aceleração é proposta para problemas bidimensionais, não obtendo resultados tão expressivos quanto como os obtidos no caso unidimensional.

ABSTRACT

In this work, the solution for unidimensional and bidimensional neutron transport problems using Source Iteration (SI) method is presented. Comparisons among well known acceleration schemes applied to the unidimensional SI method are made, namely Diffusion Synthetic Acceleration (DSA) and Coarse Mesh Finite Difference (CMFD). A new acceleration scheme employing the Analytical Discrete Ordinates (ADO) method as an initial guess is proposed and shown to be efficient for one-dimensional problems. A possible generalization for two-dimensional problems is considered, but it doesn't yield to similar improvements as in the one-dimensional case.

1 INTRODUÇÃO

A equação de Boltzmann foi primeiramente usada na teoria cinética dos gases [16]. A equação é não linear, porém nos problemas abordados nesse trabalho considera-se que entre as partículas estudadas não existe interação, assim tem-se a Equação Linear de Boltzmann, ou também dita equação de transporte. A equação de transporte fornece uma descrição quantitativa das distribuições espacial, direcional, energética e temporal das partículas em meios materiais [25]. Uma variedade de fenômenos que envolvem transporte de partículas, de aplicações em astrofísica à tráfego veicular, são modelados através desta equação [6, 16, 19, 41].

Particularmente, a modelagem física do transporte de nêutrons se refere a migração dessas partículas no interior de um meio material levando em conta a probabilidade de interação com os núcleos dos átomos deste meio. Esse é um fenômeno que possui importantes aplicações como, por exemplo, em reatores nucleares, equipamentos de proteção radiológica, medicina nuclear com terapia por captura neutrônica pelo Boro, agronomia, indústria com ensaios não-destrutivos através da neutrongrafia, entre outras [15].

A resolução da equação de transporte de nêutrons não é trivial, podendo depender de vários fatores como a geometria espacial do problema e propriedades físicas do meio em que está sendo modelado, dentre outros. Tradicionalmente, foram propostos vários esquemas iterativos para obter uma solução aproximada daquela equação. Um dos esquemas iterativos mais clássicos e fundamentais propostos para resolver problemas de transporte é o método de Iteração de Fonte (*Source Iteration*, SI) [1], que considera uma estimativa inicial arbitrária para o fluxo escalar inicial, e com ele gera uma estimativa para o fluxo angular. Dado o fluxo angular calcula-se um novo fluxo escalar, e o processo segue até atingir convergência.

Como mostrado por Adams e Larsen [1] quando a razão de espalhamento ($c = \sigma_s/\sigma_t$) se aproxima da unidade ou para os casos onde o meio é espesso, em livres caminhos médios, a convergência do método SI pode ser muito lenta. Para acelerar a convergência de esquemas iterativos, como o SI, muitos métodos têm sido desenvolvidos, tal como o apresentado por Willert, Taiano e Knoll [54] onde é utilizado o método de aceleração de Anderson [4], uma versão melhorada do método de Picard, que utiliza uma relação envolvendo os resíduos para melhorar a sequência gerada, acelerando a solução do problema de transporte. Esse trabalho [54] compara, para geometrias unidimensionais e um caso bidimensional, a convergência entre o método de Picard, o método de aceleração de Anderson ou ainda ambos associados ao método *Nonlinear Diffusion Acceleration* (NDA). Este último, NDA, utiliza uma resolução usual da equação do transporte (SI) como uma solução de alta ordem. O problema de baixa ordem consiste na equação de difusão acrescida de um termo associado ao fluxo escalar, portanto não linear, para representar a corrente, que é a integral sobre todas as direções do produto do fluxo angular e da direção. Esse método também é abordado nos trabalhos de Knoll e Park [32] e Willert, Park e Knoll [53].

Outra abordagem para acelerar a solução do problema de transporte é a apresentada por Martin, Oliveira e Park [39], onde os autores investigam as propriedades de aceleração ao introduzir um tensor não linear do tipo *quasi-diffusion* para solução de esquemas lineares e não lineares. Usando a matriz reduzida do tensor como um preconditionador para o método dos Gradientes Conjugados [30], consegue-se alta eficiência, pois pode-se gerar um problema equivalente onde a matriz do sistema é estritamente diagonal. Como consequência, o número de operações será reduzido para aproximadamente um terço, o que acelera a aplicação do método.

Métodos que utilizam a estratégia de resolver um problema de alta ordem (HO) e depois um de baixa ordem (LO) envolvendo difusão, de forma linear ou não, são conhecidos como HOLO [53]. Além do já citado NDA [54], outro método que

também utiliza essa abordagem é o *Diffusion Synthetic Acceleration* (DSA) [1]; este, para o problema LO, usa um fator de correção, entre a solução exata e a iterativa, e utilizando a aproximação de difusão calcula o erro iterativo, acrescentando ao fluxo escalar esse erro de forma a melhorar a solução e acelerar a convergência. Aqui a malha usada para o problema envolvendo difusão é a mesma utilizada no SI de alta ordem.

Também podemos citar os trabalhos de Larsen e Kelley [35, 36], que apresentam dois métodos: *Coarse-Mesh Finite Difference* (CMFD) e *Coarse-Mesh Diffusion Synthetic Acceleration* (CMDSA), os quais utilizam uma varredura SI como solução de alta ordem e introduzem uma atualização desta utilizando uma malha menos refinada que a usada no SI. No CMFD, no problema de baixa ordem, a equação de transporte é aproximada utilizando a equação de difusão em uma malha mais grossa que a utilizada no SI. A solução da equação de difusão é utilizada para melhorar a solução do problema de alta ordem e o esquema segue até atingir convergência. No CMDSA considera-se a diferença entre a solução exata e a iterativa, essa diferença gera um erro iterativo, assim passa-se a ter um problema para esse erro e não mais para os fluxos; uma estimativa para esse erro é calculada utilizando a aproximação de difusão e a solução é somada à solução de alta ordem. Pela sua não linearidade, o CMFD é mais fácil de aplicar para as iterações exteriores em problemas de autovalores; por outro lado, o método CMDSA não se torna instável se um fluxo angular se torna zero ou negativo na iteração, como ocorre no CMFD [36]. Nesses mesmos artigos [35, 36] ainda é apresentado o método *Linearized Coarse Mesh Finite Difference* (LCMFD) onde são usadas aproximações lineares para o fluxo angular e fonte; usando o mesmo processo que no CMFD, tem-se um fluxo escalar aproximado como atualização do fluxo escalar calculado no passo SI. Após, os autores mostram que o método LCMFD é algebricamente equivalente ao CMDSA. O método CMFD pode ser implementado utilizando paralelismo computacional, como mostrado em [31].

Assim, pode-se observar que vários métodos para acelerar a convergência de métodos iterativos para resolver a equação do transporte vêm sendo estudados. A resolução numérica da equação do transporte traz diversas complicações, muitas vezes se faz necessário abrir mão de uma solução mais refinada levando em consideração o tempo que o computador levaria para gerar tal solução. Para problemas de aplicação prática, como quando trata-se de reatores nucleares, na maioria das vezes não é possível resolver o problema considerando a modelagem física mais completa, a tempo da urgência que a tomada de decisão exige. Assim muitas simplificações e métodos de aceleração têm sido necessários.

O objetivo desse trabalho é estudar alguns desses métodos iterativos de aceleração a fim de testar a sua eficiência frente a problemas unidimensionais e bidimensionais de interesse, bem como propor uma nova abordagem nesse mesmo objetivo.

Dessa forma, o presente trabalho se encontra dividido de maneira que, no Capítulo 2 aborda-se a forma simplificada da equação do transporte unidimensional assim como as discretizações usualmente utilizadas. O Capítulo 3 apresenta o esquema iterativo *Source Iteration* (SI), uma descrição e o esquema iterativo escolhido. No Capítulo 4 mostra-se o método Epsilon Par [55], um método para acelerar convergência de sequências em geral, mas que aplica-se ao SI. No Capítulo 5 é abordado o método DSA, já bastante conhecido como um bom acelerador para os problemas estudados nesse trabalho. No Capítulo 6 discute-se outro método, CMFD, que assim como o método DSA utiliza a aproximação de difusão para a aceleração da equação de transporte, e também é bem conhecido nos problemas de aceleração.

Geralmente os métodos utilizados para acelerar a convergência dos problemas de transporte focam em realmente melhorar de alguma forma as estimativas intermediárias do processo iterativo, como os métodos estudados nos primeiros capítulos. Outra forma de reduzir o número de iterações e, muito provavelmente o

tempo computacional, pode estar em estimar melhor o valor da aproximação inicial dado para o processo iterativo, que normalmente é utilizado como sendo o vetor nulo. O estudo apresentado no artigo de Mansur et al. [38] mostra a utilização da equação de difusão para gerar tal aproximação inicial; a partir disso, propõe-se a utilização, ao invés da equação de difusão, do método de Ordenadas Discretas Analítico (ADO) [11, 12] como gerador de uma estimativa inicial para o processo iterativo. A descrição do método ADO, assim como a proposta de aceleração, encontram-se no Capítulo 7.

Além dos problemas unidimensionais, também trabalhou-se, de forma mais superficial nos problemas bidimensionais. A formulação do método SI bidimensional é apresentada no Capítulo 9. Diversos trabalhos têm resolvido esses mesmos problemas utilizando o método ADO bidimensional [8, 9, 13, 17, 44, 45, 46, 51, 52]. Conforme a divisão do domínio espacial aparece, se faz necessária a utilização da solução iterativa de sistemas lineares associados e recursos computacionais como o Centro de Supercomputação da UFRGS (Cesup), mesmo assim tem-se esbarrado no problema do tempo computacional. A solução tem se mostrado precisa, porém para alguns problemas levam-se dias para obter a solução. Assim, estendes-se a abordagem ADO+SI para problemas bidimensionais, com isso reduz-se o número de iterações do método SI a partir da resolução do problema utilizando o método ADO, com menos exigências, gerando a estimativa inicial. Isso também será descrito no mesmo capítulo.

Após a apresentação de todos esses métodos, no Capítulo 8 tem-se resultados numéricos para três diferentes problemas unidimensionais, usados para que seja possível analisar a eficiência de cada abordagem anteriormente apresentada. Ressaltam-se que a implementação computacional foi inteiramente realizada pelo nosso grupo de pesquisa, provavelmente havendo uma boa margem para otimizações dos procedimentos utilizados. Depois no Capítulo 10 trata-se da resolução de mais três problemas bidimensionais, utilizando o método SI e a proposta de aceleração

apresentada nesse trabalho. No Capítulo 11 discute-se os resultados obtidos no presente trabalho.

2 EQUAÇÃO DE TRANSPORTE UNIDIMENSIONAL

Neste capítulo, considera-se um problema de transporte de nêutrons em geometria unidimensional, estado estacionário, monoenergético com espalhamento linearmente anisotrópico [38],

$$\mu \frac{\partial \psi}{\partial x}(x, \mu) + \sigma_t(x)\psi(x, \mu) = \frac{\sigma_{s0}(x)}{2} \int_{-1}^1 \psi(x, \mu') d\mu' + \frac{3}{2} \sigma_{s1}(x) \mu \int_{-1}^1 \mu' \psi(x, \mu') d\mu' + \frac{Q(x)}{2}, \quad 0 < x < X, -1 \leq \mu \leq 1, \quad (2.1)$$

onde $\mu = \cos(\theta)$ é a variável angular, com θ o ângulo polar relativo à normal do eixo x , x é a variável espacial, $\psi(x, \mu)$ é o fluxo angular de nêutrons, Q é a fonte externa, $\sigma_t(x)$ é a seção de choque macroscópica total, σ_{s0} , σ_{s1} são os coeficientes da expansão da lei de espalhamento em polinômios de Legendre tais que $c = \sigma_{s0}/\sigma_t$ é a razão de espalhamento, para problemas sem fissão. Completa-se o problema apresentado pela Equação (2.1) com as condições de contorno,

$$\psi(0, \mu) = F_1(\mu) + \alpha_1 \psi(0, -\mu), \quad 0 < \mu \leq 1, \quad (2.2)$$

e

$$\psi(X, \mu) = F_2(\mu) + \alpha_2 \psi(X, -\mu), \quad -1 < \mu \leq 0. \quad (2.3)$$

onde $F_1(\mu)$, $F_2(\mu)$ são fluxos incidentes nos contornos e α_1 , α_2 são constantes, neste trabalho assumindo valores zero ou um.

2.1 Discretizações nas Variáveis Angular e Espacial

2.1.1 Aproximação em Ordenadas Discretas

Nos métodos determinísticos, uma formulação bastante usada na literatura é a de ordenadas discretas (S_N) [20], na qual a ideia principal dessa técnica é

substituir o domínio contínuo da variável angular (θ) por um conjunto de direções, (θ_m), denominadas ordenadas discretas. No caso unidimensional a partir da equação íntegro diferencial obtém-se um sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem. A equação (2.1) pode ser escrita na formulação de ordenadas discretas como

$$\mu_n \frac{d}{dx} \psi_n(x) + \sigma_t(x) \psi_n(x) = \frac{\sigma_{s0}(x)}{2} \sum_{k=1}^N \psi_k(x) \omega_k + \frac{3}{2} \sigma_{s1}(x) \mu_n \sum_{k=1}^N \mu_k \psi_k(x) \omega_k + \frac{Q(x)}{2}, \quad 0 < x < X, n = 1, \dots, N \quad (2.4)$$

com condições de contorno

$$\psi(0, \mu_n) = F_1(\mu_n) + \alpha_1 \psi_m(0, -\mu_n), \quad n = 1, \dots, N/2 \quad (2.5)$$

e

$$\psi(X, \mu_n) = F_2(\mu_n) + \alpha_2 \psi_m(X, -\mu_n), \quad n = N/2 + 1, \dots, N \quad (2.6)$$

onde

$$\psi_n(x) = \psi(x, \mu_n) \quad (2.7)$$

com μ_n e ω_k sendo os N nós e pesos da quadratura de Gauss-Legendre no intervalo de -1 a 1 .

2.1.2 Método *Diamond Difference*

Na discretização do domínio espacial, de comprimento L , considera-se um nodo Ω_j , ou célula, espacial de espessura h_j , os parâmetros $\sigma_{t,j}, \sigma_{s,j}$ constantes em cada nodo [37] e fonte isotrópica constante Q_j , com $j = 1, \dots, M$.

A abordagem em ordenadas discretas [15] é válida para qualquer célula arbitrária. Então, pode-se escrever a equação (2.4) como

$$\mu_n \frac{d}{dx} \psi_n(x) + \sigma_{t,j} \psi_n(x) = \frac{\sigma_{s0,j}}{2} \sum_{k=1}^N \psi_k(x) \omega_k + \frac{3}{2} \sigma_{s1,j} \mu_n \sum_{k=1}^N \mu_k \psi_k(x) \omega_k + \frac{Q_j}{2}, \quad (2.8)$$

onde

$$x_{j-1/2} < x < x_{j+1/2}, \quad n = 1, \dots, N. \quad (2.9)$$

Ilustra-se a grade espacial na figura abaixo.

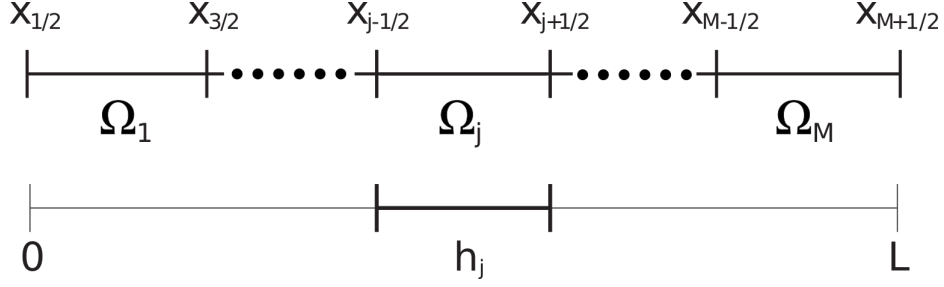


Figura 2.1: Grade Espacial

Integrando a equação (2.8) utilizando o operador

$$\frac{1}{h_j} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} (\cdot) dx, \quad (2.10)$$

pode-se escrever o fluxo angular médio, na direção μ_n , na célula de discretização espacial

$$\psi_{n,j} = \frac{1}{h_j} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \psi_n(x) dx. \quad (2.11)$$

Com isso obtém-se as equações discretizadas de balanço espacial

$$\begin{aligned} \frac{\mu_n}{h_j} (\psi_{n,j+1/2} - \psi_{n,j-1/2}) + \sigma_{t,j} \psi_{n,j} &= \frac{\sigma_{s0,j}}{2} \sum_{k=1}^N \psi_{k,j} \omega_k + \\ &\frac{3}{2} \sigma_{s1,j} \mu_n \sum_{k=1}^N \mu_k \psi_{k,j} \omega_k + \frac{Q_j}{2}, \end{aligned} \quad (2.12)$$

onde

$$\psi_{n,j\pm 1/2} = \psi_n(x_{j\pm 1/2}). \quad (2.13)$$

Assim, tem-se $3N$ incógnitas ($\psi_{n,j-1/2}$, $\psi_{n,j}$ e $\psi_{n,j+1/2}$, para cada intervalo espacial) para a solução do sistema de N equações (2.12). Como as condições

de contorno fornecem N equações, reduzi-se a quantidade de incógnitas para $2N$. Portanto tem-se N equações e $2N$ incógnitas.

Para que seja possível encontrar uma solução única para esse problema, é necessário utilizar N equações auxiliares, conforme [37], que podem ser escritas na forma

$$\psi_{n,j} = \frac{(1 + \theta_{n,j})\psi_{n,j+1/2} + (1 - \theta_{n,j})\psi_{n,j-1/2}}{2}. \quad (2.14)$$

Substituindo (2.14) em (2.12) obtém-se a equação resultante de varredura para a direita ($\mu_n > 0$), ou seja com valores conhecidos do fluxo angular à esquerda e no centro de cada célula espacial pode-se calcular qual será o valor do fluxo à direita, caminhando célula a célula na malha espacial,

$$\begin{aligned} \psi_{n,j+1/2} = & \frac{\left(\frac{\mu_n}{h_j} - \frac{\sigma_{t,j}}{2}(1 - \theta_{n,j})\right)\psi_{n,j-\frac{1}{2}} + \frac{\sigma_{s0,j}}{2} \sum_{k=1}^N \psi_{k,j}\omega_k}{\frac{\mu_n}{h_j} + \frac{\sigma_{t,j}}{2}(1 + \theta_{n,j})} \\ & + \frac{\frac{3}{2}\sigma_{s1,j}\mu_n \sum_{k=1}^N \mu_k \psi_{k,j}\omega_k + \frac{Q_j}{2}}{\frac{\mu_n}{h_j} + \frac{\sigma_{t,j}}{2}(1 + \theta_{n,j})}, \end{aligned} \quad (2.15)$$

onde

$$j = 1, \dots, M; \quad n = 1, \dots, \frac{N}{2} \quad (2.16)$$

e, para a esquerda ($\mu_n < 0$)

$$\begin{aligned} \psi_{n,j-1/2} = & \frac{\left(\frac{|\mu_n|}{h_j} - \frac{\sigma_{t,j}}{2}(1 + \theta_{n,j})\right)\psi_{n,j+\frac{1}{2}} + \frac{\sigma_{s0,j}}{2} \sum_{k=1}^N \psi_{k,j}\omega_k}{\frac{|\mu_n|}{h_j} + \frac{\sigma_{t,j}}{2}(1 - \theta_{n,j})} \\ & + \frac{\frac{3}{2}\sigma_{s1,j}|\mu_n| \sum_{k=1}^N \mu_k \psi_{k,j}\omega_k + \frac{Q_j}{2}}{\frac{|\mu_n|}{h_j} + \frac{\sigma_{t,j}}{2}(1 - \theta_{n,j})}, \end{aligned} \quad (2.17)$$

onde

$$j = M, \dots, 1; \quad n = \left(\frac{N}{2} + 1\right), \dots, N. \quad (2.18)$$

De acordo com a literatura, diferentes esquemas são definidos conforme valores atribuídos ao parâmetro θ . Para o método *Diamond Difference* [15] tem-se que o fluxo angular médio em cada nodo é a média aritmética dos fluxos angulares nas interfaces da célula espacial, denominado de método trapezoidal. Para satisfazer (2.14) toma-se $\theta_{n,j} = 0$, e tem-se a equação auxiliar

$$\psi_{n,j} = \frac{\psi_{n,j-1/2} + \psi_{n,j+1/2}}{2} \quad (2.19)$$

para finalizar, substitui-se o valor de $\theta_{n,j} = 0$ nas equações (2.15) e (2.17).

Uma vez definidas as duas expressões gerais para as varreduras para a direita, pela Eq. (2.15), e para a esquerda, pela Eq. (2.17), iguala-se $\theta_{n,j}$ a zero e tem-se como equações da varredura utilizando DD

$$\begin{aligned} \psi_{n,j+1/2} = & \frac{\left(\frac{\mu_n}{h_j} - \frac{\sigma_{t,j}}{2}\right) \psi_{n,j-\frac{1}{2}} + \frac{\sigma_{s0,j}}{2} \sum_{k=1}^N \psi_{k,j} \omega_k}{\frac{\mu_n}{h_j} + \frac{\sigma_{t,j}}{2}} \\ & + \frac{\frac{3}{2} \sigma_{s1,j} \mu_n \sum_{k=1}^N \mu_k \psi_{k,j} \omega_k + \frac{Q_j}{2}}{\frac{\mu_n}{h_j} + \frac{\sigma_{t,j}}{2}}, \end{aligned} \quad (2.20)$$

onde

$$j = 1, \dots, M; \quad n = 1, \dots, \frac{N}{2} \quad (\mu_n > 0) \quad (2.21)$$

e,

$$\begin{aligned} \psi_{n,j-1/2} = & \frac{\left(\frac{|\mu_n|}{h_j} - \frac{\sigma_{t,j}}{2}\right) \psi_{n,j+\frac{1}{2}} + \frac{\sigma_{s0,j}}{2} \sum_{k=1}^N \psi_{k,j} \omega_k}{\frac{|\mu_n|}{h_j} + \frac{\sigma_{t,j}}{2}} \\ & + \frac{\frac{3}{2} \sigma_{s1,j} |\mu_n| \sum_{k=1}^N \mu_k \psi_{k,j} \omega_k + \frac{Q_j}{2}}{\frac{|\mu_n|}{h_j} + \frac{\sigma_{t,j}}{2}}, \end{aligned} \quad (2.22)$$

onde

$$j = M, \dots, 1; \quad n = \left(\frac{N}{2} + 1\right), \dots, N \quad (\mu_n < 0). \quad (2.23)$$

Outras equações auxiliares podem ser consideradas, atribuindo diferentes valores de θ , como por exemplo o método degrau que considera $\theta_{n,j} = 1$ quando $\mu_n > 0$ e $\theta_{n,j} = -1$ quando $\mu_n < 0$ [37], ou o método degrau característico [34] que considera

$$\theta_{n,j} = \cot g \left(\frac{h_j \sigma_{t,j}}{2\mu_n} \right) - \frac{2\mu_n}{h_j \sigma_{t,j}}$$

quando $\mu_n > 0$ e

$$\theta_{n,j} = -\cot g \left(\frac{h_j \sigma_{t,j}}{2|\mu_n|} \right) - \frac{2|\mu_n|}{h_j \sigma_{t,j}}$$

quando $\mu_n < 0$.

Nos próximos capítulos estudam-se diferentes métodos para resolver iterativamente problemas de transporte de partículas neutras, e as ferramentas desenvolvidas nesse capítulo serão de total importância para o desenvolvimento dos mesmos.

3 MÉTODO DE ITERAÇÃO DE FONTE

Entre todos os esquemas iterativos de solução da equação do transporte, o método de Iteração de Fonte (*Source Iteration*, SI) é o mais usual [1]. Dada a equação (2.1), gera-se um processo iterativo na forma

$$\mu \frac{\partial \psi^{(l+1)}}{\partial x}(x, \mu) + \sigma_t(x) \psi^{(l+1)}(x, \mu) = \frac{\sigma_{s0}(x)}{2} \phi^{(l)}(x) + \frac{3}{2} \sigma_{s1}(x) \mu J^{(l)}(x) + \frac{Q(x)}{2}, \quad l \geq 0 \quad (3.1)$$

com condições de contorno

$$\psi^{(l+1)}(0, \mu) = F_1(\mu) + \alpha_1 \psi^{(l+1)}(0, -\mu), \quad 0 < \mu \leq 1, \quad (3.2)$$

e

$$\psi^{(l+1)}(X, \mu) = F_2(\mu) + \alpha_2 \psi^{(l+1)}(X, -\mu), \quad -1 \leq \mu < 0 \quad (3.3)$$

onde l é o índice de iteração, $\phi^{(0)}$ e $J^{(0)}$ são inicializados arbitrariamente. Uma vez que a Equação (3.1) é resolvida, introduz-se uma nova estimativa para o fluxo escalar,

$$\phi^{(l+1)}(x) = \int_{-1}^1 \psi^{(l+1)}(x, \mu') d\mu' \quad (3.4)$$

e para a corrente

$$J^{(l+1)}(x) = \int_{-1}^1 \psi^{(l+1)}(x, \mu') \mu' d\mu' \quad (3.5)$$

no lado direito da Equação (3.1) e repete-se o processo até atingir o critério de parada,

$$\max_{x \in (0, L)} \left| \frac{\phi^{(l+1)}(x) - \phi^{(l)}(x)}{\phi^{(l+1)}(x)} \right| \leq \epsilon. \quad (3.6)$$

onde ϵ é a tolerância exigida para parada, ou até extrapolar o número máximo de iterações, definido pelo usuário.

3.1 SI: *Source Iteration*

Para resolver as equações em ordenadas discretas, apresentadas na Equação (2.4), em cada passo do processo iterativo usamos o método *Diamond*

Difference (DD) [15]. Assim, o sistema apresentado pelas equações (3.1)-(3.3) toma a forma

$$\frac{\mu_n}{h_j}(\psi_{n,j+1/2}^{(l+1/2)} - \psi_{n,j-1/2}^{(l+1/2)}) + \sigma_{t,j}\psi_{n,j}^{(l+1/2)} = \frac{\sigma_{s0,j}}{2}\phi_j^{(l)} + \frac{3}{2}\sigma_{s1,j}\mu_n J_j^{(l)} + \frac{Q_j}{2} \quad (3.7)$$

onde $1 \leq n \leq N$ é o índice da discretização angular e $1 \leq j \leq M$ é o índice da discretização espacial, com a equação auxiliar

$$\psi_{n,j}^{(l+1/2)} = \frac{1}{2}(\psi_{n,j+1/2}^{(l+1/2)} + \psi_{n,j-1/2}^{(l+1/2)}) \quad (3.8)$$

e condições de contorno

$$\psi_{n,1/2}^{(l+1/2)} = F_1(\mu) + \alpha_1 \psi_{m,1/2}^{(l+1/2)}, \quad \mu_n > 0 \quad (3.9)$$

e

$$\psi_{n,J+1/2}^{(l+1/2)} = F_2(\mu) + \alpha_2 \psi_{m,J+1/2}^{(l+1/2)}, \quad \mu_n < 0. \quad (3.10)$$

Considerando que, $\mu_n = -\mu_m$, a aproximação para o fluxo escalar e corrente médios gerados são dados por

$$\phi_j^{(l+1/2)} = \sum_{n=1}^N \psi_{n,j}^{(l+1/2)} \omega_n, \quad 1 \leq j \leq M \quad (3.11)$$

$$J_j^{(l+1/2)} = \sum_{n=1}^N \mu_n \psi_{n,j}^{(l+1/2)} \omega_n, \quad 1 \leq j \leq M \quad (3.12)$$

sendo que são usadas as seguintes atualizações

$$\phi_j^{(l+1)} = \phi_j^{(l+1/2)}, \quad 1 \leq j \leq M, \quad (3.13)$$

$$J_j^{(l+1)} = J_j^{(l+1/2)}, \quad 1 \leq j \leq M. \quad (3.14)$$

Substituindo a equação (3.8) no lado esquerdo da equação (3.7) para eliminar $\psi_{n,j}^{(l+1/2)}$, tem-se para $\mu_n > 0$,

$$\psi_{n,j+1/2}^{(l+1/2)} = \frac{(2\mu_n - \sigma_{t,j}h_j)\psi_{n,j-1/2}^{(l+1/2)} + h_j(\sigma_{s0,j}\phi_j^{(l)} + 3\sigma_{s1,j}\mu_n J_j^{(l)} + Q_j)}{2\mu_n + \sigma_{t,j}h_j}, \quad (3.15)$$

e para $\mu_n < 0$,

$$\psi_{n,j-1/2}^{(l+1/2)} = \frac{(2|\mu_n| - \sigma_{t,j}h_j)\psi_{n,j+1/2}^{(l+1/2)} + h_j(\sigma_{s0,j}\phi_j^{(l)} + 3\sigma_{s1,j}|\mu_n|J_j^{(l)} + Q_j)}{2|\mu_n| + \sigma_{t,j}h_j}. \quad (3.16)$$

Como mostrado por Adams e Larsen [1] quando a razão de espalhamento se aproxima da unidade ou para os casos onde o meio é espesso, em livres caminhos médios, a convergência do método SI pode ser muito lenta. Assim, métodos que acelerem a convergência para esses problemas têm sido estudados. A utilização de alguns desses métodos será apresentada nos capítulos seguintes.

4 MÉTODO EPSILON PAR

O método Epsilon Par, proposto por Wynn [55], é indicado para acelerar sequências que convergem lentamente [29], com restrição ao caso em que a convergência é logarítmica, ou seja,

$$\lim_{k \rightarrow \infty} \frac{x_{k+1} - L}{x_k - L} = 1, \quad (4.1)$$

sendo L é o limite da sequência. Não existe acelerador universal para tais sequências [22].

Esse método produz sequências de valores que podem ser organizados como linhas (ou colunas) de uma tabela. Essa disposição dos elementos da sequência ajuda a obter a expressão para corrigir (acelerando) a sequência original $\{x_k\}$. O processo começa com a inicialização das duas primeiras colunas, a primeira com zeros e a segunda com a sequência que deseja-se acelerar, como abaixo,

$$\varepsilon_{-1}^{(k)} = 0, \quad \varepsilon_0^{(k)} = x_k. \quad (4.2)$$

e as próximas colunas são definidas iterativamente

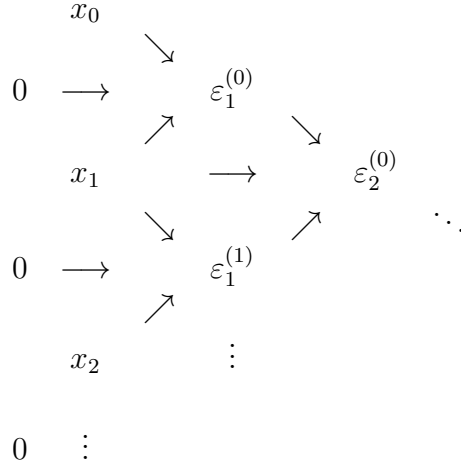
$$\varepsilon_{j+1}^{(k)} = \varepsilon_{j-1}^{(k+1)} + [\varepsilon_j^{(k+1)} - \varepsilon_j^{(k)}]^{-1}. \quad (4.3)$$

Essa aceleração ocorre de forma triangular, como pode-se ver na Tabela 4.1. As colunas de índice ímpar são os passos intermediários no processo de aceleração, e considera-se apenas as colunas de índice par, assim geram-se os valores de $\varepsilon_{j+1}^{(k)}$.

4.1 Método Epsilon- k Par em Problemas de Transporte

Normalmente, não encontra-se muitas referências utilizando o método de aceleração Epsilon Par, porém, como ele é um acelerador para sequências em

Tabela 4.1: Dependência dos valores da sequência inicial para gerar o método Epsilon- k



geral, ele pode ser utilizado junto as sequências geradas pelo método SI, como já utilizado por Ganapol [24].

Aqui, em cada iteração resolve-se uma versão em Ordenadas Discretas da Equação (3.1) usando como processo de varredura o esquema DD [15] e então aplica-se o método de aceleração Epsilon Par [23, 29, 55] para acelerar a convergência do fluxo escalar gerado em cada iteração. Utilizam-se k iterações da varredura, testando o critério de parada (3.6) a cada nova iteração, k sendo escolhido pelo usuário. Se o processo não convergir nessas k iterações utilizam-se todos os fluxos escalares gerados nessas k iterações no método Epsilon- k .

Como o método Epsilon- k acelera sequências, o processo consiste em tomar os k vetores de fluxo escalar e, para cada posição em todos os vetores, gerar um novo fluxo para essa mesma posição, por exemplo, considerando a primeira posição do vetor de fluxos escalares em cada uma das iterações. Com esses k valores gera-se um novo fluxo para a primeira posição do vetor "acelerado". Faz-se o mesmo com cada uma das posições; assim, não usa-se o método Epsilon- k para acelerar o valor do vetor fluxo escalar como um todo, e sim para acelerar cada posição utilizando os valores gerados para essa mesma posição em k iterações anteriores. Com isso, gera-

se um novo vetor para o fluxo escalar (acelerado) e testa-se novamente o critério de parada. Se convergir esse vetor sai da rotina como sendo o resultado, caso contrário, ele entra atualizando o lado direito da varredura e repete-se o processo. Ou seja, a cada k iterações aplica-se uma aceleração.

Dito de outra forma, iniciando para $l = 0$ com a varredura apresentada na seção 3.1 utilizando as equações (3.1), (3.4) e (3.6), escolhe-se qual valor de k deseja-se utilizar na aceleração, toma-se o valor k , para determinar quantas varreduras serão necessárias. Após k varreduras constrói-se um esquema matricial para gerar a aceleração desejada. Assim, cria-se uma matriz de dimensão $(k + 1) \times (k + 2)$ onde a primeira coluna será inicializada com zeros, a segunda coluna receberá os valores de $\phi(x)$ de cada uma das k iterações e as demais são preenchidas conforme a regra abaixo.

```

do j=1, ..., k
  do i=0, ..., k-j
    
$$\varepsilon(i, j) = (\varepsilon(i + 1, j - 1) - \varepsilon(i, j - 1))^{-1} + \varepsilon(i + 1, j - 2)$$

  end do
end do

$$\phi_j = \varepsilon(0, k)$$


```

A construção da matriz pode ser vista na Tabela (4.2).

Tabela 4.2: Procedimento matricial para executar Aceleração Epsilon- k

	-1	0	1	...	p-1	p
0	$\varepsilon_{-1}^0 = 0$	$\varepsilon_0^0 = \phi^0$	ε_1^0	...	ε_{k-1}^0	ε_k^0
1	$\varepsilon_{-1}^1 = 0$	$\varepsilon_0^1 = \phi^1$	ε_1^1	...	ε_{k-1}^1	
...		
p-1	$\varepsilon_{-1}^{k-1} = 0$	$\varepsilon_0^{k-1} = \phi^{k-1}$	ε_1^{k-1}			
p	$\varepsilon_{-1}^k = 0$	$\varepsilon_0^k = \phi^k$				

O procedimento acima é realizado para cada posição do vetor ϕ e utiliza o valor atualizado de $\phi = \varepsilon_k^0$ na equação (3.1). Prossegue-se até que a convergência seja obtida

Além do método Epsilon- k , outros métodos foram estudados e serão apresentados nos próximos capítulos.

5 ACELERAÇÃO VIA EQUAÇÃO DE DIFUSÃO

Com o intuito de acelerar o processo gerado pelo método SI, em 1963, Kopp [33] introduziu a equação de difusão como operador de baixa ordem para acelerar a convergência do processo iterativo em problemas de transporte. Em 1969, Gelbard e Hageman [28] utilizaram uma aproximação de difusão e ordenadas discretas, porém Reed [47] mostrou que a abordagem gerada era convergente para malhas espaciais suficientemente finas, mas divergente para malhas grossas. Em 1976, Alcouffe [2, 3] fez correções na forma de escrever as aproximações para o problema de baixa ordem e desenvolveu um algoritmo que converge rapidamente para qualquer espessura de malha, que foi chamado de *Diffusion Synthetic Acceleration* (DSA) [1]. As modificações que Alcouffe considerou foram: utilizar maior número de pontos da malha que utilizam o parâmetro de absorção (σ_a) e não considerar uma aproximação, $\gamma = \gamma_N = \sum_{\mu_n > 0} \mu_n \omega_n \approx 1/2$, para o parâmetro γ que aparece na formulação.

Ainda nos últimos anos, o método DSA vem evoluindo com diferentes objetivos: comparar a sua eficiência com outros métodos (SI e TSA) para problemas de radiação [27], utilizar diferentes malhas no problema de alta ordem e baixa ordem de forma a diminuir a complexidade do problema e melhorar a aceleração [49], analisar sob quais condições a aplicação do DSA em problemas tridimensionais é satisfatória [21], entre outros.

Para um estudo inicial do método DSA seguiu-se a formulação desenvolvida por Alcouffe [2, 3] para gerar os resultados deste trabalho. Essa abordagem é apresentada por Adams e Larsen [1], fazendo a generalização para o problema linearmente anisotrópico. Dessa forma, parte-se de uma iteração SI escrita como

$$\mu \frac{\partial \psi^{(l+1/2)}}{\partial x}(x, \mu) + \sigma_t(x) \psi^{(l+1/2)}(x, \mu) = \frac{\sigma_{s0}(x)}{2} \phi^{(l)}(x) + \frac{3}{2} \sigma_{s1}(x) \mu J^{(l)}(x) + \frac{Q(x)}{2}, \quad (5.1)$$

com as condições de contorno

$$\psi^{(l+1/2)}(0, \mu) = F_1(\mu) + \alpha_1 \psi^{(l+1/2)}(0, -\mu), \quad 0 < \mu \leq 1, \quad (5.2)$$

e

$$\psi^{(l+1/2)}(L, \mu) = F_2(\mu) + \alpha_2 \psi^{(l+1/2)}(L, -\mu), \quad -1 \leq \mu < 0. \quad (5.3)$$

Se subtrairmos as equações (5.1), (5.2) e (5.3) das equações (2.1), (2.2) e (2.3), respectivamente, considerando $\alpha_1 = 0$ e $F_2(\mu) = 0$, ou seja, apenas contorno à direita reflexivo, e definindo

$$f(x, \mu) = \psi(x, \mu) - \psi^{(l+1/2)}(x, \mu), \quad (5.4)$$

$$\phi^{(l+1/2)}(x) = \int_{-1}^1 \psi^{(l+1/2)}(x, \mu') d\mu' \quad (5.5)$$

obtem-se

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial f}{\partial x}(x, \mu) + \sigma_t(x) f(x, \mu) - \frac{\sigma_{s0}(x)}{2} \int_{-1}^1 f(x, \mu') d\mu' - \\ \frac{3}{2} \mu \sigma_{s1}(x) \int_{-1}^1 \mu' f(x, \mu') d\mu' = \frac{\sigma_{s0}(x)}{2} [\phi^{(l+1/2)}(x) - \phi^{(l)}(x)] + \\ \frac{3}{2} \mu \sigma_{s1}(x) [J^{(l+1/2)}(x) - J^{(l)}(x)], \end{aligned} \quad (5.6)$$

com

$$f(0, \mu) = 0, \quad 0 < \mu \leq 1, \quad (5.7)$$

e

$$f(L, \mu) = f(L, -\mu), \quad -1 \leq \mu < 0. \quad (5.8)$$

Como esse problema tem a mesma complexidade que o problema de transporte inicial, utiliza-se a aproximação de difusão para resolução do problema em f , ou seja, expande-se a solução da equação (5.6) em polinômios de Legendre, considerando o caso particular de polinômios de ordem 1 (o desenvolvimento do

processo que define o método pode ser acompanhado no Apêndice A), gerando as equações

$$\frac{d}{dx}f_1(x) + \sigma_a(x)f_0(x) = \sigma_{s0}(x)[\phi^{(l+1/2)}(x) - \phi^{(l)}(x)] \quad (5.9)$$

e

$$\frac{d}{dx}f_0(x) + 3\sigma_{tr}(x)f_1(x) = 3\sigma_{s1}(x)[J^{(l+1/2)}(x) - J^{(l)}(x)] \quad (5.10)$$

onde $\sigma_a(x) = \sigma_t(x) - \sigma_{s0}(x)$ e $\sigma_{tr}(x) = \sigma_t(x) - \sigma_{s1}(x)$.

Para facilitar os cálculos, supõe-se $J^{(l+1/2)}(x) - J^{(l)}(x) = 0$ isolando $f_1(x)$ em (5.10) e substituindo em (5.9), tem-se

$$-\frac{d}{dx}\frac{1}{3\sigma_{tr}(x)}\frac{d}{dx}f_0(x) + \sigma_a(x)f_0(x) = \sigma_s(x)[\phi^{(l+1/2)}(x) - \phi^{(l)}(x)]. \quad (5.11)$$

É fácil ver que

$$f_0(x) = \int_{-1}^1 f(x, \mu)d\mu \approx F^{(l+1)}(x) \quad (5.12)$$

e assim, tem-se,

$$-\frac{d}{dx}\frac{1}{3\sigma_{tr}(x)}\frac{d}{dx}F^{(l+1)}(x) + \sigma_a(x)F^{(l+1)}(x) = \sigma_s(x)[\phi^{(l+1/2)}(x) - \phi^{(l)}(x)]. \quad (5.13)$$

Utilizando as condições de contorno de Marshak [16], tem-se as condições de contorno

$$F^{(l+1)}(0) - \frac{2}{3\sigma_t(0)}\frac{dF^{(l+1)}}{dx}(0) = 0, \quad (5.14)$$

$$\frac{dF^{(l+1)}}{dx}(L) = 0, \quad (5.15)$$

onde

$$F^{(l+1)}(x) \approx \int_{-1}^1 f(x, \mu)d\mu \quad (5.16)$$

em l e com a atualização

$$\phi^{(l+1)}(x) = \phi^{(l+1/2)}(x) + F^{(l+1)}(x), \quad (5.17)$$

nota-se que a solução padrão do SI fica acrescida do termo $F^{(l+1)}(x)$, que é referente ao erro iterativo no fluxo escalar.

5.1 DSA: *Diffusion Synthetic Acceleration*

Depois de cada varredura que gera $\psi_{n,j}^{(l+1/2)}$, pela resolução da formulação utilizando as aproximações S_N e *Diamond Difference*, gera-se o problema S_N para a correção discretizada $f_{n,j}$. Definindo essas correções como

$$f_{n,j\pm 1/2} = \psi_{n,j\pm 1/2} - \psi_{n,j\pm 1/2}^{(l+1/2)}, \quad (5.18)$$

então das equações (3.7)-(3.10), com $\alpha_1 = 0$ e $F_2(\mu) = 0$, tem-se

$$\begin{aligned} \frac{\mu_n}{h_j}(f_{n,j+1/2} - f_{n,j-1/2}) + \sigma_{t_j} f_{n,j} - \frac{\sigma_{s0_j}}{2} \sum_{m=1}^N f_{n,j} \omega_m - \\ \frac{3}{2} \mu_n \sigma_{s1_j} \sum_{m=1}^N \mu_m f_{m,j} \omega_m = \frac{\sigma_{s0_j}}{2} (\phi_j^{(l+1/2)} - \phi_j^{(l)}) + \frac{3\sigma_{s1_j} \mu_n}{2} [J_j^{(l+1/2)} - J_j^{(l)}] \end{aligned} \quad (5.19)$$

$$f_{n,j} = \frac{1}{2}(f_{n,j+1/2} + f_{n,j-1/2}) \quad (5.20)$$

$$f_{n,1/2} = 0, \quad \mu_n > 0 \quad (5.21)$$

e utilizando o contorno reflexivo

$$f_{n,M+1/2} = f_{m,M+1/2}, \quad \mu_n = -\mu_m < 0. \quad (5.22)$$

Aplicando a aproximação P_1 nas equações (5.19)-(5.22), multiplicando por ω_n (ou por $\mu_n \omega_n$), somando sobre n e introduzindo a aproximação

$$f_{n,j\pm 1/2} = \frac{1}{2}(F_{j\pm 1/2} + 3\mu_n G_{j\pm 1/2}) \quad (5.23)$$

onde

$$F_{j\pm 1/2} = \sum_{n=0}^N f_{n,j\pm 1/2} \omega_n \quad (5.24)$$

e

$$G_{j\pm 1/2} = \sum_{n=0}^N \mu_n f_{n,j\pm 1/2} \omega_n \quad (5.25)$$

tem-se que as equações para a correção são

$$\frac{1}{h_j} (G_{j+1/2}^{(l+1)} - G_{j-1/2}^{(l+1)}) + \sigma_{a_j} F_j^{(l+1)} = \sigma_{s_j} (\phi_j^{(l+1/2)} - \phi_j^{(l)}), \quad (5.26)$$

$$\frac{1}{3h_j} (F_{j+1/2}^{(l+1)} - F_{j-1/2}^{(l+1)}) + \sigma_{t_j} G_j^{(l+1)} = 0, \quad (5.27)$$

$$F_j^{(l+1)} = \frac{1}{2} (F_{j+1/2}^{(l+1)} + F_{j-1/2}^{(l+1)}), \quad G_j^{(l+1)} = \frac{1}{2} (G_{j+1/2}^{(l+1)} + G_{j-1/2}^{(l+1)}) \quad (5.28)$$

$$\gamma F_{1/2}^{(l+1)} + G_{1/2}^{(l+1)} = 0, \quad (5.29)$$

onde $\gamma = \sum_{\mu_n > 0} \mu_n \omega_n$ e

$$G_{M+1/2}^{(l+1)} = 0. \quad (5.30)$$

Usando (5.28) para eliminar $F_j^{(l+1)}$ e $G_j^{(l+1)}$ das equações (5.26) e (5.27),

tem-se

$$\frac{1}{h_j} (G_{j+1/2}^{(l+1)} - G_{j-1/2}^{(l+1)}) + \sigma_{a_j} \frac{1}{2} (F_{j+1/2}^{(l+1)} + F_{j-1/2}^{(l+1)}) = \sigma_{s_j} (\phi_j^{(l+1/2)} - \phi_j^{(l)}), \quad (5.31)$$

$$\frac{1}{3h_j} (F_{j+1/2}^{(l+1)} - F_{j-1/2}^{(l+1)}) + \sigma_{t_j} \frac{1}{2} (G_{j+1/2}^{(l+1)} + G_{j-1/2}^{(l+1)}) = 0. \quad (5.32)$$

Somando essas duas equações tem-se

$$G_{j+1/2}^{(l+1)} = -\frac{1}{3\sigma_{t_j} h_j} (F_{j+1/2}^{(l+1)} - F_{j-1/2}^{(l+1)}) - \frac{\sigma_{a_j} h_j}{4} (F_{j+1/2}^{(l+1)} + F_{j-1/2}^{(l+1)}) + \frac{\sigma_{s_j} h_j}{2} (\phi_j^{(l+1/2)} - \phi_j^{(l)}), \quad 1 \leq j \leq M. \quad (5.33)$$

Subtraindo as mesmas duas equações e substituindo j por $j + 1$ tem-se

$$G_{j+1/2}^{(l+1)} = -\frac{1}{3\sigma_{t_{j+1}}h_j}(F_{j+3/2}^{(l+1)} - F_{j+1/2}^{(l+1)}) + \frac{\sigma_{a_{j+1}}h_{j+1}}{4}(F_{j+3/2}^{(l+1)} + F_{j+1/2}^{(l+1)}) - \frac{\sigma_{s_{j+1}}h_{j+1}}{2}(\phi_{j+1}^{(l+1/2)} - \phi_{j+1}^{(l)}), \quad 0 \leq j \leq M-1. \quad (5.34)$$

Para $1 \leq j \leq M-1$ podem-se igualar o lado direito das equações (5.33) e (5.34), e com isso tem-se

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{3\sigma_{t_{j+1}}h_{j+1}}(F_{j+3/2}^{(l+1)} - F_{j+1/2}^{(l+1)}) + \frac{1}{3\sigma_{t_j}h_j}(F_{j+1/2}^{(l+1)} - F_{j-1/2}^{(l+1)}) + \\ & \frac{\sigma_{a_{j+1}}h_{j+1}}{4}(F_{j+3/2}^{(l+1)} + F_{j+1/2}^{(l+1)}) + \frac{\sigma_{a_j}h_j}{4}(F_{j+1/2}^{(l+1)} + F_{j-1/2}^{(l+1)}) = \\ & \frac{\sigma_{s_{j+1}}h_{j+1}}{2}(\phi_{j+1}^{(l+1/2)} - \phi_{j+1}^{(l)}) + \frac{\sigma_{s_j}h_j}{2}(\phi_j^{(l+1/2)} + \phi_j^{(l)}). \end{aligned} \quad (5.35)$$

Substituindo a Equação (5.29) na Equação (5.34) obtém-se

$$\begin{aligned} \gamma F_{1/2} - \frac{1}{3\sigma_{t_1}h_1}(F_{3/2}^{(l+1)} - F_{1/2}^{(l+1)}) + \frac{\sigma_{a_1}h_1}{4}(F_{3/2}^{(l+1)} + F_{1/2}^{(l+1)}) = \\ \frac{\sigma_{s_1}h_1}{2}(\phi_1^{(l+1/2)} - \phi_1^{(l)}) \end{aligned} \quad (5.36)$$

e substituindo a Equação (5.30) na Equação (5.33) tem-se

$$\begin{aligned} \frac{1}{3\sigma_{t_M}h_M}(F_{M+1/2}^{(l+1)} - F_{M-1/2}^{(l+1)}) + \frac{\sigma_{a_M}h_M}{4}(F_{M+1/2}^{(l+1)} + F_{M-1/2}^{(l+1)}) = \\ \frac{\sigma_{s_M}h_M}{2}(\phi_M^{(l+1/2)} - \phi_M^{(l)}). \end{aligned} \quad (5.37)$$

Resolve-se o problema de difusão de baixa ordem utilizando as Equações (5.35)–(5.37) para $F_{j+1/2}^{(l+1)}$ e atualiza-se o valor de $\phi_j^{(l+1/2)}$ por

$$\phi_j^{(l+1)} = \phi_j^{(l+1/2)} + \frac{1}{2}(F_{j+1/2}^{(l+1)} + F_{j-1/2}^{(l+1)}), \quad 1 \leq j \leq M. \quad (5.38)$$

Pode-se considerar também as condições de contorno como ambas sendo arbitrárias, com $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$. Assim tem-se um problema similar ao anterior com alterações nas equações que dependem da segunda condição de contorno.

Substituindo-se a equação (5.22) por

$$f_{n,J+1/2} = 0, \quad \mu_n < 0, \quad (5.39)$$

a equação (5.30) por

$$-\gamma F_{M+1/2}^{(l+1)} + G_{M+1/2}^{(l+1)} = 0, \quad (5.40)$$

e a equação(5.37) por

$$\begin{aligned} \gamma F_{M+1/2} + \frac{1}{3\sigma_{t_M} h_M} (F_{M+1/2}^{(l+1)} - F_{M-1/2}^{(l+1)}) + \frac{\sigma_{a_M} h_M}{4} (F_{M+1/2}^{(l+1)} + F_{M-1/2}^{(l+1)}) = \\ \frac{\sigma_{s_M} h_M}{2} (\phi_M^{(l+1/2)} - \phi_M^{(l)}). \end{aligned} \quad (5.41)$$

Com isso conclui-se a implementação do método DSA. Outro método conhecido e bastante eficiente, sendo muito competitivo com o método DSA, estudado nesse capítulo, é o método *Coarse Mesh Finite Diference* que será apresentado no capítulo seguinte.

6 DIFERENÇAS FINITAS EM MALHA GROSSA

Assim como o DSA, o método *Coarse-Mesh Finite Difference* (CMFD) considera uma iteração simples, consistindo em uma varredura SI considerada HO, seguida por um problema de baixa ordem (LO) usando difusão [31, 35, 36]. Porém, existem algumas diferenças substanciais entre os dois métodos citados: enquanto o DSA utiliza a mesma malha tanto para o problema HO como para o problema LO, tendo a solução LO como uma correção linear na malha fina para o fluxo escalar do passo HO, o método CMFD usa uma malha grossa (*coarse-mesh*) para o problema LO e usa o fluxo escalar médio no volume de cada célula da malha grossa como solução LO.

Seguindo os trabalhos de Larsen e Kelley [31, 35, 36], o esquema começa com uma iteração SI da forma

$$\mu \frac{\partial \psi^{(l+1/2)}}{\partial x}(x, \mu) + \sigma_t(x) \psi^{(l+1/2)}(x, \mu) = \frac{\sigma_{s0}(x)}{2} \phi^{(l)}(x) + \frac{3}{2} \sigma_{s1}(x) \mu J^{(l)}(x) + \frac{Q(x)}{2}, \quad (6.1)$$

com as condições de contorno

$$\psi^{(l+1/2)}(0, \mu) = F_1(\mu) + \alpha_1 \psi^{(l+1/2)}(0, -\mu), \quad 0 < \mu \leq 1, \quad (6.2)$$

e

$$\psi^{(l+1/2)}(L, \mu) = F_2(\mu) + \alpha_2 \psi^{(l+1/2)}(L, -\mu), \quad -1 \leq \mu < 0, \quad (6.3)$$

usando S_N para discretizar a variável angular e uma discretização espacial, como apresentado nas Equações (3.7) à (3.12). No método SI clássico, como apresentado no Capítulo 3, o fluxo escalar na malha fina na iteração $l+1$ é definido simplesmente como:

$$\phi_{0,j}^{(l+1)} = \phi_{0,j}^{(l+1/2)}, \quad 1 \leq j \leq M. \quad (6.4)$$

O método CMFD substitui a Equação (6.4) por um cálculo mais sofisticado. Para esse método, introduz-se a notação para a malha grossa espacial. Essa malha contém $K \leq M$ células espaciais, cada uma contendo células da malha fina como mostra a Figura 6.1. Se p_k é o número de células finas na k -ésima célula grossa, então para $0 \leq k \leq K$,

$$P_0 = 0 \quad (6.5)$$

$$P_k = \sum_{k'=1}^k p_{k'} = \text{número de células finas nas primeiras } k \text{ células grossas} \quad (6.6)$$

$$P_K = M = \text{número total de células finas} \quad (6.7)$$

e

$$\begin{aligned} X_{k+1/2} &= x_{p_k+1/2} = \text{parede direita da } k\text{-ésima célula grossa} \\ &= \text{parede esquerda da } (k+1)\text{-ésima célula grossa.} \end{aligned} \quad (6.8)$$

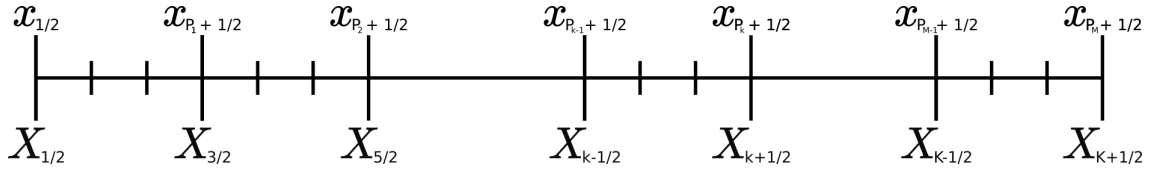


Figura 6.1: Malha Grossa

Introduz-se ainda a notação

$$\sum_{j \in k} = \sum_{j=P_k+1}^{P_{k+1}} \quad (6.9)$$

para a soma de todas as j células finas na k -ésima célula grossa. Defini-se ainda outras quantidades nas células grossas [36] como a espessura da célula grossa k ,

$$\Delta_k = \sum_{j \in k} h_j, \quad (6.10)$$

como a média fluxo escalar no volume da célula grossa k ,

$$\Phi_{0,k} = \frac{1}{\Delta_k} \sum_{j \in k} \phi_j h_j, \quad (6.11)$$

compondo a da fonte no volume da célula grossa k ,

$$Q_k = \frac{1}{\Delta_k} \sum_{j \in k} q_j h_j, \quad (6.12)$$

a corrente na parede direita da célula k sendo a mesma da malha fina na mesma posição,

$$\Phi_{1,k+1/2} = J_{P_{k+1/2}}, \quad (6.13)$$

sendo a média da seção de choque no volume da célula grossa k ($u = t, s_0, s_1$),

$$\Sigma_{u,k} = \frac{1}{\Delta_k} \sum_{j \in k} \sigma_{u,j} h_j, \quad (6.14)$$

e para a seção de choque ponderada pelo fluxo na célula grossa k ($u = t, s_0, s_1$)

$$\Sigma_{u,k}^{(l+1/2)} = \frac{\sum_{j \in k} \sigma_{u,j} \phi_j^{(l+1/2)} h_j}{\sum_{j \in k} \phi_j^{(l+1/2)} h_j}. \quad (6.15)$$

Usa-se, para ressaltar a notação, letras minúsculas para denotar quantidades nas células finas e por letras maiúsculas as quantidades nas células grossas.

Para derivar o método CMFD, aplica-se $\sum_{n=1}^N (\cdot) w_n$ em (3.7), obtendo assim:

$$\frac{1}{h_j} \left(J_{j+1/2}^{(l+1/2)} - J_{j-1/2}^{(l+1/2)} \right) + \sigma_{t,j} \phi_j^{(l+1/2)} = \sigma_{s,j}^{(l)} \phi_j^{(l+1/2)} + q_j. \quad (6.16)$$

Agora, aplicando $\sum_{j \in k} (\cdot) h_j$ em (6.16), usando as definições dadas pelas equações (6.10) a (6.15), obtem-se

$$\Phi_{1,k+1/2}^{(l+1/2)} - \Phi_{1,k-1/2}^{(l+1/2)} + \Sigma_{t,k}^{(l+1/2)} \Phi_{0,k}^{(l+1/2)} \Delta_k = \Sigma_{s,k}^{(l)} \Phi_{0,k+1}^{(l)} \Delta_k + Q_k \Delta_k. \quad (6.17)$$

Então, define-s $\hat{D}_{k+1/2}^{(l+1/2)}$ em cada parede das células interiores da malha grossa, i.e., é para $1 \leq k \leq K - 1$,

$$\Phi_{1,k+1/2}^{(l+1/2)} = -\frac{2}{3} \left(\frac{\Phi_{0,k+1}^{(l+1/2)} - \Phi_{0,k}^{(l+1/2)}}{\sum_{t,k+1}^{(l+1/2)} \Delta_{k+1} + \sum_{t,k}^{(l+1/2)} \Delta_k} \right) + \hat{D}_{k+1/2}^{(l+1/2)} (\Phi_{0,k+1}^{(l+1/2)} + \Phi_{0,k}^{(l+1/2)}). \quad (6.18)$$

Note que $\hat{D}_{k+1/2}^{(l+1/2)}$ deve ser calculado ao final de cada varredura e que essa quantidade é a correção do fluxo gerado pela equação de transporte e pela Lei de Fick. Na parede esquerda da malha grossa, considerando que $\Phi_{0,1}^{(l+1/2)}$ e $\Phi_{0,K}^{(l+1/2)} \neq 0$, define-se $B_{1/2}^{(l+1/2)}$ por

$$\begin{aligned} 2\Phi_{1,1/2}^+ &= 2 \sum_{\mu_n < 0} |\mu_n| \psi_{n,1/2} w_n = \sum_{n=1}^N (\mu_n + |\mu_n|) \psi_{n,1/2}^{(l+1/2)} w_n \\ &= \Phi_{1,1/2}^{(l+1/2)} + \left(\frac{\sum_{n=1}^N |\mu_n| \psi_{n,1/2}^{(l+1/2)} w_n}{\sum_{n=1}^{(l+1/2)} \Psi_{n,1}^{(l+1/2)} w_n} \right) \Phi_{0,1}^{(l+1/2)} = \Phi_{1,1/2}^{(l+1/2)} + B_{1/2}^{(l+1/2)} \Phi_{0,1}^{(l+1/2)}. \end{aligned} \quad (6.19)$$

Procedendo similarmente na parede direita

$$\begin{aligned} 2\Phi_{1,K+1/2}^+ &= 2 \sum_{\mu_n > 0} \mu_n \psi_{n,M+1/2} w_n = \sum_{n=1}^N (-\mu_n + |\mu_n|) \psi_{n,M+1/2}^{(l+1/2)} w_n \\ &= -\Phi_{1,K+1/2}^{(l+1/2)} + \left(\frac{\sum_{n=1}^N |\mu_n| \psi_{n,M+1/2}^{(l+1/2)} w_n}{\sum_{n=1}^{(l+1/2)} \Psi_{n,K}^{(l+1/2)} w_n} \right) \Phi_{0,K}^{(l+1/2)} \\ &= -\Phi_{1,K+1/2}^{(l+1/2)} + B_{K+1/2}^{(l+1/2)} \Phi_{0,K}^{(l+1/2)}. \end{aligned} \quad (6.20)$$

Assim, deve-se determinar pelo SI a quantidade $\psi^{(l+1/2)}$, com isso definir os parâmetros da malha grossa de forma que a Equação (6.17) é satisfeita para cada célula grossa k . A Equação (6.18) considera $\hat{D}_{k+1/2}^{(l+1/2)}$ no interior da malha grossa e as Equações (6.19) e (6.20) definem $B_{1/2}^{(l+1/2)}$ e $B_{K+1/2}^{(l+1/2)}$.

É possível definir, em termos das expressões anteriores, equações de aceleração para o fluxo escalar no meio das células grossas e para a corrente nas paredes das mesmas.

No método CMFD, $\Phi_{0,k}^{(l+1)}$ e $\Phi_{1,k+1/2}^{(l+1)}$ são definidas como sendo as soluções das seguintes versões alteradas das Equações (6.17),

$$\Phi_{1,k+1/2}^{(l+1)} - \Phi_{1,k-1/2}^{(l+1)} + \Sigma_{a,k}^{(l+1/2)} \Phi_{0,k}^{(l+1)} \Delta_k = Q_k \Delta_k. \quad (6.21)$$

Então, assumindo $\hat{D}_{k+1/2}^{(l+1/2)}$ em cada parede das células interiores da malha grossa, i.e., para $1 \leq k \leq K-1$,

$$\Phi_{1,k+1/2}^{(l+1)} = -\frac{2}{3} \left(\frac{\Phi_{0,k+1}^{(l+1)} - \Phi_{0,k}^{(l+1)}}{\Sigma_{t,k+1}^{(l+1/2)} \Delta_{k+1} + \Sigma_{t,k}^{(l+1/2)} \Delta_k} \right) + \hat{D}_{k+1/2}^{(l+1/2)} (\Phi_{0,k+1}^{(l+1)} + \Phi_{0,k}^{(l+1)}), \quad (6.22)$$

$$2\Phi_{1,1/2}^+ = \Phi_{1,1/2}^{(l+1)} + B_{1/2}^{(l+1/2)} \Phi_{0,1}^{(l+1)}, \quad (6.23)$$

e

$$2\Phi_{1,K+1/2}^+ = -\Phi_{1,K+1/2}^{(l+1)} + B_{K+1/2}^{(l+1/2)} \Phi_{0,K}^{(l+1)}. \quad (6.24)$$

As correntes nas paredes da malha grossa nessas equações, $\Phi_{1,k+1/2}^{(l+1)}$, podem ser determinadas gerando um sistema tridiagonal de K equações para os fluxos escalares nos meios das células da malha grossa, $\Phi_{0,k}^{(l+1)}$, $1 \leq k \leq K$. Depois de encontrar essas quantidades, a aceleração do fluxo escalar na malha fina é dada por

$$\phi_j^{(l+1)} = \phi_j^{(l+1/2)} \left(\frac{\Phi_{0,k}^{(l+1)}}{\Phi_{0,k}^{(l+1/2)}} \right) \quad (6.25)$$

6.1 CMFD: *Coarse-Mesh Finite Difference*

Depois de cada varredura que gera $\psi_{n,j}^{(l+1/2)}$, pela resolução da formulação utilizando as aproximações S_N e *Diamond Difference*, tem-se o problema apresentado nas Equações (6.21) a (6.24). Essas equações aplicadas à malha, levam

a um sistema tridiagonal de equações lineares, de ordem K , o qual pode ser descrito como segue. Para $k = 1$

$$\begin{aligned} & \left[\frac{2}{3} \frac{1}{\sum_{t,2}^{(l+1/2)} \Delta_2 + \sum_{t,1}^{(l+1/2)} \Delta_1} + \hat{D}_{3/2}^{(l+1/2)} + B_{1/2}^{(l+1/2)} + \sum_{a,1}^{(l+1/2)} \Delta_1 \right] \Phi_{0,1}^{(l+1)} \\ & + \left[\hat{D}_{3/2}^{(l+1/2)} - \frac{2}{3} \frac{1}{\sum_{t,2}^{(l+1/2)} \Delta_2 + \sum_{t,1}^{(l+1/2)} \Delta_1} \right] \Phi_{0,2}^{(l+1)} = Q_1 \Delta_1 + 2\Phi_{1,1/2}^+; \end{aligned} \quad (6.26)$$

para $2 \leq k \leq K - 1$,

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{2}{3} \frac{1}{\sum_{t,k}^{(l+1/2)} \Delta_k + \sum_{t,k-1}^{(l+1/2)} \Delta_{k-1}} - \hat{D}_{k-1/2}^{(l+1/2)} \right] \Phi_{0,k-1}^{(l+1)} \\ & + \left[\frac{2}{3} \frac{1}{\sum_{t,k+1}^{(l+1/2)} \Delta_{k+1} + \sum_{t,k}^{(l+1/2)} \Delta_k} + \hat{D}_{k+1/2}^{(l+1/2)} + \sum_{a,k}^{(l+1/2)} \Delta_k + \right. \\ & \quad \left. \frac{2}{3} \frac{1}{\sum_{t,k}^{(l+1/2)} \Delta_k + \sum_{t,k-1}^{(l+1/2)} \Delta_{k-1}} - \hat{D}_{k-1/2}^{(l+1/2)} \right] \Phi_{0,k}^{(l+1)} \\ & + \left[-\frac{2}{3} \frac{1}{\sum_{t,k+1}^{(l+1/2)} \Delta_{k+1} + \sum_{t,k} \Delta_k} + \hat{D}_{k+1/2}^{(l+1/2)} \right] \Phi_{0,k+1}^{(l+1)} = Q_k \Delta_k; \end{aligned} \quad (6.27)$$

e para $k = K$,

$$\begin{aligned} & \left[-\frac{2}{3} \frac{1}{\sum_{t,K}^{(l+1/2)} \Delta_K + \sum_{t,K-1}^{(l+1/2)} \Delta_{K-1}} - \hat{D}_{K-1/2}^{(l+1/2)} \right] \Phi_{0,K-1}^{(l+1)} + \\ & \left[B_{K+1/2}^{(l+1/2)} + \frac{2}{3} \frac{1}{\sum_{t,K}^{(l+1/2)} \Delta_K + \sum_{t,K-1}^{(l+1/2)} \Delta_{K-1}} - \hat{D}_{K-1/2}^{(l+1/2)} + \sum_{a,K}^{(l+1/2)} \Delta_K \right] \Phi_{0,K}^{(l+1)} \\ & = Q_K \Delta_K + 2\Phi_{1,K+1/2}^+ \end{aligned} \quad (6.28)$$

gerando um sistema com o qual completa-se a descrição do método CMFD.

Conclui-se, com isso, a revisão dos métodos iterativos aqui considerados. A seguir, propõe-se um novo método de aceleração para a convergência desses métodos.

7 ESTIMATIVA INICIAL ADO PARA O MÉTODO SI

7.1 Método Analítico de Ordenadas Discretas

O método Analítico de Ordenadas Discretas (*Analytical Discrete Ordinates* (ADO)) foi proposto por Barichello e Siewert [11, 12], inicialmente tratando problemas de transporte unidimensionais. Mais tarde foi generalizado para problemas bidimensionais em trabalhos de Barichello, Cabrera e Prolo Filho [8, 9] assim como na tese de doutorado de Prolo Filho [46]. No presente capítulo introduziremos a formulação particularmente para os problemas abordados neste trabalho, podendo-se encontrar outras aplicações para problemas unidimensionais nos trabalhos de dissertação de Pazinato e Schulz [42, 50] e nas teses de Picoloto, Prolo Filho e Tres, para problemas bidimensionais [44, 46, 51].

Mantendo a formulação apresentada por Barichello [7] começamos definindo a variável óptica

$$\tau = \sigma_t x, \quad (7.1)$$

com $\tau \in [0, \tau_0]$, as seções de choque constantes em cada região e, num primeiro momento, homogêneo. O estudo do problema não homogêneo está na seção 7.1.1, de forma que a equação do transporte pode ser escrita como

$$\mu \frac{\partial \psi}{\partial \tau}(\tau, \mu) + \psi(\tau, \mu) = \frac{c}{2} \sum_{l=0}^P \beta_l P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi(\tau, \mu') d\mu' \quad (7.2)$$

que seria um caso geral da equação (2.1) para a variável óptica τ desconsiderando a fonte, onde $c = \frac{\sigma_{s0}}{\sigma_t}$, P é o grau de anisotropia do problema, no caso deste trabalho $P = 0$ ou $P = 1$, sujeita as mesmas condições de contorno dadas anteriormente nas equações (2.2) e (2.3).

Na equação (7.2) os termos β_l são constantes, que vem da expansão da lei de espalhamento como uma série de polinômios de Legendre, e podem ser definidos de diferentes formas ou até calculados a partir de forma recursiva, para um caso específico [40].

O método ADO inicia-se por reescrever o termo integral da forma

$$\mu \frac{\partial \psi}{\partial \tau}(\tau, \mu) + \psi(\tau, \mu) = \frac{c}{2} \sum_{l=0}^P \beta_l P_l(\mu) \int_0^1 P_l(\mu') [\psi(\tau, \mu') + (-1)^l \psi(\tau, -\mu')] \mu' \quad (7.3)$$

em seguida, discretiza-se a variável angular em ordenadas discretas, ficando com as equações

$$\begin{aligned} & \pm \mu_n \frac{d}{d\tau} \psi(\tau, \pm \mu_n) + \psi(\tau, \pm \mu_n) = \\ & \frac{c}{2} \sum_{l=0}^P \beta_l P_l(\mu_n) \sum_{k=1}^N \omega_k P_l(\mu_k) [\psi(\tau, \pm \mu_k) + (-1)^l \psi(\tau, \mp \mu_k)], \end{aligned} \quad (7.4)$$

onde μ_k e ω_k são os N nós e pesos do esquema de quadratura definido no semi domínio $[0, 1]$.

A equação (7.4) representa um sistema de equações diferenciais de primeira ordem. Supondo, então, soluções da forma

$$\psi(\tau, \pm \mu_n) = Y(\nu, \pm \mu_n) e^{\frac{-\tau}{\nu}}. \quad (7.5)$$

e, substituindo a Equação (7.5) em (7.4) obtém-se a expressão

$$\left(1 \mp \frac{\mu_n}{\nu}\right) Y(\nu, \pm \mu_n) = \frac{c}{2} \sum_{l=0}^P \beta_l P_l(\mu_n) \sum_{k=1}^N \omega_k P_l(\mu_k) [Y(\nu, \pm \mu_k) + (-1)^l Y(\nu, \mp \mu_k)] \quad (7.6)$$

para $n = 1, \dots, N$. Introduzindo a notação matricial, é possível escrever as matrizes como:

$$\mathbf{M} = \text{diag}\{\mu_1, \dots, \mu_N\}; \quad (7.7)$$

$$\mathbf{W} = \text{diag}\{\omega_1, \dots, \omega_N\}. \quad (7.8)$$

Os vetores de dimensão N como

$$\mathbf{Y}_{\pm}(\nu) = (Y(\nu, \pm\mu_1), \dots, Y(\nu, \pm\mu_N))^T \quad (7.9)$$

e

$$\mathbf{\Pi}(l) = (P_l(\mu_1), \dots, P_l(\mu_N))^T \quad (7.10)$$

para reescrever a equação (7.6) na forma

$$\left(\mathbf{I}_N \mp \frac{1}{\nu} \mathbf{M} \right) \mathbf{Y}_{\pm}(\nu) = \frac{c}{2} \sum_{l=0}^P \beta_l \mathbf{\Pi}(l) \mathbf{\Pi}(l)^T \mathbf{W} [\mathbf{Y}_{\pm}(\nu) + (-1)^l \mathbf{Y}_{\mp}(\nu)], \quad (7.11)$$

onde \mathbf{I}_N é a matriz identidade $N \times N$.

Definindo os vetores coluna de dimensão N

$$\mathbf{U} = \mathbf{Y}_+(\nu) + \mathbf{Y}_-(\nu), \quad (7.12)$$

$$\mathbf{V} = \mathbf{Y}_+(\nu) - \mathbf{Y}_-(\nu), \quad (7.13)$$

somando e subtraindo as equações (7.11), tem-se

$$\mathbf{E} \hat{\mathbf{X}} = \frac{1}{\nu} \hat{\mathbf{Y}}, \quad (7.14)$$

e

$$\mathbf{F} \hat{\mathbf{Y}} = \frac{1}{\nu} \hat{\mathbf{X}} \quad (7.15)$$

onde

$$\mathbf{E} = \left(\mathbf{I}_N - \frac{c}{2} \sum_{l=0}^P \beta_l \mathbf{\Pi}(l) \mathbf{\Pi}(l)^T \mathbf{W} [1 + (-1)^l] \right) \mathbf{M}^{-1}, \quad (7.16)$$

$$\mathbf{F} = \left(\mathbf{I}_N - \frac{c}{2} \sum_{l=0}^P \beta_l \mathbf{\Pi}(l) \mathbf{\Pi}(l)^T \mathbf{W} [1 - (-1)^l] \right) \mathbf{M}^{-1}, \quad (7.17)$$

$$\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{M} \mathbf{U} \quad (7.18)$$

e

$$\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{M} \mathbf{V}. \quad (7.19)$$

Assim, chega-se a dois problemas de autovalores

$$(\mathbf{F} \mathbf{E}) \hat{\mathbf{X}} = \lambda \hat{\mathbf{X}}, \quad (7.20)$$

e

$$(\mathbf{E}\mathbf{F})\hat{\mathbf{Y}} = \lambda\hat{\mathbf{Y}}, \quad (7.21)$$

onde $\lambda = \frac{1}{\nu^2}$. Escolhendo uma das duas equações (7.20) ou (7.21) encontra-se os valores de ν para a solução.

Tomando agora a equação (7.14), pode-se escrever

$$\nu\mathbf{E}\hat{\mathbf{X}} = \hat{\mathbf{Y}}. \quad (7.22)$$

e então, somando de ambos os lados $\hat{\mathbf{X}}$ e substituindo (7.18) e (7.19) na equação tem-se

$$\mathbf{\Upsilon}_+(\nu_j) = \frac{1}{2}\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{I}_N + \nu_j\mathbf{E})\mathbf{X}(\nu_j). \quad (7.23)$$

Analogamente tomando a equação (7.22), subtraindo de ambos os lados $\hat{\mathbf{X}}$ e substituindo (7.18) e (7.19) na equação tem-se

$$\mathbf{\Upsilon}_-(\nu_j) = \frac{1}{2}\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{I}_N - \nu_j\mathbf{E})\mathbf{X}(\nu_j). \quad (7.24)$$

Assim, com as soluções do problema de autovalores dados em (7.21) e as soluções elementares encontradas em (7.23) e (7.24) pode-se escrever o vetor solução para a equação (7.3)

$$\mathbf{\Psi}_\pm(\tau) = (\psi(\tau, \pm\mu_1), \dots, \psi(\tau, \pm\mu_N))^T, \quad (7.25)$$

na forma,

$$\mathbf{\Psi}_\pm(\tau) = \sum_{j=1}^N [A_j \mathbf{\Upsilon}_\pm(\nu_j) e^{-\tau/\nu_j} + B_j \mathbf{\Upsilon}_\mp(\nu_j) e^{-(\tau_0 - \tau)/\nu_j}]. \quad (7.26)$$

Expoentes transladados são usado, de maneira a evitar *overflow* na avaliação numérica [11]. E então utilizando as condições de contorno, obtém-se o sistema linear de tamanho $2N$ para determinar as constantes A_j, B_j . A solução final é apresentada na seção 7.1.2.

7.1.1 Solução Particular ($c \neq 1$)

Tomando a equação com fonte dada por

$$\mu \frac{\partial \psi}{\partial \tau}(\tau, \mu) + \psi(\tau, \mu) = \frac{c}{2} \sum_{l=0}^P \beta_l P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi(\tau, \mu') d\mu' + \frac{Q(\tau, \mu)}{2}, \quad (7.27)$$

se a fonte for constante, o que ocorre nos casos estudados neste trabalho, e supondo que a solução particular também seja constante $\psi^P(\tau, \mu_n) = \psi^P$, tem-se que a equação acima torna-se

$$\psi^P = \frac{c}{2} \sum_{l=0}^P \beta_l P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi^P d\mu' + \frac{Q}{2}, \quad (7.28)$$

pela ortogonalidade

$$\int_{-1}^1 P_l(\mu') d\mu' = \int_{-1}^1 P_0(\mu') P_l(\mu') d\mu' = 2\delta_{0,l}. \quad (7.29)$$

Logo,

$$\psi^P = c\beta_0\psi^P + \frac{Q}{2}. \quad (7.30)$$

Como $\beta_0 = 1$ simplifica-se a equação anterior para

$$\psi^P(1 - c) = \frac{Q}{2}. \quad (7.31)$$

Usando que $c = \sigma_{s0}/\sigma_t$ e $\sigma_a = \sigma_t - \sigma_{s0}$

$$\psi^P = \frac{Q}{2\left(\frac{\sigma_t - \sigma_{s0}}{\sigma_t}\right)} \quad (7.32)$$

e assim a solução particular tem a forma

$$\psi^P = \frac{Q\sigma_t}{2\sigma_a}. \quad (7.33)$$

Para problemas com fonte não constante uma solução particular pode ser derivada usando funções de Green [10, 42].

7.1.2 ADO multirregiões

Quando os problemas de interesse são constituídos por mais de um meio material, com diferentes propriedades, se faz necessário respeitar a continuidade do fluxo angular nas fronteiras de cada região. Considerando problemas unidimensionais com nr regiões, onde o domínio pode ser representado como $[0, \tau_0] = \cup_{r=1}^{nr} [\tau_{k-1}, \tau_k]$, onde em cada região os parâmetros são constantes, conforme Figura 7.1.

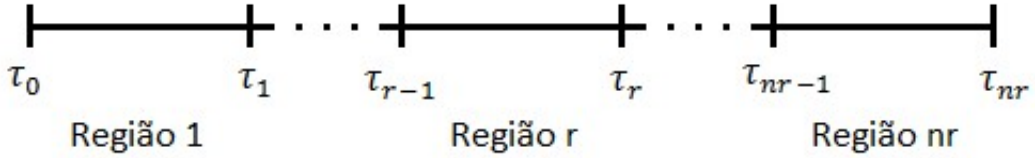


Figura 7.1: Meio Heterogêneo

Nesses problemas a equação do transporte adimensional em cada região pode ser denotada por

$$\mu \frac{\partial \psi_r}{\partial \tau}(\tau, \mu) + \psi_r(\tau, \mu) = \frac{c_r}{2} \sum_{l=0}^P \beta_{lr} P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi_r(\tau, \mu') d\mu' + \frac{Q_r(\tau, \mu)}{2} \quad (7.34)$$

para $r = 1, \dots, nr$. Dessa forma as condições de contorno são definidas na primeira e na última região tal que

$$\psi_1(0, \mu) = F_1(\mu), \quad 0 < \mu \leq 1, \quad (7.35)$$

e

$$\psi_{nr}(\tau_{nr}, -\mu) = F_2(\mu), \quad 0 < \mu \leq 1. \quad (7.36)$$

E as equações de continuidade definidas por

$$\psi_r(\tau_r, \mu) = \psi_{r+1}(\tau_r, \mu) \quad (7.37)$$

onde $r = 1, \dots, nr - 1$ e $\mu \in [-1, 1]$.

Dessa forma a solução formada na seção 7.1 é aplicada em cada região e assim tem-se

$$\Psi_{\mathbf{r}\pm}(\tau) = \sum_{j=1}^N [A_{r,j} \Upsilon_{\mathbf{r}\pm}(\nu_{r,j}) e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\nu_{r,j}} + B_{r,j} \Upsilon_{\mathbf{r}\mp}(\nu_{r,j}) e^{-(\tau_r-\tau)/\nu_{r,j}}] + \psi_r^P(\tau, \mu), \quad (7.38)$$

para $\tau \in [\tau_{r-1}, \tau_r]$, $r = 1, \dots, nr$. Os $\nu_{r,j}$ são as constantes de separação determinadas em cada região e $\Upsilon_{\mathbf{r}\pm}(\nu_{r,j})$ são as autofunções correspondentes.

Com as condições de contorno e de continuidade pode-se determinar o valor de todas as constantes $A_{r,j}$ e $B_{r,j}$ e definir a solução geral.

Como já foi definido anteriormente, o fluxo escalar é dado por (3.4) e a corrente por (3.5). Assim, utilizando a solução encontrada para o fluxo angular, chega-se em

$$\phi(\tau) = \int_{-1}^1 \psi(\tau, \mu) d\mu = \int_{-1}^1 [\psi^H(\tau, \mu) + \psi^P(\tau, \mu)] d\mu. \quad (7.39)$$

No caso da solução particular ser constante tem-se que

$$\phi(\tau) = \int_0^1 [\psi^H(\tau, \mu) + \psi^H(\tau, -\mu)] d\mu + 2\psi^P. \quad (7.40)$$

Assim, a solução para o fluxo escalar é dada por:

$$\phi(\tau) = \sum_{j=1}^N [A_{r,j} e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\nu_{r,j}} + B_{r,j} e^{-(\tau_r-\tau)/\nu_{r,j}}] \Phi_0(\nu_{r,j}) + 2\psi^P, \quad (7.41)$$

onde

$$\Phi_0(\nu_{r,j}) = \sum_{i=1}^N \omega_i [Y(\nu_{r,j}, \mu_i) + Y(\nu_{r,j}, -\mu_i)]. \quad (7.42)$$

Analogamente para a corrente tem-se

$$J(\tau) = \int_{-1}^1 \mu \psi(\tau, \mu) d\mu = \int_{-1}^1 \mu [\psi^H(\tau, \mu) + \psi^P] d\mu \quad (7.43)$$

$$J(\tau) = \int_0^1 \mu [\psi^H(\tau, \mu) - \psi^H(\tau, -\mu)] d\mu. \quad (7.44)$$

Portanto, a corrente gerada pelo ADO é dada por

$$J(\tau) = \sum_{j=1}^N [A_{r,j} e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\nu_{r,j}} - B_{r,j} e^{-(\tau_r-\tau)/\nu_{r,j}}] [Q_+(\nu_{r,j}) - Q_-(\nu_{r,j})] \quad (7.45)$$

onde

$$Q_{\pm}(\nu_{r,j}) = \mathbf{\Pi}(1) \mathbf{W} \mathbf{\Upsilon}_{\pm}(\nu_{r,j}). \quad (7.46)$$

7.1.3 ADO acelerando o processo iterativo de solução da Equação de Transporte

Como o ADO fornece solução analítica na variável espacial, para qualquer N direções discretas da variável angular, uma estratégia aqui proposta é o uso dos resultados obtidos pelo método ADO, como estimativas iniciais para o fluxo escalar no esquema SI. Nesse caso, para reduzir custo computacional, baixas ordens de quadratura, $N = 4$ até $N = 8$, são usadas para gerar tais estimativas. Dessa forma, para a ordem de quadratura denotada N_{ADO} , geram-se os fluxo escalar e a corrente nos pontos discretos da malha espacial usada no SI, e com isso inicializa-se a solução do problema com uma boa aproximação, ao contrário do habitual valor de fluxo igual a zero.

Seguir-se-a com o método SI usual, descrito na seção 3.1, inicializando na equação (3.7) os termos $\phi_j^{(0)}$ e $J_j^{(0)}$ pelos valores gerados pelo ADO. Foi possível reduzir o número de iterações e tempo utilizados pelo SI. Conforme será mostrado no Capítulo 8 de Resultados Numéricos.

8 RESULTADOS NUMÉRICOS: PROBLEMAS UNIDIMENSIONAIS

Neste capítulo alguns problemas unidimensionais selecionados são utilizados na comparação dos resultados obtidos para os diferentes métodos apresentados neste texto: método SI, utilizando varredura com DD como apresentado no Capítulo 3, com as acelerações *Epsilon-k*, DSA, CMFD e a proposta de aceleração utilizando o ADO junto com o SI, denominada ADO+SI. As comparações feitas são em termos do número de iterações (k^*), tempo computacional e o máximo erro relativo (MRE) entre o fluxo escalar gerado pelo SI e por cada esquema de aceleração.

Os resultados foram obtidos através de implementação de programas em FORTRAN 95, usando aritmética de ponto flutuante de dupla precisão, compilados em GNU GFORTRAN 5.4.0. O computador usado tem processador *quad-core* INTEL i7-4510U 2 GHz com 4 MB de memória smartcache e 8 GB DDR3-1600 SDRAM de memória RAM. Os tempos apresentados nas execuções são médias de cinco diferentes vezes que o programa foi rodado, e a função de medição de tempo tem resolução de 1-milissegundo. A solução dos sistemas lineares presentes nas formulações dos métodos DSA, CMFD e ADO+SI foram obtidas utilizando a biblioteca otimizada do LAPACK [5].

Os métodos de discretização espacial Degrau e Degrau Característico, mencionados no Capítulo 1 também foram implementados e utilizados, porém geraram o mesmo número de iterações em todos os problemas e tempos computacionais maiores (Degrau Característico) ou similares (Degrau) aos gerados pelo método DD. Com isso supriu-se as informações que não se mostram superiores às apresentadas neste trabalho.

8.1 Problema Homogêneo

8.1.1 Problema 1

O primeiro teste se refere a uma placa homogênea com comprimento $L = 100$ cm dividida em $M = 2000$ células, com $\sigma_t = 1,0$ cm⁻¹, $\sigma_{s0} = 0,995$ cm⁻¹, $\sigma_{s1} = 0,0$ cm⁻¹, $Q = 0$ cm⁻³ sr⁻¹ s⁻¹ e condições de contorno unitárias e isotrópicas, de acordo com [38].

Usou-se $\epsilon = 10^{-6}$ como critério de parada para os fluxos escalares, como definido em (3.6). Resultados desse experimento podem ser vistos na Tabela 8.1. Como é possível notar a aceleração DSA é executada em menor tempo, e o valor de MRE com 2 ordens de grandeza maior que o esperado comparado a tolerância usada. O método CMDF se mostra um bom concorrente com o método DSA em todos os aspectos; considerou-se dois casos de malhas no método CMFD, utilizando dez células finas para construir uma célula grossa (CMFD-10) e utilizando 20 células finas para cada célula grossa (CMFD-20).

Também percebe-se que o tempo computacional é dependente de N para quase todos os métodos, exceto para o método Epsilon-8. Sustentando o que diz Adams e Larsen [1], vemos que uma iteração SI (varredura) é mais rápida que uma utilizando DSA, dado que ela consiste de menos operações de ponto flutuante; porém como o DSA gera um resultado consistente com um número consideravelmente menor de iterações para todos os testes feitos, observa-se que ele ainda assim gera resultado dentro da tolerância em menor tempo computacional. Também verifica-se que o número de iterações dos métodos SI e DSA está de acordo com a relação apresentada na mesma referência.

Tabela 8.1: Resultados do Problema 1

		SI		DSA			CMFD-10		
N	k^*	Tempo [s]	k^*	Tempo [s]	MRE	k^*	Tempo [s]	MRE	
4	2158	6,94(-1) ¹	9	8,00(-3)	1,87(-4)	14	7,00(-3)	1,87(-4)	
8	2158	1,36(+0)	9	1,10(-2)	1,87(-4)	14	1,30(-2)	1,87(-4)	
16	2158	2,56(+0)	9	1,60(-2)	1,87(-4)	15	3,10(-2)	1,88(-4)	
32	2158	5,03(+0)	9	2,80(-2)	1,88(-4)	15	4,40(-2)	1,88(-4)	
64	2158	9,80(+0)	9	5,80(-2)	1,88(-4)	15	1,00(-1)	1,87(-4)	
128	2158	19,77(+0)	9	1,18(-1)	1,87(-4)	15	1,70(-1)	1,88(-4)	
		SI		Epsilon-8			CMFD-20		
N	k^*	Tempo [s]	k^*	Tempo [s]	MRE	k^*	Tempo [s]	MRE	
4	2158	6,94(-1)	340	1,12(+0)	1,70(-4)	24	1,70(-2)	1,87(-4)	
8	2158	1,36(+0)	345	2,04(+0)	1,80(-4)	22	2,40(-2)	1,87(-4)	
16	2158	2,56(+0)	1133	11,47(+0)	2,17(-4)	22	4,90(-2)	1,88(-4)	
32	2158	5,03(+0)	158	3,11(+0)	1,35(-4)	21	6,00(-2)	1,87(-4)	
64	2158	9,80(+0)	457	17,22(+0)	1,69(-4)	21	1,19(-1)	1,87(-4)	
128	2158	19,77(+0)	614	46,47(+0)	2,54(-4)	21	2,23(-1)	1,87(-4)	

O método Epsilon- k forneceu soluções mais rápidas que o método SI apenas quando $N = 32$, apresentando comportamento oscilatório quanto ao número de iterações, aspecto não desejável; esse comportamento não permite ter segurança considerando que não há como prever quando ele terá melhor resultado, seja com menor número de iterações ou tempo computacional.

Comparando agora a Tabela 8.1, onde o fluxo inicial é considerado nulo, com a Tabela 8.2, onde o fluxo inicial é gerado pelo método ADO, a segunda abordagem também gerou resultados com menor número de iterações e menor tempo computacional para todos os métodos utilizados. A ordem de quadratura usada no método ADO para geração do fluxo escalar foi $N_{\text{ADO}} = 4$ pois comparativamente com outros valores de N , esse foi o melhor desempenho ao observarmos a relação do tempo gasto para gerar o ADO e o ganho por termos um fluxo mais preciso para iniciar o método SI.

¹Utilizou-se nesse trabalho a notação (-1) para representar 10^{-1}

Tabela 8.2: Resultados do Problema 1 inicializando com o fluxo escalar gerado pelo ADO

		SI		DSA			CMFD-10)		
N	k^*	Tempo [s]	k^*	Tempo [s]	MRE	k^*	Tempo [s]	MRE	
4	980	3,25(-1)	6	1,00(-2)	1,76(-4)	9	7,00(-3)	1,76(-4)	
8	853	5,24(-1)	6	7,00(-3)	1,76(-4)	9	9,00(-3)	1,76(-4)	
16	823	9,62(-1)	6	1,30(-2)	1,70(-4)	9	1,80(-2)	1,70(-4)	
32	815	1,88(+0)	6	2,10(-2)	1,69(-4)	9	4,20(-2)	1,69(-4)	
64	813	3,82(+0)	6	3,70(-2)	1,69(-4)	9	5,70(-2)	1,69(-4)	
128	813	7,47(+0)	6	8,50(-2)	1,69(-4)	9	1,15(-1)	1,69(-4)	
		SI		Epsilon-8			CMFD-20		
N	k^*	Tempo [s]	k^*	Tempo [s]	MRE	k^*	Tempo [s]	MRE	
4	980	3,25(-1)	139	4,89(-1)	2,68(-4)	12	6,00(-3)	1,93(-4)	
8	853	5,24(-1)	123	7,43(-1)	2,06(-4)	12	9,00(-3)	1,76(-4)	
16	823	9,62(-1)	127	1,33(+0)	1,57(-4)	11	2,10(-2)	1,69(-4)	
32	815	1,88(+0)	261	5,08(+0)	1,83(-4)	11	4,40(-2)	1,68(-4)	
64	813	3,82(+0)	254	9,77(+0)	2,01(-4)	11	5,90(-2)	1,68(-4)	
128	813	7,47(+0)	174	1,34(+1)	2,12(-4)	11	1,23(-1)	1,68(-4)	

Na Figura 8.1 vê-se a diferença na utilização de diferentes valores de N_{ADO} para ADO+SI no primeiro experimento. Note que para $N_{\text{ADO}} = 4$, $N_{\text{ADO}} = 8$ e $N_{\text{ADO}} = 16$ tem-se menor número de iterações comparado a $N_{\text{ADO}} = 2$, porém entre $N_{\text{ADO}} = 4$, $N_{\text{ADO}} = 8$ e $N_{\text{ADO}} = 16$ não existem diferenças significativas no número de iterações. Já os sistemas resolvidos, por exemplo, para $N_{\text{ADO}} = 8$ terão o dobro do tamanho comparado a $N_{\text{ADO}} = 4$, implicando em maior tempo computacional para obter as suas soluções; isso justifica a escolha por $N_{\text{ADO}} = 4$. Esse mesmo comportamento foi observado nos demais experimentos.

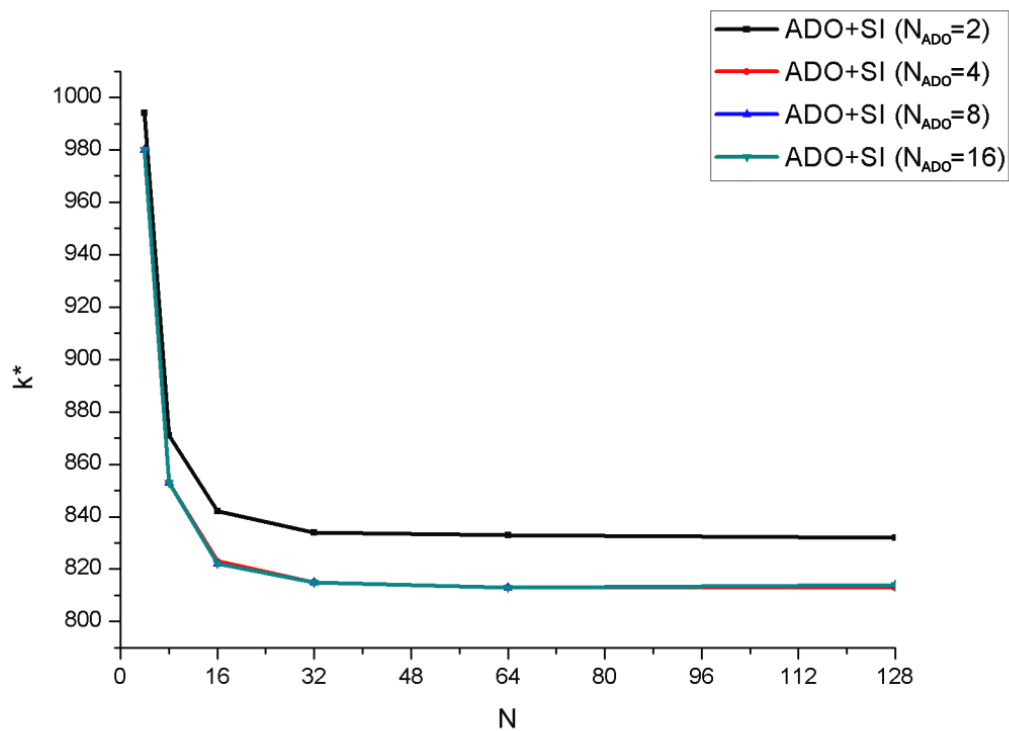


Figura 8.1: Efeito do aumento do valor de N_{ADO} no método ADO+SI.

Também foi analisada a razão entre os tempos computacionais do método SI com e sem aceleração. Como é possível ver na Figura 8.2, percebe-se que o desempenho do método DSA é realmente muito superior aos demais métodos, e que essa diferença se acentua com o aumento do valor de N . Esse comportamento também se observa no método CMFD, apesar de custar maior tempo computacional que o método DSA, para quase todos os valores de N . Observa-se também, que o comportamento do método Epsilon- k , fica negligenciado pela alta melhora gerada pelos demais métodos.

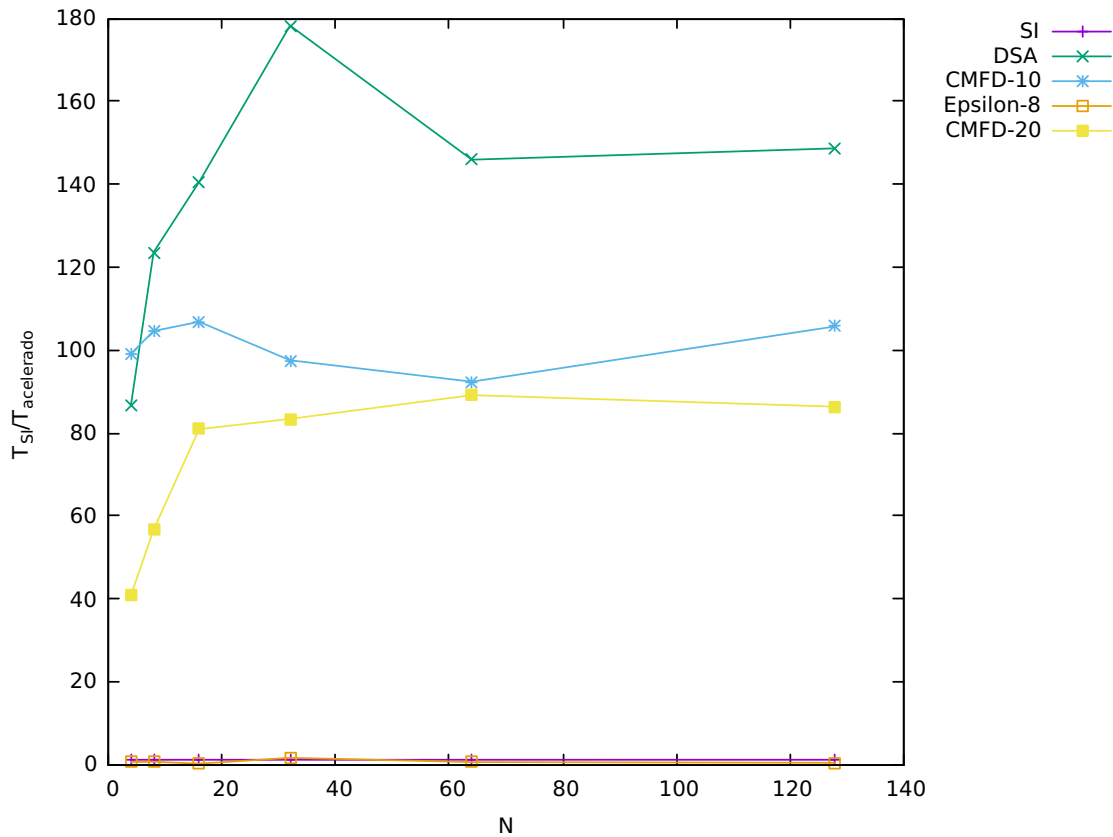


Figura 8.2: Razão do tempo computacional entre o método SI e os esquemas de aceleração DSA, Epsilon- k e CMFD

Na Figura 8.3, os mesmos problemas da figura anterior foram considerados, agora inicializando os métodos pelo fluxo escalar gerado pelo método ADO. Observa-se que o método DSA, seguido pelo método CMFD-10, e CMFD-20, respectivamente, apresentam resultado com menor tempo computacional. Essa melhora é muito significativa, dado apresentar pelo menos 40 vezes menos tempo que o método SI+ADO, para todo $N \geq 4$.

Como o comportamento dos métodos DSA e CMFD com ou sem a inicialização do fluxo inicial pelo método ADO não permite observar o comportamento dos métodos SI e Epsilon- k , separou-se esses métodos em dois gráficos distintos. Assim pode-se observar o comportamento dos demais esquemas de aceleração, uma vez que na figura anterior esse comportamento fica imperceptível devido aos valo-

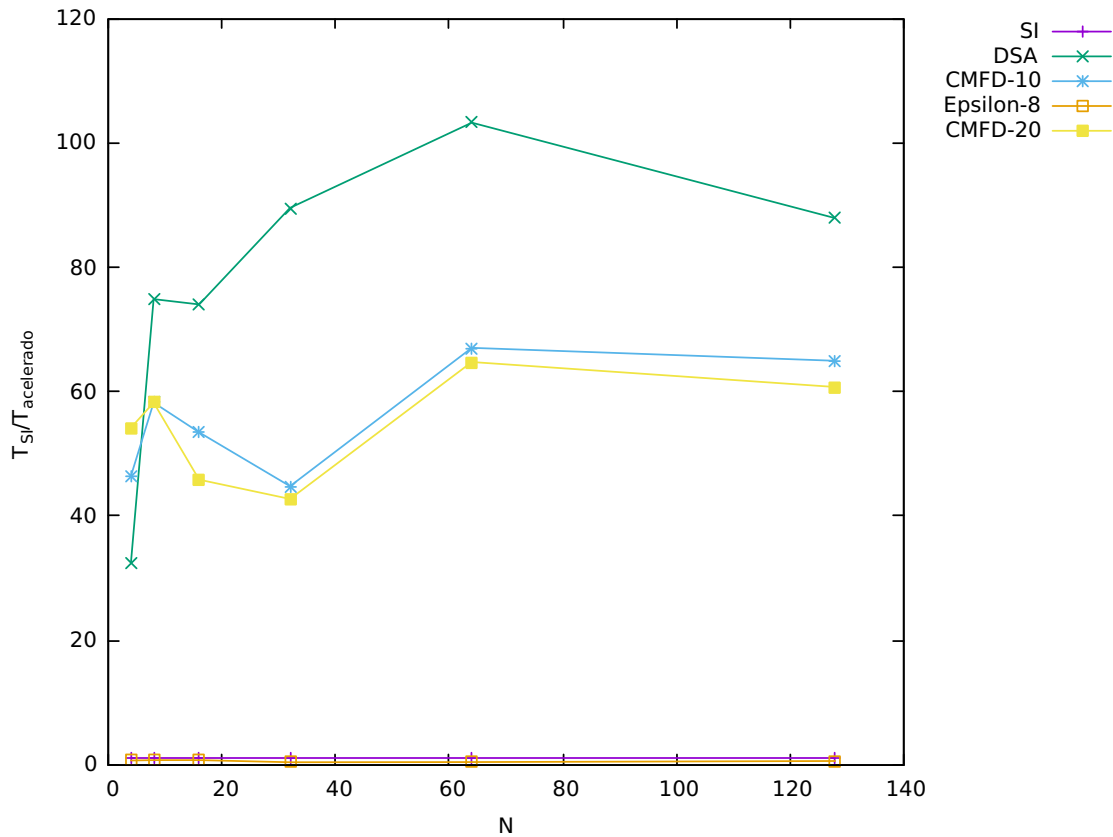


Figura 8.3: Razão do tempo computacional entre o método SI e os esquemas de aceleração DSA, Epsilon e CMFD, tendo os fluxos escalares iniciais em todos os métodos sido gerado pelo método ADO para o Problema 1

res do DSA e do CMFD. Na Figura 8.4, manteve-se os resultados para os métodos SI e Epsilon- k com e sem a utilização do método ADO na inicialização do fluxo. Nesse caso, observa-se que a utilização do método ADO fornece uma redução de no mínimo duas vezes do tempo de execução, considerando o método SI. Considerando o método Epsilon- k , nota-se que há uma oscilação, não havendo aparentemente forma de determinar quando ele será melhor que o SI e quando não será; porém, pode-se observar que com a utilização do método ADO na inicialização, o tempo computacional é sempre melhor que o tempo requerido pelo SI usual.

Observando agora o comportamento dos métodos DSA e CMFD, com e sem a inicialização do método ADO, na Figura 8.5 pode-se ver que a utilização

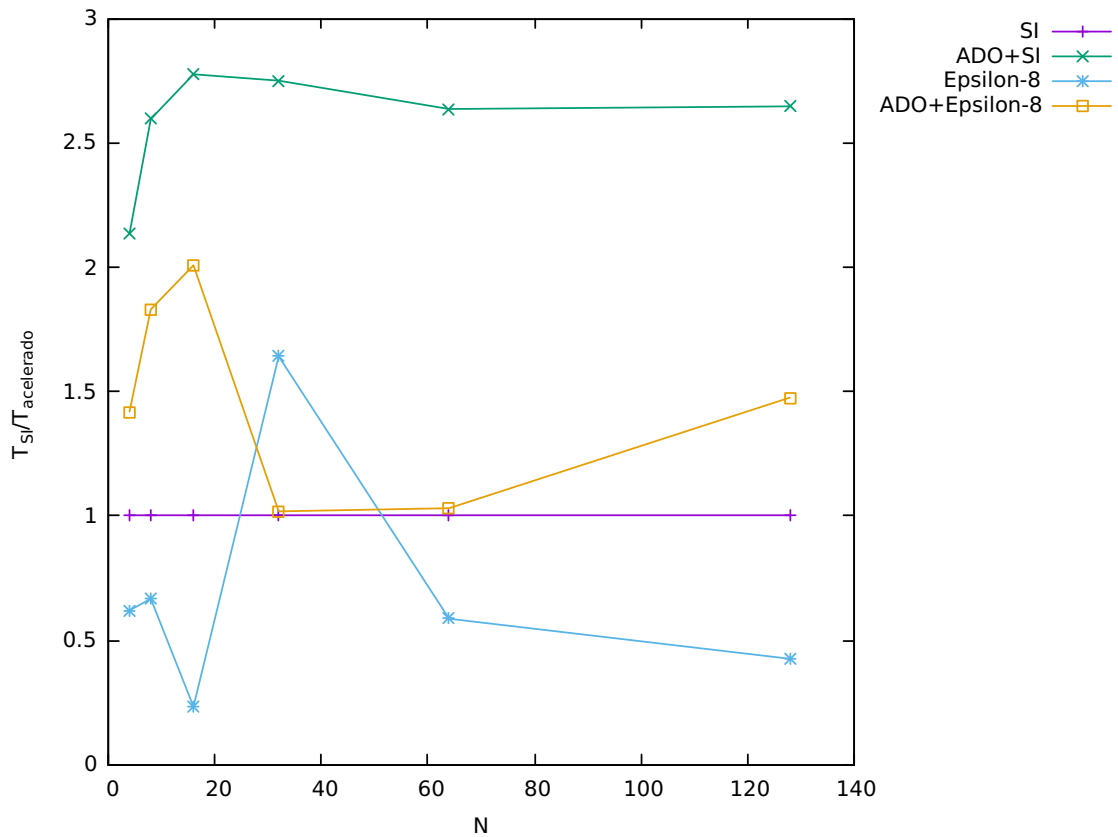


Figura 8.4: Razão do tempo computacional entre o método SI e o esquema de aceleração Epsilon- k , sem e com a inicialização do fluxo escalar inicial gerado pelo método ADO, para o Problema 1

do método ADO se faz eficiente, gerando o resultado com a precisão requerida em menor tempo que os métodos começando com estimativa inicial com fluxo nulo. Para $N = 2$, o método CMFD-10 apresenta melhor tempo computacional, independente da inicialização, mas a partir de $N = 4$ o método DSA se sobressai frente aos demais.

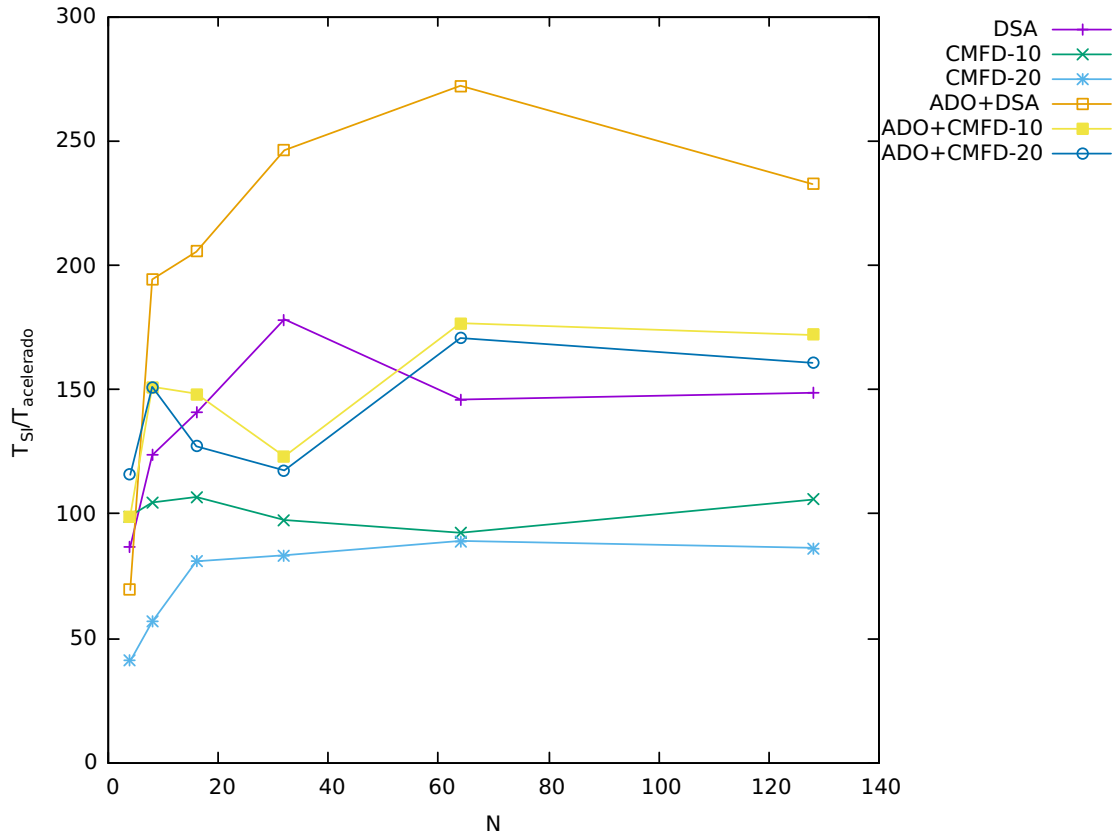


Figura 8.5: Razão do tempo computacional entre o método SI e os esquemas de aceleração DSA e CMFD, sem e com a inicialização do fluxo escalar inicial gerado pelo método ADO

8.2 Problemas Heterogêneos

8.2.1 Problema 2

O segundo teste consiste em uma placa heterogênea com espalhamento linearmente anisotrópico dado em [38]. Esta placa tem espessura $L = 30$ cm dividida em cinco regiões com espessuras, número de células, seções de choque total, de espalhamento e fontes diferentes. As condições de contorno são vácuo, isto é, $F_1(\mu) = F_2(\mu) = 0$ e $\alpha_1 = \alpha_2 = 0$, nos contornos, como dado na Tabela 8.3. Manteve-se o critério de parada em $\epsilon = 10^{-6}$ na Equação (3.6). A Tabela 8.4 mostra os resultados obtidos.

Tabela 8.3: Descrições dos parâmetros usados no Problema 2

Região	Espessura (cm)	M	σ_t (cm^{-1})	σ_{s0} (cm^{-1})	σ_{s1} (cm^{-1})	Q ($\text{cm}^{-3}\text{sr}^{-1}\text{s}^{-1}$)
1	8	800	0,5	0,2	0,1	0
2	5	500	1,2	0,8	0,2	0
3	10	1000	0,9	0,6	0,0	1
4	5	500	0,5	0,2	0,1	0
5	2	200	1,2	0,8	0,2	0

Tabela 8.4: Resultados do Problema 2

		SI		DSA			CMFD-10		
N	k^*	Tempo [s]	k^*	Tempo [s]	MRE	k^*	Tempo [s]	MRE	
4	42	3,70(-2)	13	2,30(-2)	1,56(-6)	13	1,40(-2)	1,51(-6)	
8	42	4,70(-2)	13	2,50(-2)	1,56(-6)	13	1,60(-2)	1,53(-6)	
16	42	1,06(-1)	13	4,10(-2)	1,57(-6)	13	3,30(-2)	1,53(-6)	
32	42	1,55(-1)	13	5,60(-2)	1,57(-6)	13	5,40(-2)	1,53(-6)	
64	42	2,91(-1)	13	1,11(-1)	1,57(-6)	13	1,08(-1)	1,53(-6)	
128	42	6,03(-1)	13	1,93(-1)	1,57(-6)	13	2,04(-1)	1,53(-6)	
		SI		Epsilon-8			CMFD-20		
N	k^*	Tempo [s]	k^*	Tempo [s]	MRE	k^*	Tempo [s]	MRE	
4	42	3,70(-2)	9	3,10(-2)	9,21(-7)	13	1,30(-2)	1,50(-6)	
8	42	4,70(-2)	7	2,90(-2)	1,73(-6)	13	1,60(-2)	1,51(-6)	
16	42	1,06(-1)	7	5,30(-2)	1,97(-6)	13	3,00(-2)	1,51(-6)	
32	42	1,55(-1)	6	8,60(-2)	1,28(-6)	13	5,30(-2)	1,51(-6)	
64	42	2,91(-1)	8	2,26(-1)	1,19(-6)	13	1,02(-1)	1,51(-6)	
128	42	6,03(-1)	10	5,50(-1)	2,02(-6)	13	2,05(-1)	1,51(-6)	

Para esse problema pode-se ver que todos os resultados ficam dentro do MRE considerado, o número de iterações é reduzido em todos os métodos de aceleração, sendo que DSA e CMFD apresentam igual número de iterações para o problema, independentemente do número de direções escolhido. Verifica-se que o tempo está diretamente relacionado com o número de direções, sendo crescente com N .

Para melhor visualização do comportamento dos métodos avaliados pode-se observar a Figura 8.6. Aqui vê-se que a razão da aceleração garante que todas as acelerações foram eficientes; o método Epsilon- k se mostra o menos compe-

titivo, enquanto o DSA e o CMFD variam na liderança do menor tempo computacional em relação ao método SI. Nesse problema, diferentemente do anterior, aumentar o número de células finas que compõem a malha grossa se mostrou vantajoso, como observa-se na aceleração gerada pelo método CMFD utilizando 20 células finas para compor cada célula grossa que foi sempre superior ao mesmo método utilizando 10 células finas, considerando-se o tempo computacional. O método DSA por outro lado se mostrou menos eficiente, quanto a aceleração, para todos os valores de N , exceto quando $N = 128$, comparado ao CMFD. Vê-se que todos os esquemas de aceleração cumprem o seu propósito reduzindo tanto número de iterações como tempo computacional.

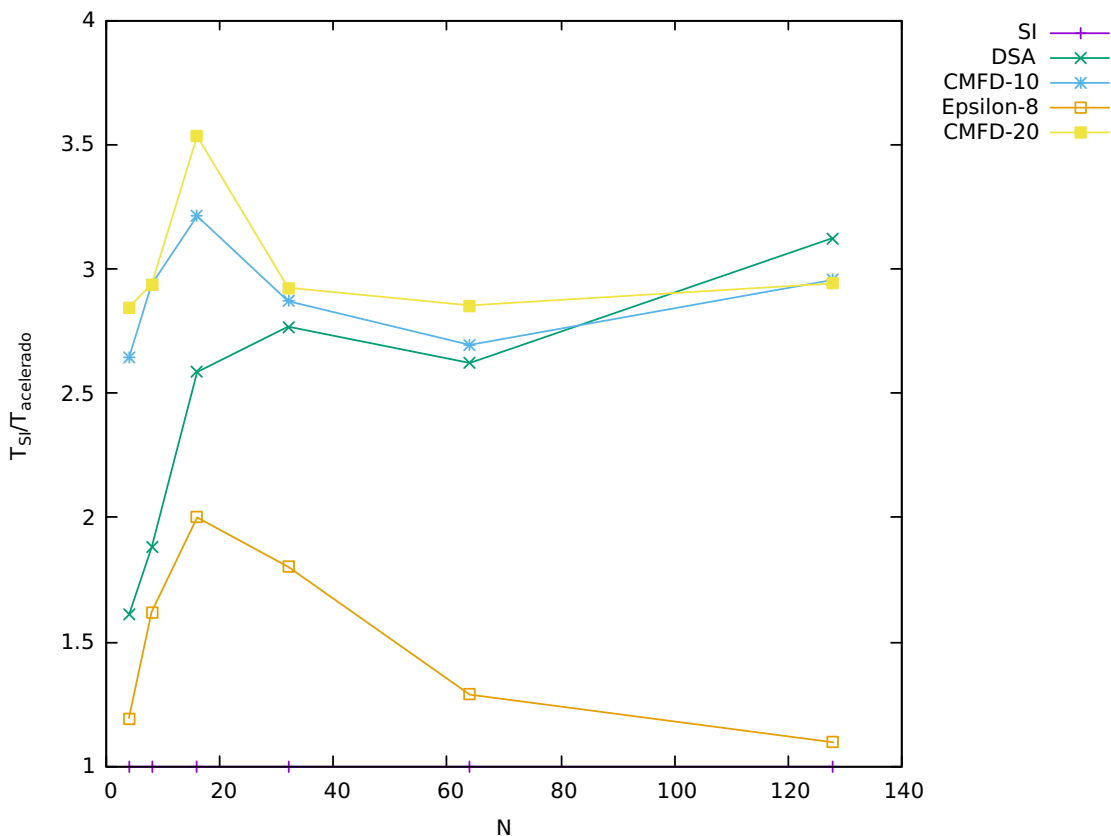


Figura 8.6: Razão do tempo computacional entre o método SI e os esquemas de aceleração DSA, Epsilon- k e CMFD, tendo o fluxo escalar inicial gerado pelo método ADO para o Problema 2

Utilizando o ADO para inicializar o fluxo escalar com $N_{\text{ADO}} = 4$ em todos os métodos estudados, pode-se observar os resultados obtidos na Tabela 8.5; nela percebe-se que há maior redução no número de iterações no SI, mantendo a dependência do tempo no número de direções. Mantém-se o MRE consistente com o critério de parada e todos os métodos se mantêm mais rápidos que o SI, mesmo ele também sendo inicializado pelo método ADO.

Tabela 8.5: Resultados do Problema 2 inicializando com o fluxo escalar gerado pelo ADO

		SI		DSA			CMFD-10		
N	k^*	Tempo [s]	k^*	Tempo [s]	MRE	k^*	Tempo [s]	MRE	
4	34	2,50(-2)	12	2,20(-2)	1,50(-6)	12	1,10(-2)	1,46(-6)	
8	34	4,20(-2)	12	2,90(-2)	1,50(-6)	12	2,20(-2)	1,47(-6)	
16	34	7,90(-2)	12	4,10(-2)	1,50(-6)	12	3,10(-2)	1,47(-6)	
32	34	1,54(-1)	12	5,50(-2)	1,50(-6)	12	5,10(-2)	1,47(-6)	
64	34	2,33(-1)	12	9,30(-2)	1,50(-6)	12	9,50(-2)	1,47(-6)	
128	34	5,34(-1)	12	2,16(-1)	1,50(-6)	12	1,90(-1)	1,47(-6)	
		SI		Epsilon-8			CMFD-20		
N	k^*	Tempo [s]	k^*	Tempo [s]	MRE	k^*	Tempo [s]	MRE	
4	34	2,50(-2)	8	2,70(-2)	1,57(-6)	12	1,30(-2)	1,47(-6)	
8	34	4,20(-2)	7	3,70(-2)	1,51(-6)	12	1,70(-2)	1,47(-6)	
16	34	7,90(-2)	7	5,40(-2)	1,39(-6)	12	2,80(-2)	1,48(-6)	
32	34	1,54(-1)	6	8,40(-2)	1,70(-6)	12	5,10(-2)	1,48(-6)	
64	34	2,33(-1)	7	2,14(-1)	1,52(-6)	12	9,50(-2)	1,48(-6)	
128	34	5,34(-1)	6	3,33(-1)	1,26(-6)	12	1,93(-1)	1,48(-6)	

Analisando o comportamento desse teste graficamente na Figura 8.7, pode-se ver que o método Epsilon- k consegue se manter mais rápido que o método SI para todos os problemas, exceto quando $N = 2$. Nos demais métodos constata-se comportamento similar ao problema sem inicializar o fluxo escalar com o método ADO, o CMFD-20 se sai melhor que o CMFD-10 para quase todos os casos, e os dois assim como o DSA se mantêm bastante competitivos, e relativamente melhores que o SI (até três vezes mais rápidos). Porém não verifica-se uma melhora tão considerável como no primeiro problema estudado.

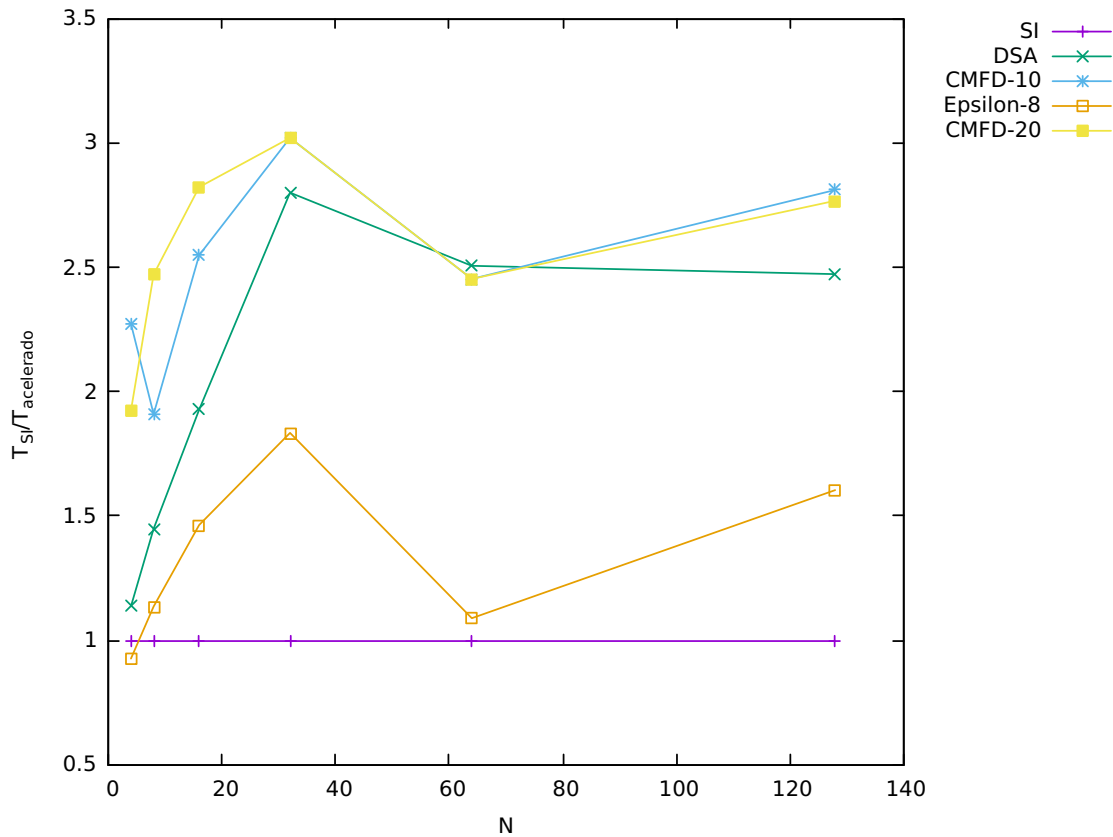


Figura 8.7: Razão do tempo computacional entre o método SI e o esquema de aceleração Epsilon- k , sem e com a inicialização do fluxo escalar inicial gerado pelo método ADO, para o Problema 2

Comparando agora todos os métodos, inicializados, ou não, pelo ADO na Figura 8.8, comparando todos eles com o SI sem utilização do método ADO na inicialização, podemos notar que o método Epsilon- k utilizando o método ADO na inicialização consegue diminuir o tempo para alguns valores de N , mas não para todos. O SI teve uma melhora em todos os casos em que se utilizou a inicialização pelo ADO, mas não muito significativa, chegando a ser no máximo 1,5 vezes mais rápida que sem a inicialização. Os demais métodos tiveram redução do tempo computacional para quase todos os valores de N . Mas, reforçando o que já foi observado a partir dos gráficos anteriores, nesse problema a aceleração não foi tão significativa quanto no problema anterior, de todos os casos observados, nenhum chegou a ser nem quatro vezes mais rápido que o SI com inicialização nula. Mas

também pode-se constatar que mesmo para o maior número de direções, $N = 128$, qualquer um dos métodos é muito rápido.

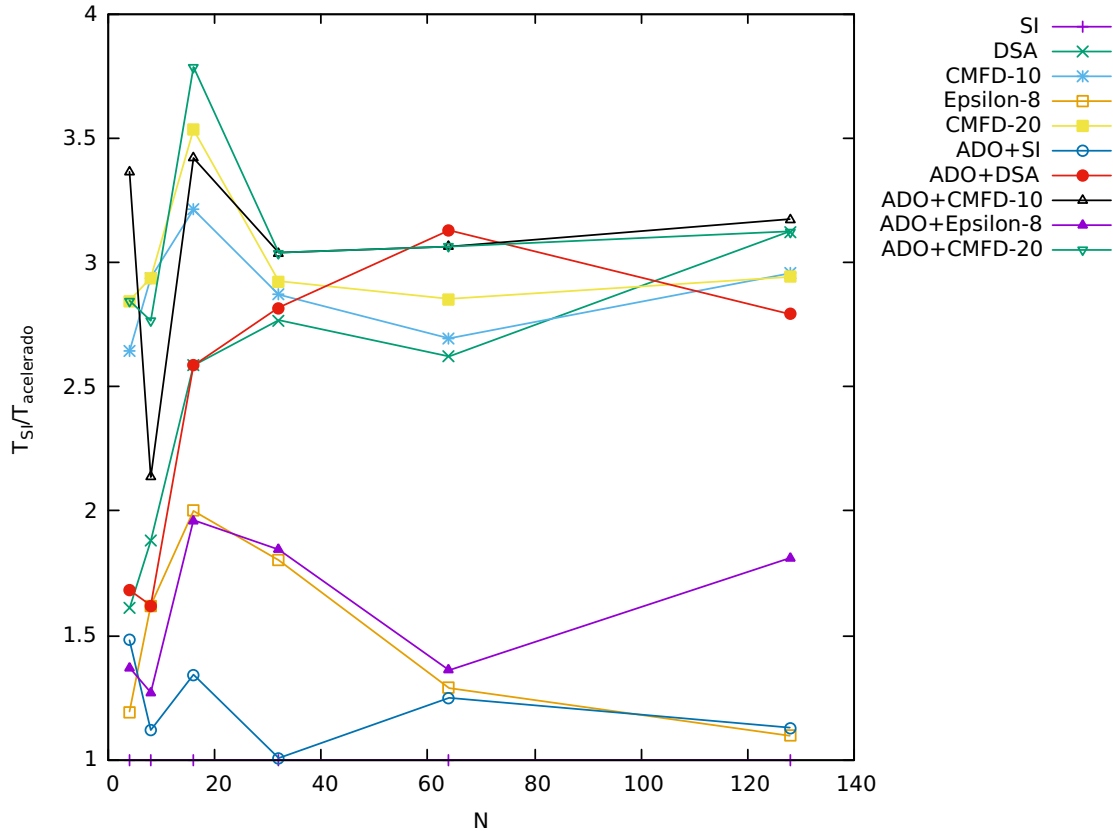


Figura 8.8: Razão do tempo computacional entre o método SI e os esquemas de aceleração Epsilon- k , DSA e CMFD, sem e com a inicialização do fluxo escalar inicial gerado pelo método ADO, para o Problema 2

8.2.2 Problema 3

O terceiro problema consiste em uma placa heterogênea, espalhamento linearmente anisotrópico referida em [43], com comprimento $L = 100$ cm dividida em cinco regiões de comprimentos, número de células, seções de choque total, de espalhamento e fontes diferentes, como apresentada na Tabela 8.6 e com condições de contorno de vácuo. Novamente considerou-se como critério $\epsilon = 10^{-6}$ na Equação (3.6).

Tabela 8.6: Descrição dos parâmetros usados no Problema 3

Região	Comprimento (cm)	M	σ_t (cm^{-1})	σ_{s0} (cm^{-1})	σ_{s1} (cm^{-1})	Q ($\text{cm}^{-3}\text{sr}^{-1}\text{s}^{-1}$)
1	30	1500	1,0	0,97	0,32	0
2	5	250	0,9	0,8	0,267	2
3	22	1100	0,95	0,9	0,3	0
4	3	150	0,8	0,7	0,233	4
5	40	2000	1,0	0,97	0,32	0

Nesse problema notam-se que inicializando o problema com o vetor nulo, consegue-se uma redução tanto no número de iterações quanto no tempo computacional, como pode-se observar na Tabela 8.7. O método DSA segue como o melhor em ambos os aspectos avaliados. Nota-se que o método CMFD tem tempo por iteração menor do que o DSA, isto é, o dobro de iterações do método CMFD não acarreta no dobro de tempo computacional, em relação ao método DSA. Já o método Epsilon- k tem uma excelente redução no número de iterações, mas isso não se reflete no tempo computacional, lembrando que cada iteração Epsilon- k tem 8 iterações SI internas.

Tabela 8.7: Resultados do Problema 3

		SI		DSA			CMFD-10		
N	k^*	Tempo [s]	k^*	Tempo [s]	MRE	k^*	Tempo [s]	MRE	
4	489	4,58(-1)	22	6,50(-2)	2,92(-5)	46	8,50(-2)	2,95(-5)	
8	489	8,15(-1)	22	9,00(-2)	2,94(-5)	42	1,08(-1)	2,97(-5)	
16	489	1,52(+0)	22	1,04(-1)	2,94(-5)	45	1,71(-1)	2,97(-5)	
32	489	2,97(+0)	22	1,62(-1)	2,94(-5)	40	3,11(-1)	3,03(-5)	
64	489	5,75(+0)	22	2,95(-1)	2,94(-5)	42	5,70(-1)	2,99(-5)	
128	489	1,16(+1)	22	6,59(-1)	2,94(-5)	52	1,42(+0)	2,97(-5)	
		SI		Epsilon-8			CMFD-20		
N	k^*	Tempo [s]	k^*	Tempo [s]	MRE	k^*	Tempo [s]	MRE	
4	489	4,58(-1)	9	2,17(-1)	4,26(-5)	34	4,50(-2)	2,99(-5)	
8	489	8,15(-1)	8	2,37(-1)	3,35(-5)	32	6,50(-2)	3,00(-5)	
16	489	1,52(+0)	9	4,60(-1)	2,57(-5)	42	1,57(-1)	3,00(-5)	
32	489	2,97(+0)	9	9,01(-1)	1,80(-5)	33	2,27(-1)	3,00(-5)	
64	489	5,75(+0)	10	1,86(+0)	3,27(-5)	31	4,47(-1)	3,00(-5)	
128	489	1,16(+1)	10	3,61(+0)	3,05(-5)	32	8,45(-1)	3,00(-5)	

Essas considerações podem ser melhor observadas através da Figura 8.9; nela, perceb-se que o método CMFD-20 consegue melhores tempos computacionais para $N = 4$ e $N = 8$, porém, a partir de $N = 16$ o método DSA se mostra superior no tempo computacional; nas iterações ele sempre esteve com valores menores. Observa-se uma oscilação no quanto o método CMFD-20 consegue acelerar o tempo computacional, sem nenhuma justificativa até o momento. Vê-se que o método DSA se mostra o mais eficiente, porém todos os métodos cumprem a proposta de acelerar o resultado gerado pelo SI. Nota-se, ainda, que há uma queda nessa razão de aceleração no último $N = 128$ analisado, para os métodos DSA e CMFD-10. O método Epsilon- k , mostrou uma mínima oscilação de $N = 8$ para $N = 16$, mas se manteve estável no todo. Aqui observa-se que melhores resultados na razão de aceleração, fora atingidos com o método DSA com $N = 64$, chegando a quase 20 vezes mais rápidos do que o SI.

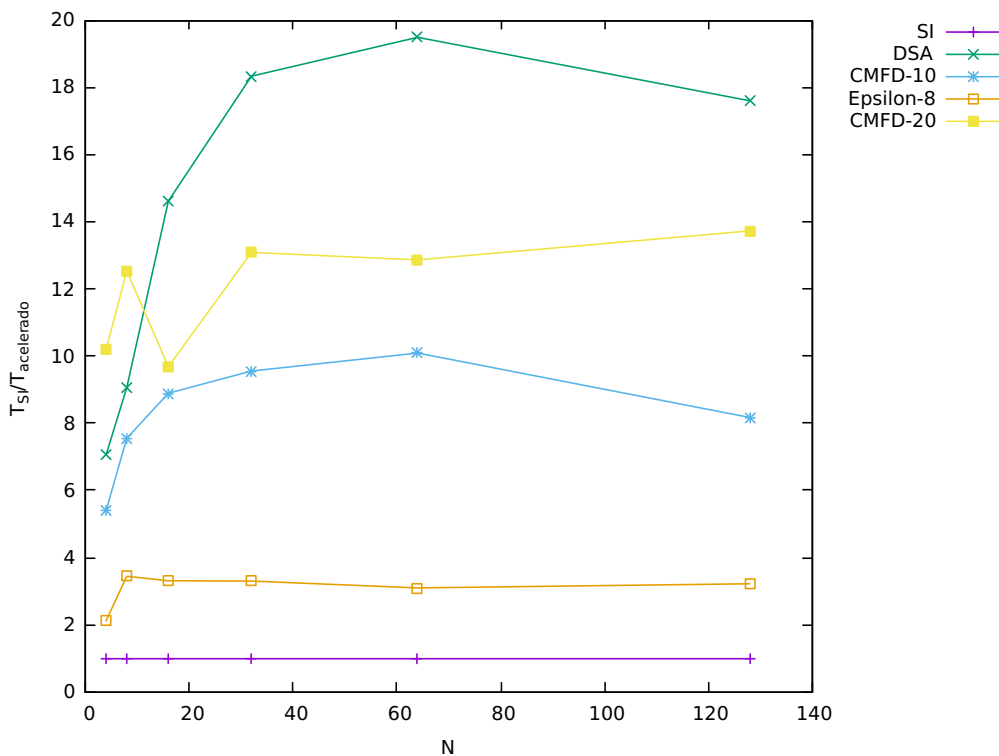


Figura 8.9: Razão do tempo computacional entre o método SI e os esquemas de aceleração DSA, Epsilon- k e CMFD para o Problema 3

Inicializando todos os métodos utilizando o método ADO, é possível analisar os resultados na Tabela 8.8. Observa-se que o comportamento não regular no número de iterações utilizadas por ambos os casos estudados do método CMFD, quando não foi usado o método ADO na inicialização foi melhorado com o introdução dessa aceleração. A redução no número de iterações não foi expressiva, sendo de apenas 2 iterações para o método DSA e de no máximo uma iteração para o método Epsilon- k . O método DSA ainda se manteve com o menor número de iterações comparado ao método CMFD, mas o método CMFD foi mais rápido em alguns casos.

Tabela 8.8: Resultados do Problema 3 inicializando com o fluxo escalar gerado pelo ADO

		SI		DSA			CMFD-10		
N	k^*	Tempo [s]	k^*	Tempo [s]	MRE	k^*	Tempo [s]	MRE	
4	412	3,76(-1)	20	5,40(-2)	2,90(-5)	23	3,70(-2)	2,96(-5)	
8	412	6,99(-1)	20	7,10(-2)	2,87(-5)	23	6,10(-2)	2,94(-5)	
16	412	1,25(+0)	20	9,00(-2)	2,87(-5)	23	8,60(-2)	2,93(-5)	
32	412	2,49(+0)	20	1,84(-1)	2,87(-5)	23	1,71(-1)	2,93(-5)	
64	412	5,08(+0)	20	3,22(-1)	2,87(-5)	23	3,33(-1)	2,93(-5)	
128	412	9,77(+0)	20	5,47(-1)	2,87(-5)	23	6,06(-1)	2,93(-5)	
		SI		Epsilon-8			CMFD-20		
N	k^*	Tempo [s]	k^*	Tempo [s]	MRE	k^*	Tempo [s]	MRE	
4	412	3,76(-1)	8	2,06(-1)	2,64(-5)	22	2,80(-2)	2,94(-5)	
8	412	6,99(-1)	8	2,62(-1)	2,94(-5)	22	4,90(-2)	2,91(-5)	
16	412	1,25(+0)	8	3,94(-1)	2,70(-5)	22	8,40(-2)	2,91(-5)	
32	412	2,49(+0)	8	7,85(-1)	1,67(-5)	22	1,58(-1)	2,91(-5)	
64	412	5,08(+0)	8	1,57(+0)	2,86(-5)	22	3,01(-1)	2,91(-5)	
128	412	9,77(+0)	9	3,20(+0)	2,72(-5)	22	5,87(-1)	2,91(-5)	

Esse comportamento pode ser melhor observado na Figura 8.10. Para esse problema o método se apresentou bastante eficiente quanto a aceleração do resultado, o método CMFD utilizando 10 células finas a cada célula grossa teve maior aceleração para vários valores de N , comparado com o método DSA, perdendo para este apenas para $N = 64$ e $N = 128$. Já o método que utiliza 20 células finas, para cada célula grossa se mostrou o melhor para esse teste para todos os caso, exceto

para $N = 128$, onde o DSA o superou. O método CMFD-20 se manteve superior ao CMFD-10 para todos os casos avaliados. O método Epsilon- k se manteve estável e todos os métodos cumpriram a proposta de reduzir tempo computacional e iterações.

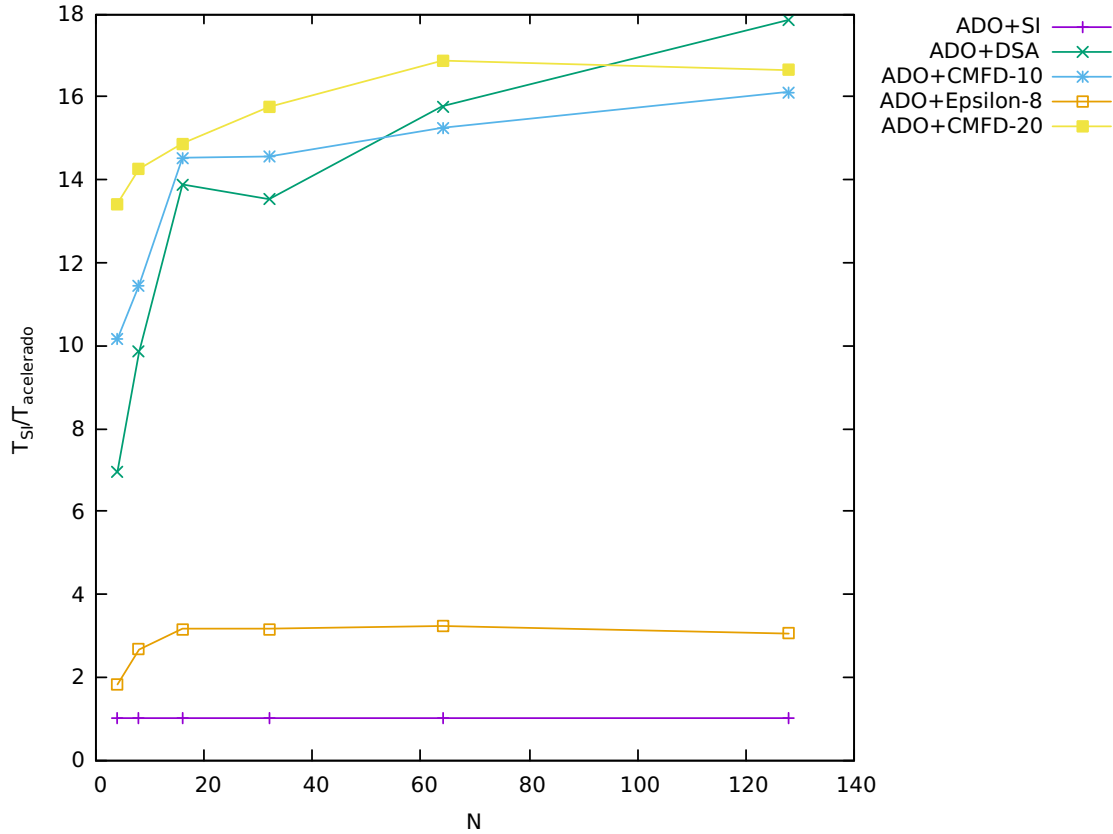


Figura 8.10: Razão do tempo computacional entre o método SI e o esquema de aceleração Epsilon- k , sem e com a inicialização do fluxo escalar inicial gerado pelo método ADO, para o Problema 3

Agora, comparando todos os métodos, inicializados ou não pelo método ADO verifica-se a real melhoria que essa inicialização causa. Vê-se esses resultados na Figura 8.11. Para os métodos SI e Epsilon- k , a melhora no tempo computacional foi menos significativa, e o método ADO gerou melhora em todos os casos, mas nenhum resultado muito melhor que a resolução do problema sem ele. Obteve-se resultados intermediários, de 5 a 15 vezes melhores tempos com a utilização dos métodos CMFD-10 e 20. Além disso, conseguiu-se um desempenho melhor, acelerando em mais de 15 vezes, com os métodos DSA com e sem inicialização pelo

método ADO, e nos métodos CMFD-10 e 20 iniciados com o ADO. O método DSA nem sempre se mostrou mais rápido quando inicializado com o ADO, mas se mostrou o mais rápido para o problema com o maior número de direções. Por outro lado, o método ADO+CMFD-20 mostra-se superior aos demais para quase todos os valores de N nesse experimento.

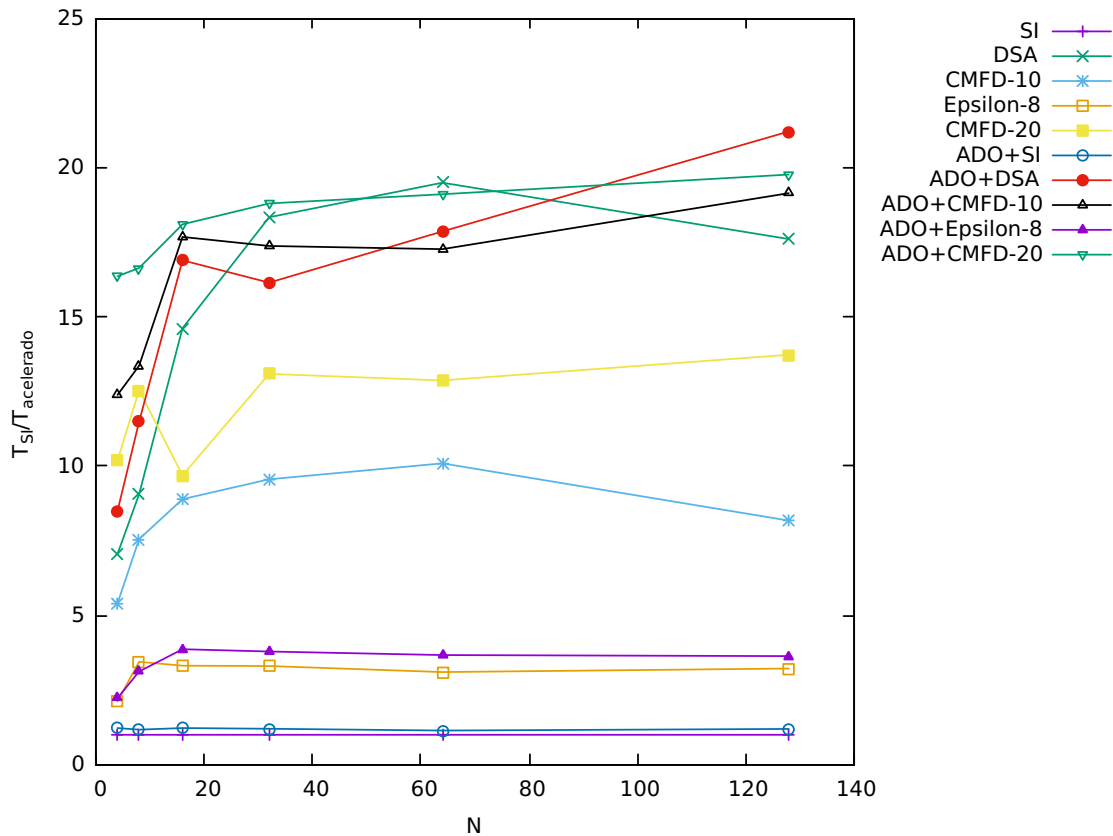


Figura 8.11: Razão do tempo computacional entre o método SI e os esquemas de aceleração Epsilon- k , DSA e CMFD, sem e com a inicialização do fluxo escalar inicial gerado pelo método ADO, para o Problema 3

8.2.3 Problema 4

Finalizando os testes unidimensionais, resolveu-se um último problema teste, estudado inicialmente por Reed [48]. O problema é descrito como sendo uma placa unidimensional composta de quatro regiões representadas pela Figura

8.12, cujos parâmetros são apresentados na Tabela 8.9, com fonte de magnitude 50

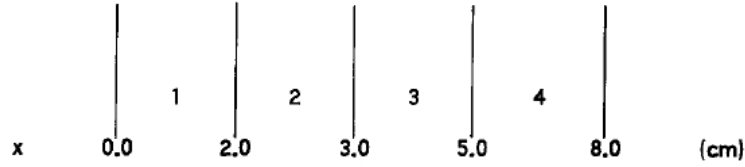


Fig. 1. Geometry for problem 1.

Figura 8.12: Representação do Problema 4 apresentado em [48]

Tabela 8.9: Parâmetros do Problema 4 apresentado em [48]

	Material 1 (cm^{-1})	Material 2 (cm^{-1})	Material 3 (cm^{-1})	Material 4 (cm^{-1})
σ_a	50,0	5,0	0,0	0,1
σ_t	50,0	5,0	0,0	1,0
σ_s	0,0	0,0	0,0	0,9

$\text{cm}^{-3}\text{sr}^{-1}\text{s}^{-1}$ localizada na região ocupada pelo material 1 e fonte de magnitude $1 \text{ cm}^{-3}\text{sr}^{-1}\text{s}^{-1}$ localizada na região $5,0 \text{ cm} < x < 6,0 \text{ cm}$. As condições de contorno são reflexiva à esquerda e vácuo à direita.

Posteriormente o mesmo problema foi estudado por Garcia e Siewert [26], descrito de forma adimensionalizada como $x_0 = 0$, $x_1 = 100$, $x_2 = 105$, $x_3 = 106$, $x_4 = 108$, $c_1 = c_2 = 0$, $c_3 = c_4 = 0,9$, $Q_1 = Q_3 = 1$ e $Q_2 = Q_4 = 0$, onde x é a distância medida em caminho livre médio e c é a razão de espalhamento. Impondo as mesmas condições de contorno do problema original e necessitando garantir as condições de continuidade entre as interfaces dos diferentes materiais, onde se omitiu a análise da região entre $3 \text{ cm} \leq z \leq 5 \text{ cm}$, por ser uma região de vácuo e sem fonte externa. Foi considerado $5 \text{ cm} \leq z \leq 6 \text{ cm}$ como região 3 e $6 \text{ cm} \leq z \leq 8 \text{ cm}$ como região 4, as regiões 1 e 2 são as mesmas do artigo [48].

Combinando as informações apresentadas em ambos os artigos, gerou-se a solução utilizando o processo de varredura com DD e S_N , utilizando 1000 células por centímetro, $\varepsilon = 10^{-6}$, o resultado de referência utilizou o método F_N e foi

gerado no artigo de Garcia & Siewert [26], e os que foram gerados nesse trabalho são apresentados na Tabela 8.10

Tabela 8.10: Fluxos escalares para o Problema 4

x (cm)	F_N	n=8	n=64	n=100	n=128	n=256	n=450
0,0	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
1,0	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000	1,000
1,9	0,9995	0,9995	0,9995	0,9995	0,9995	0,9995	0,9995
1,95	0,9902	0,9902	0,9902	0,9902	0,9902	0,9902	0,9902
1,99	0,8372	0,8389	0,8374	0,8374	0,8374	0,8374	0,8372
2,0	0,5010	0,5010	0,5010	0,5010	0,5010	0,5010	0,5010
2,05	0,2602	0,2654	0,2602	0,2602	0,2602	0,2602	0,2602
2,09	0,1798	0,1788	0,1798	0,1798	0,1798	0,1798	0,1798
2,1	0,1651	0,1636	0,1651	0,1651	0,1651	0,1651	0,1651
2,5	0,03009	0,03003	0,03009	0,03009	0,03009	0,03009	0,03009
2,9	0,3520	0,3454	0,3520	0,3520	0,3420	0,3520	0,3520
2,95	0,5650	0,5716	0,5650	0,5650	0,5750	0,5650	0,5650
2,99	0,9151	0,9530	0,9149	0,9147	0,9548	0,9151	0,9151
3,0	1,106	1,1051	1,1063	1,1063	1,1063	1,1063	1,1063
5,0	1,106	1,1051	1,1063	1,1063	1,1063	1,1063	1,1063
5,1	1,441	1,3959	1,4416	1,4413	1,4413	1,4414	1,4414
5,5	1,941	1,9354	1,9410	1,9410	1,9410	1,9410	1,9410
6,0	1,634	1,6315	1,6339	1,6339	1,6339	1,6339	1,6339
7,0	0,7085	0,7048	0,7085	0,7085	0,7085	0,7085	0,7085
8,0	0,2225	0,2222	0,2225	0,2225	0,2225	0,2225	0,2225

Na região totalmente absorvedora e com fonte, região 1, tem-se boa precisão mesmo para um número pequeno de direções, para as demais regiões conforme o número de direções discretas aumentou conseguiu-se convergência em todos os pontos analisados para o fluxo gerado pelo Método F_N . Esse resultado pode também ser observado na Figura 8.13, que ao ser comparada com a figura apresentada em [26] mostra a variação correta do fluxo em todo o domínio espacial.

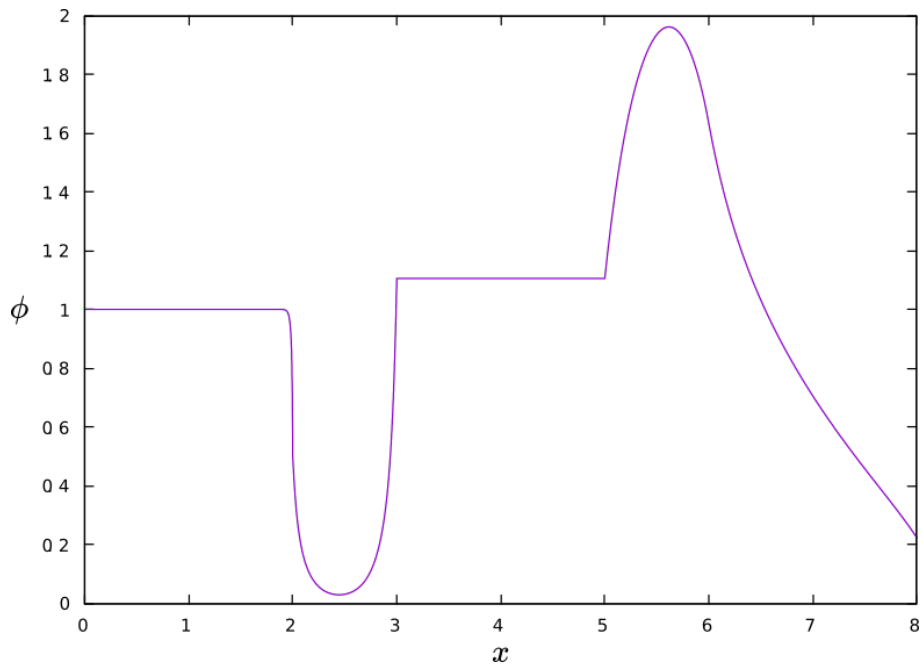


Figura 8.13: Fluxo escalar para o Problema 4

Também é possível observar a redução no número de iterações utilizando alguns métodos de aceleração para a convergência do fluxo escalar, ressalta-se que como sempre os métodos DSA e CMFD mostram-se superiores.

Tabela 8.11: Número de iterações utilizados pelos métodos SI, DSA e CMFD na resolução do Problema 4

SI	DSA	CMFD-10
53	10	10

Para todos os valores de N obteve-se o mesmo número de iterações, diferindo apenas no tempo que cada resultado demora para ser rodado. O problema não foi resolvido utilizando o método ADO como estimativa inicial, em virtude da configuração do problema que exigiria alteração da solução para o caso $c = 0$.

No próximo Capítulo a resolução de alguns problemas bidimensionais será analisada, utilizando esquemas de varredura e a aceleração utilizando o método ADO.

9 MÉTODO DE ITERAÇÃO DE FONTE EM GEOMETRIA BIDIMENSIONAL

Uma generalização do Método de Iteração de Fonte unidimensional apresentado no Capítulo 3, pode ser encontrada em [37]. A ideia principal do método continua, porém agora trabalha-se com a equação bidimensional e com um esquema de quadratura apropriado para esse problema. Diferentes tipos de esquema de quadratura são conhecidos, um estudo dos mesmos foi feito no trabalho de Tres [51]. Nesse momento considerar-se-a a utilização do esquema de quadratura conhecido como Quadratura Simétrica de Nível (*Level Symmetric Quadrature*) [37].

Para problemas bidimensionais e tridimensionais, necessitam-se de duas variáveis angulares para a determinação da direção discreta. Sejam x_1 , x_2 e x_3 os eixos ortogonais coordenados, μ , η e ξ os cossenos diretores de $\hat{\Omega}$ com relação a esses eixos coordenados e considerando também que $\hat{\Omega}$ é unitário:

$$\mu^2 + \eta^2 + \xi^2 = 1 \quad (9.1)$$

Em geometrias tridimensionais $\psi(r, \hat{\Omega})$ deve ser determinado nos oito octantes da esfera unitária. No esquema de Quadratura Simétrica de Nível utiliza-se o mesmo conjunto de $N/2$ valores positivos dos cossenos diretores com respeito a cada um dos três eixos. Como pode-se ver na Figura 9.1, $\mu_1 = \eta_1 = \xi_1$, $\mu_2 = \eta_2 = \xi_2$, $\mu_3 = \eta_3 = \xi_3$ e $\mu_4 = \eta_4 = \xi_4$. Nesse esquema as direções são invariantes para rotações de 90° em qualquer eixo.

Em uma esfera unitária, tem-se, considerando todas as possíveis combinações de μ , η , ξ , $V = N(N + 2)$ direções, sendo N a ordem da quadratura considerada. Assim, o número de direções por octante será $N(N + 2)/8$. Considerando que os pesos são normalizados por octante:

$$\sum_{n=1}^{N(N+2)/8} \omega_n = 1, \quad (9.2)$$

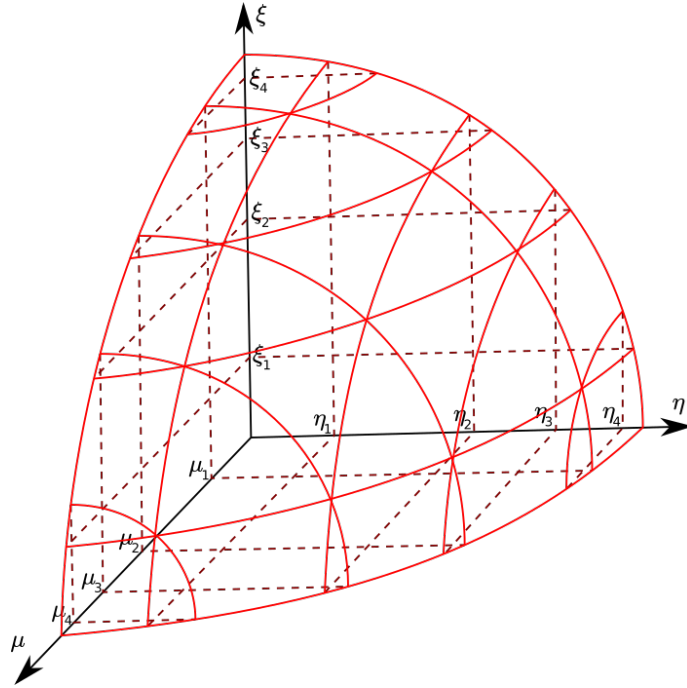


Figura 9.1: Esquema de Quadratura Simétrica de Nível para o conjunto S_8 de ordenadas discretas

onde n corre sobre todas as combinações $\{\mu_i, \eta_j, \xi_k\}$, $i, j, k = 1, \dots, N/2$ no octante para μ, η ou ξ positivo.

Para geometrias bidimensionais, reduzem-se para quatro quadrantes o número de regiões nas quais a dependência angular de $\psi(r, \hat{\Omega})$ deve ser determinada. Assim, projetam-se as direções no plano xy , já que os pontos para $z > 0$ coincidem com os pontos em que $z < 0$. Podemos ver na Figura 9.2 como são consideradas as direções para cada valor de N . Tais valores assim como a distribuição dos pesos são conhecidos da literatura[18, 37] e podem ser vistos na Tabela 9.1 e na Tabela 9.2, respectivamente.

9.1 Varredura Bidimensional

Considerando a equação de transporte bidimensional em estado estacionário, monoenergético [37], utilizando a discretização na variável angular,

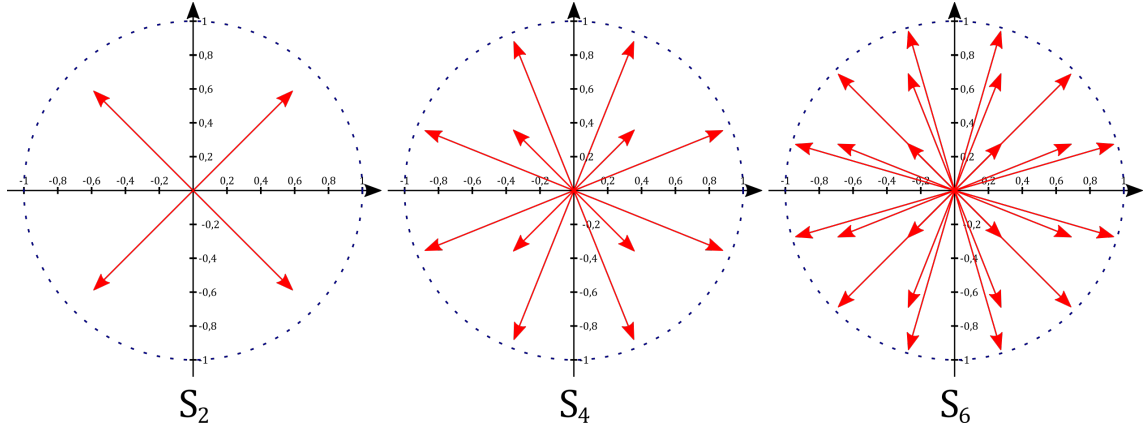


Figura 9.2: Direções para o esquema de Quadratura Simétrica de Nível bidimensional.

$$\Omega_n \cdot \nabla \psi^{(l+1)}(\vec{r}, \Omega_n) + \sigma(\vec{r}) \psi^{(l+1)}(n, \Omega_n) = q^{(l)}(\vec{r}, \Omega_n) \quad (9.3)$$

onde, Ω_n representa a variável angular discretizada e \vec{r} a variável espacial, e q é o termo de fonte composto da fonte de espalhamento e fonte externa. Considerando a geometria bidimensional pode-se reescrever a equação acima como

$$\left[\mu_n \frac{\partial}{\partial x} + \eta_n \frac{\partial}{\partial y} + \sigma(x, y) \right] \psi^{(l+1)}(x, y, \Omega_n) = q^{(l)}(x, y, \Omega_n). \quad (9.4)$$

Discretizando a variável espacial utilizando DD, tem-se

$$\frac{\mu_n}{\delta x_i} (\psi_{n,i+1/2,j}^{(l+1)} - \psi_{n,i-1/2,j}^{(l+1)}) + \frac{\eta_n}{\delta y_j} (\psi_{n,i,j+1/2}^{(l+1)} - \psi_{n,i,j-1/2}^{(l+1)}) + \sigma_{i,j} \psi_{n,i,j}^{(l+1)} = q_{n,i,j}^{(l)} \quad (9.5)$$

com

$$\begin{aligned} \psi_{n,i,j} &= \frac{1}{2} (\psi_{n,i+1/2,j} - \psi_{n,i-1/2,j}) \\ \psi_{n,i,j} &= \frac{1}{2} (\psi_{n,i,j+1/2} - \psi_{n,i,j-1/2}). \end{aligned} \quad (9.6)$$

Nível	n	μ_n	ω_n
S_2	1	0,5773502	1,0000000
S_4	1	0,3500212	0,3333333
	2	0,8688903	
S_6	1	0,2666355	0,1761263
	2	0,6815076	0,1572071
	3	0,9261808	
S_8	1	0,2182179	0,1209877
	2	0,5773503	0,0907407
	3	0,7867958	0,0925926
	4	0,9511897	
S_{12}	1	0,1672126	0,0707626
	2	0,4595476	0,0558811
	3	0,6280191	0,0373377
	4	0,7600210	0,0502819
	5	0,8722706	0,0258513
	6	0,9716377	
S_{16}	1	0,1389568	0,0489872
	2	0,3922893	0,0413296
	3	0,5370966	0,0212326
	4	0,6504264	0,0256207
	5	0,7467506	0,0360486
	6	0,8319966	0,0144589
	7	0,9092855	0,0344958
	8	0,9805009	0,0085179

Tabela 9.1: Direções e pesos utilizados para a Quadratura Simétrica de Nível

Nos casos onde todos os contornos têm o valor de fluxo conhecido, não existem restrições a qual direção deve iniciar a varredura. Para o caso estudado, a varredura é feita a partir dos contornos onde o valor de fluxo é conhecido. Para cada caso, escolhendo a ordem adequada, usa-se as equações que fazem a varredura se deslocar pelo domínio espacial, por exemplo, da esquerda para a direita e de baixo para cima,

Nível	Distribuição dos pesos									
S_2	1									
S_4	1 1									
S_6	1 2 2 1									
S_8	1 2 2 3 2 1									
S_{12}	1 2 2 3 4 3 5 4 3 2 1									
S_{16}	1 2 2 3 5 3 4 6 6 4 4 7 8 7 4 3 6 8 8 6 3 2 5 6 7 6 5 2 1									

Tabela 9.2: Distribuição dos pesos para a Quadratura Simétrica de Nível

$$\begin{aligned}
\psi_{n,i+1/2,j} &= 2\psi_{n,i,j} - \psi_{n,i-1/2,j}, \mu_n > 0 \\
\psi_{n,i-1/2,j} &= 2\psi_{n,i,j} - \psi_{n,i+1/2,j}, \mu_n < 0 \\
\psi_{n,i,j+1/2} &= 2\psi_{n,i,j} - \psi_{n,i,j-1/2}, \eta_n > 0 \\
\psi_{n,i,j-1/2} &= 2\psi_{n,i,j} - \psi_{n,i,j+1/2}, \eta_n < 0.
\end{aligned} \tag{9.7}$$

Com a combinação correta das Equações (9.5)-(9.7) determinaremos o fluxo angular e utiliza-se esses valores para gerar o fluxo escalar no nodo,

$$\phi_{i,j} = \frac{1}{4} \sum_{n=1}^{N(N+2)/2} \omega_n \psi_{n,i,j} \quad (9.8)$$

Com as equações acima e o critério 3.6, tem-se o esquema completo para a varredura bidimensional. As mesmas dificuldades encontradas na varredura unidimensional, como problemas na convergência, continuam existindo para problemas bidimensionais. Assim, resolveu-se estender a utilização do método ADO como gerador da estimativa inicial utilizada para problemas bidimensionais.

Seguindo a formulação apresentada por Tres et al. [52] e em Tres e Picoloto [51, 44], implementou-se o método ADO bidimensional. Assim como no método unidimensional, gerou-se os fluxos escalares em cada ponto da malha espacial utilizada nas varreduras. E assim utilizando um grau menor da quadratura obteve-se a estimativa inicial para o esquema iterativo.

Testes de problemas bidimensionais utilizando apenas o método SI e também iniciando o fluxo com o método ADO, assim como comparações entre eles podem ser vistos no Capítulo 10.

10 RESULTADOS NUMÉRICOS: PROBLEMAS BIDIMENSIONAIS

Neste capítulo, problemas bidimensionais de transporte são abordados utilizando o método SI juntamente com o processo de varredura e aproximação DD descritos no Capítulo 9. A inicialização do processo é feita com a utilização do Método ADO usando $N_{\text{ADO}} = 4$. As comparações feitas são em termos do número de iterações (k^*) entre o fluxo escalar gerado pelo SI com a utilização, ou não, do método ADO na inicialização.

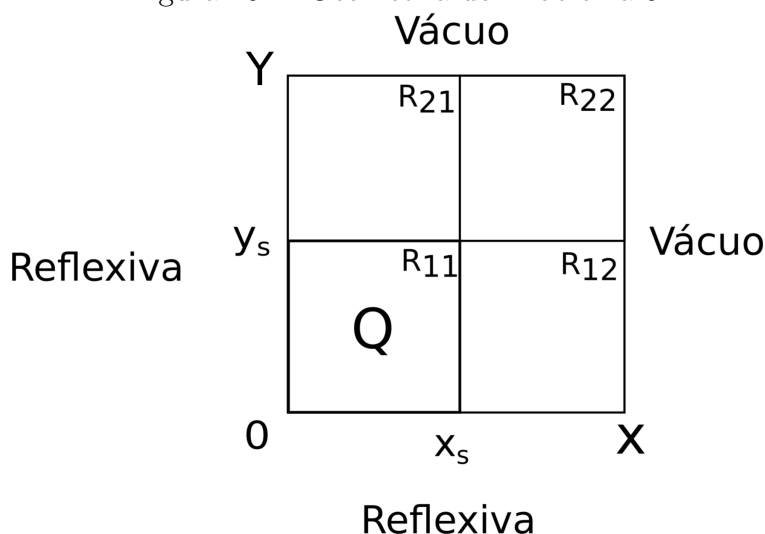
Os resultados numéricos foram obtidos usando o mesmo ambiente computacional descrito no preâmbulo do Capítulo 8.

10.1 Problema 5

O primeiro teste consiste [13] de uma região retangular onde $x = 1$ cm, $y = 1$ cm e fonte unitária Q localizada na região $[0; 0, 5] \times [0; 0, 5]$, usando os parâmetros $\sigma_t = 1 \text{ cm}^{-1}$ e espalhamento isotrópico, escolhendo dois casos para serem analisados, $\sigma_{s0} = 0, 9 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_{s0} = 0, 3 \text{ cm}^{-1}$. O resultado da referência [13] utiliza o método ADO na solução do problema, e os resultados apresentados nesse trabalho foram obtidos pelos métodos SI e a proposta de combinação do método ADO com o método SI. Analisar-se-a o fluxo escalar médio nas regiões R_{11} , R_{12} e R_{22} , como mostra a figura 10.1.

No trabalho de referência, encontram-se disponíveis os fluxos escalares obtidos para três malhas e diferentes ordens na quadratura LQ_N . Reproduziu-se tais resultados utilizando diferentes malhas para o SI e as mesmas direções utilizadas por [13]. Os resultados estão listados na Tabela 10.1.

Figura 10.1: Geometria do Problema 5



Como o SI exige uma malha mais fina subdividiu-se o domínio em um número maior de células como se pode observar na quarta coluna da Tabela 10.1. Percebe-se que com qualquer uma das malhas escolhidas obtém-se resultado próximo ao da malha 8×8 da referência. Além disso, no fluxo gerado pelo SI já está consolidado, dado que existe concordância de pelo menos 4 dígitos significativos entre quaisquer duas malhas escolhidas.

Utilizando o método SI+ADO, consegue-se o mesmo fluxo escalar apresentado, todas as casas apresentadas coincidindo, com o método SI. O número de iterações utilizando apenas SI sendo de 26 em todas as malhas, utilizando o ADO gerado pelo código desenvolvido nessa pesquisa, sem subdividir a malha e considerando $N_{\text{ADO}} = 4$ ou utilizando os dados do artigo de referência, gerou-se a redução para 19 iterações. A utilização do método ADO na inicialização garantiu uma redução de 7 iterações; a subdivisão o domínio espacial não garantiu melhora quando comparado ao ADO sem a divisão espacial.

Avaliando fluxos médios considerando o mesmo problema com $\sigma_{s0} = 0,3$ como constam em [13] e depois resolvendo o mesmo problema utilizando o SI tem-se

Tabela 10.1: Fluxo escalar médio para $\sigma_{s0} = 0,9$

N	ADO-Nodal [13]			SI		
	R_{11}	R_{12}	R_{22}	R_{11}	R_{12}	R_{22}
	2×2			100×100		
2	8,0034(-1)	3,5726(-1)	2,7517(-1)	8,125117(-1)	3,408661(-1)	2,917590(-1)
4	8,8354(-1)	3,8402(-1)	2,4136(-1)	8,713120(-1)	3,716990(-1)	2,375118(-1)
6	8,9235(-1)	3,8464(-1)	2,2963(-1)	8,783303(-1)	3,729059(-1)	2,263291(-1)
8	8,9665(-1)	3,8442(-1)	2,2504(-1)	8,829345(-1)	3,733788(-1)	2,223610(-1)
12	8,9849(-1)	3,8387(-1)	2,2198(-1)	8,855323(-1)	3,735566(-1)	2,196998(-1)
16	8,8903(-1)	3,8361(-1)	2,2098(-1)	8,865966(-1)	3,735996(-1)	2,188726(-1)
	4×4			300×300		
2	8,1000(-1)	3,4465(-1)	2,8849(-1)	8,125234(-1)	3,408599(-1)	2,917517(-1)
4	8,7490(-1)	3,7458(-1)	2,3945(-1)	8,713194(-1)	3,716936(-1)	2,374987(-1)
6	8,8222(-1)	3,7509(-1)	2,2878(-1)	8,783385(-1)	3,729007(-1)	2,263209(-1)
8	8,8685(-1)	3,7494(-1)	2,2471(-1)	8,829431(-1)	3,733738(-1)	2,223544(-1)
12	8,8944(-1)	3,7484(-1)	2,2135(-1)	8,855410(-1)	3,735514(-1)	2,196940(-1)
16	8,9049(-1)	3,7492(-1)	2,2020(-1)	8,866053(-1)	3,735946(-1)	2,188661(-1)
	8×8			600×600		
2	8,1194(-1)	3,4177(-1)	2,9102(-1)	8,125245(-1)	3,408593(-1)	2,917510(-1)
4	8,7227(-1)	3,7217(-1)	2,3833(-1)	8,713201(-1)	3,716931(-1)	2,374975(-1)
6	8,7934(-1)	3,7322(-1)	2,2698(-1)	8,783393(-1)	3,729002(-1)	2,263202(-1)
8	8,8393(-1)	3,7385(-1)	2,2266(-1)	8,829439(-1)	3,733733(-1)	2,223537(-1)
12	8,8656(-1)	3,7386(-1)	2,1978(-1)	8,855419(-1)	3,735509(-1)	2,196934(-1)
16	8,8766(-1)	3,7391(-1)	2,1770(-1)	8,866061(-1)	3,735942(-1)	2,188654(-1)

os dados mostrados na Tabela 10.2. Os resultados gerados pelo método SI+ADO coincidiram em todas as casas com o apresentado pelo método SI.

10.2 Problema 6

No segundo teste tem-se novamente uma região retangular [45] onde $X = 1$ cm, $Y = 1$ cm e fonte unitária Q localizada na região $[0; 0, 5] \times [0; 0, 5]$, usando os parâmetros $\sigma_t = 0,8$ cm⁻¹ e espalhamento linearmente anisotrópico, com $\sigma_{s0} = 0,4$ cm⁻¹ e $\sigma_s = 0,2$ cm⁻¹.

Tabela 10.2: Fluxo escalar médio para $\sigma_{s0} = 0,3$

N	ADO-Nodal [13]			SI		
	R_{11}	R_{12}	R_{22}	R_{11}	R_{12}	R_{22}
	2×2			100×100		
2	4,6278(-1)	1,6852(-1)	1,3119(-1)	4,716663(-1)	1,579325(-1)	1,417116(-1)
4	4,9958(-1)	1,7161(-1)	1,0039(-1)	5,004321(-1)	1,640026(-1)	1,010114(-1)
6	5,0496(-1)	1,7077(-1)	9,1591(-2)	5,053956(-1)	1,637279(-1)	9,221595(-2)
8	5,0779(-1)	1,7004(-1)	8,7875(-2)	5,083773(-1)	1,634987(-1)	8,867984(-2)
12	5,0960(-1)	1,6938(-1)	8,5280(-2)	5,104093(-1)	1,633186(-1)	8,626179(-2)
16	5,1037(-1)	1,6910(-1)	8,4329(-2)	5,112949(-1)	1,632092(-1)	8,542022(-2)
	4×4			300×300		
2	4,6969(-1)	1,6034(-1)	1,3963(-1)	4,716701(-1)	1,579285(-1)	1,417043(-1)
4	5,0014(-1)	1,6595(-1)	1,0143(-1)	5,004353(-1)	1,639991(-1)	1,010024(-1)
6	5,0514(-1)	1,6446(-1)	9,3177(-2)	5,053991(-1)	1,637245(-1)	9,221060(-2)
8	5,0821(-1)	1,6446(-1)	8,9657(-2)	5,083809(-1)	1,634952(-1)	8,867582(-2)
12	5,1034(-1)	1,6413(-1)	8,6746(-2)	5,104130(-1)	1,633149(-1)	8,625847(-2)
16	5,1124(-1)	1,6408(-1)	8,5651(-2)	5,112986(-1)	1,632057(-1)	8,541624(-2)
	8×8			600×600		
2	4,7120(-1)	1,5850(-1)	1,4124(-1)	4,716704(-1)	1,579281(-1)	1,417036(-1)
4	5,0040(-1)	1,6430(-1)	1,0138(-1)	5,004356(-1)	1,639987(-1)	1,010016(-1)
6	5,0537(-1)	1,6367(-1)	9,2501(-2)	5,053994(-1)	1,637241(-1)	9,221011(-2)
8	5,0837(-1)	1,6367(-1)	8,8721(-2)	5,083812(-1)	1,634949(-1)	8,867544(-2)
12	5,1041(-1)	1,6355(-1)	8,6124(-2)	5,104133(-1)	1,633145(-1)	8,625816(-2)
16	5,1130(-1)	1,6345(-1)	8,5345(-2)	5,112990(-1)	1,632053(-1)	8,541587(-2)

Os resultados apresentados na referência [45], que contêm 3 diferentes malhas para 6 diferentes conjuntos de direções discretas e os resultados gerados durante esse trabalho são apresentados na Tabela 10.3. Os resultados desse trabalho foram gerados utilizando os métodos SI e a proposta de combinação do método ADO com o método SI, em ambos os métodos conseguiu-se igualdade de todas as casas apresentadas. Observou-se que o resultado gerado concorda com o resultado da referência, particularmente na malha 8×8 da referência com qualquer das malhas escolhidas por nós.

Entre os fluxos e as malhas escolhidas tem-se sempre concordância de no mínimo quatro dígitos significativos. Considerando o número de iterações necessárias para convergência verificou-se 12 iterações para todas as malhas e número de direções

Tabela 10.3: Fluxo escalar médio para o Problema 6
ADO-Nodal [45]

N	ADO-Nodal [45]			SI		
	R_{11}	R_{12}	R_{22}	R_{11}	R_{12}	R_{22}
	2×2			100×100		
2	4,9650(-1)	2,1279(-1)	1,8870(-1)	5,099932(-1)	2,004442(-1)	2,027974(-1)
4	5,5672(-1)	2,2504(-1)	1,5267(-1)	5,595135(-1)	2,151237(-1)	1,516645(-1)
6	5,6556(-1)	2,2520(-1)	1,3987(-1)	5,669723(-1)	2,158027(-1)	1,388570(-1)
8	5,7016(-1)	2,2478(-1)	1,3423(-1)	5,714879(-1)	2,159617(-1)	1,336278(-1)
12	5,7286(-1)	2,2410(-1)	1,3007(-1)	5,743626(-1)	2,159191(-1)	1,297711(-1)
16	5,7388(-1)	2,2374(-1)	1,2855(-1)	5,755632(-1)	2,158122(-1)	1,284057(-1)
	4×4			300×300		
2	5,0686(-1)	2,0327(-1)	1,9989(-1)	5,099987(-1)	2,004407(-1)	2,027920(-1)
4	5,5862(-1)	2,1785(-1)	1,5226(-1)	5,595177(-1)	2,151204(-1)	1,516536(-1)
6	5,6623(-1)	2,1788(-1)	1,4031(-1)	5,669767(-1)	2,157994(-1)	1,388504(-1)
8	5,7091(-1)	2,1740(-1)	1,3522(-1)	5,714924(-1)	2,159584(-1)	1,336230(-1)
12	5,7397(-1)	2,1704(-1)	1,3073(-1)	5,743672(-1)	2,159154(-1)	1,297674(-1)
16	5,7522(-1)	2,1697(-1)	1,2896(-1)	5,755678(-1)	2,158087(-1)	1,284013(-1)
	8×8			600×600		
2	5,0924(-1)	2,0112(-1)	2,0213(-1)	5,099992(-1)	2,004403(-1)	2,027915(-1)
4	5,5933(-1)	2,1556(-1)	1,5221(-1)	5,595181(-1)	2,151201(-1)	1,516525(-1)
6	5,6684(-1)	2,1609(-1)	1,3934(-1)	5,669771(-1)	2,157991(-1)	1,388498(-1)
8	5,7139(-1)	2,1621(-1)	1,3375(-1)	5,714928(-1)	2,159581(-1)	1,336225(-1)
12	5,7429(-1)	2,1625(-1)	1,2951(-1)	5,743676(-1)	2,159151(-1)	1,297671(-1)
16	5,7551(-1)	2,1615(-1)	1,2832(-1)	5,755682(-1)	2,158084(-1)	1,284009(-1)

consideradas. O método de inicialização do SI utilizando o método ADO gerando o mesmo fluxo apresentado na Tabela 10.3 e reduzindo em 1 iteração para todos os casos apresentados. Utilizando os resultados apresentados no artigo de referência [45] para malha 8×8 e $N = 16$, não obteve-se nenhuma redução comparado a gerar o ADO sem divisão espacial para iniciar SI e o fluxo continuou coincidindo em todas as casas apresentadas.

10.3 Problema 7

Como terceiro teste considerou-se uma região retangular [13] onde $X = 10$ cm, $Y = 10$ cm e fonte unitária Q localizada na região $[0; 5] \times [0; 5]$, usando

os parâmetros $\sigma_t = 1,0 \text{ cm}^{-1}$ e espalhamento isotrópico $\sigma_{s0} = 0,5 \text{ cm}^{-1}$ na região da fonte, e nas demais regiões $\sigma_t = 2,0 \text{ cm}^{-1}$ e espalhamento isotrópico $\sigma_{s0} = 0,1 \text{ cm}^{-1}$. Os resultados gerados nesse trabalho [13] constam na Tabela 10.4, primeiro tem-se o trabalho gerado pelos autores utilizando o método ADO [13], depois vê-se o resultado gerado pelo método AHOT-N0 [14].

Resolvendo o mesmo problema utilizando o método SI, tem-se os resultados apresentados na tabela 10.4. Conseguiu-se, com o SI gerar resultados mais próximos ao referencial utilizado em [13], principalmente na região R_{22} , onde tem-se uma região mais distante da fonte, portanto mais difícil de modelar. Considera-se o resultado gerado nesse trabalho eficiente desde a malha menos refinada. Observa-se que na região da fonte se mantém constante para todas as malhas, e as diferenças surgem principalmente na região R_{22} , mas ainda assim preserva-se em todos os resultados pelo menos quatro dígitos significativos entre as malhas testadas.

Tabela 10.4: Fluxo escalar médio para Problema 7

Malha	ADO			AHOT-N0		
	20 × 20			320 × 320		
N	R_{11}	R_{12}	R_{22}	R_{11}	R_{12}	R_{22}
2	1,6535(+0)	4,4224(-2)	2,7430(-3)	1,6533(+0)	4,4254(-2)	2,7214(-3)
4	1,6765(+0)	4,1556(-2)	2,0196(-3)	1,6763(+0)	4,1593(-2)	1,9921(-3)
6	1,6803(+0)	4,1105(-2)	1,9182(-3)	1,6801(+0)	4,1142(-2)	1,8906(-3)
8	1,6821(+0)	4,0889(-2)	1,8733(-3)	1,6819(+0)	4,0927(-2)	1,8462(-3)
12	1,6835(+0)	4,0730(-2)	1,8399(-3)	1,6832(+0)	4,0767(-2)	1,8136(-3)
16	1,6840(+0)	4,0663(-2)	1,8259(-3)	1,6838(+0)	4,0700(-2)	1,8003(-3)
SI						
100 × 100			600 × 600			
N	R_{11}	R_{12}	R_{22}	R_{11}	R_{12}	R_{22}
2	1,6533(+0)	4,4252(-2)	2,7214(-3)	1,6533(+0)	4,4252(-2)	2,7214(-3)
4	1,6763(+0)	4,1591(-2)	1,9919(-3)	1,6763(+0)	4,1591(-2)	1,9919(-3)
6	1,6801(+0)	4,1140(-2)	1,8904(-3)	1,6801(+0)	4,1140(-2)	1,8904(-3)
8	1,6820(+0)	4,0925(-2)	1,8460(-3)	1,6820(+0)	4,0925(-2)	1,8460(-3)
12	1,6833(+0)	4,0765(-2)	1,8135(-3)	1,6833(+0)	4,0765(-2)	1,8134(-3)
16	1,6838(+0)	4,0698(-2)	1,8001(-3)	1,6838(+0)	4,0698(-2)	1,8001(-3)

Como a implementação do método ADO desenvolvida durante esse trabalho não comporta as divisões da malha, gerou-se a inicialização a partir dos dados do artigo, usando malha de 20×20 e $n = 16$. O fluxo gerado pelo método ADO+SI foi idêntico em todas as casas apresentadas. O número de iterações para os dois testes estão presentes na Tabela 10.5.

Tabela 10.5: Número de iterações utilizando o método SI e o método ADO+SI para o Problema 7

	N	100×100	200×200	300×300	400×400	500×500	600×600
SI	2	25	24	25	26	26	26
	4	28	29	27	30	28	37
	6	26	28	30	30	32	29
	8	25	27	28	31	30	30
	12	24	25	26	30	30	28
	16	26	28	31	29	28	31
SI+ADO	2	22	21	21	22	22	22
	4	24	25	23	27	24	43
	6	23	24	27	26	28	25
	8	21	23	25	28	26	26
	12	20	22	23	26	27	24
	16	23	24	27	26	24	28

A redução fica entre 3 e 4 iterações, com uma única exceção no caso 600×600 e $N = 4$, onde o fluxo gerado utilizando o ADO na inicialização necessitou de maior número de iterações que o método SI. Como é sabido, o método ADO tem o agravante de ter o tempo aumentado consideravelmente quanto mais subdividimos o domínio, gostaria-se de ter uma melhora com maior significância mesmo com menor número de divisões, o que não tem-se observado nos testes realizados. Discutir-se-a melhor sobre isso no próximo capítulo.

11 CONCLUSÕES

Neste trabalho foram estudados vários métodos para resolver iterativamente e acelerar o resultado para a equação do transporte em problemas unidimensionais e bidimensionais. Esses esquemas de aceleração se tornam necessários conforme a complexidade do problema aumenta, como para razões de espalhamento próximas da unidade, onde a formulação iterativa não acelerada se torna lenta.

Além dos já conhecidos métodos que aceleram o próprio processo iterativo como por exemplo os métodos DSA e CMFD, foi proposto uma forma de alterar a estimativa inicial dada, podendo assim reduzir o número de iterações e o tempo computacional por eliminar as primeiras iterações do processo convencional.

Após os testes apresentados nos capítulos anteriores, para problemas unidimensionais, é perceptível que os esquemas DSA e CMFD certamente geram as melhores acelerações, sendo na maior parte dos testes difícil de escolher qual método apresenta maior aceleração, para os problemas de transporte apresentados nesse trabalho. O esquema Epsilon- k visivelmente necessita de maior estudo para que seu comportamento possa ser entendido, como a oscilação entre a taxa de aceleração e verificar o que ocorre nos casos onde o mesmo não consegue atender a demanda ao qual foi proposto, acelerar a solução do problema.

O esquema proposto, usar o método ADO como gerador de uma estimativa inicial para o esquema iterativo unidimensional, se mostrou eficiente, mantendo-se consistente, sempre reduzindo o número de iterações e, em pelo menos duas vezes, o tempo computacional. É evidenciada a aplicabilidade do método ADO para inicialização do fluxo escalar, seja apenas para o método SI, ou mesmo sendo combinado ADO+SI+aceleração. Além disso, a aceleração aqui proposta pode ser aplicada a qualquer método iterativo para resolver a equação de transporte que necessite de tal

estimativa inicial. O resultado é sempre melhor que quando não se utiliza o método para inicialização, no número de iterações assim como para o tempo computacional.

Sua generalização para problemas bidimensionais também foi eficiente na redução do número de iterações. Foi observado que o aumento da malha usada para resolução do método ADO não garante melhora significativa no número de iterações. Além disso é também conhecido que o aumento de tempo computacional depende do aumento da malha nesse método, ADO, assim um ponto a ser estudado será o tempo computacional para os problemas bidimensionais. Embora é sabido que a ideia é que se possam usar soluções de malhas grossa como estimativa inicial que sempre demandam menor tempo. Resta verificar se a usabilidade se mantém no quesito tempo computacional, assim como se a complexidade da implementação do mesmo equivale a melhoria gerada. Além disso, é necessário que uma análise de classe mais abrangente de problemas possa ser realizada neste contexto.

Referências Bibliográficas

- [1] ADAMS, M. L., AND LARSEN, E. W. Fast iterative methods for discrete-ordinates particle transport calculations. *Progress in Nuclear Energy* 40, 1 (2002), 3 – 159.
- [2] ALCOUFFE, R. E. A stable diffusion synthetic acceleration method for neutron transport iterations. *Transactions of the American Nuclear Society* 23 (1976), 203.
- [3] ALCOUFFE, R. E. The diffusion synthetic acceleration method applied to two-dimensional neutron transport problems. *Transactions of the American Nuclear Society* 27 (1977), 346.
- [4] ANDERSON, D. G. Iterative procedures for nonlinear integral equations. *Assoc. Comput. Mach.* 12, 4 (1965), 547–560.
- [5] ANDERSON, E., BAI, Z., BISCHOF, C., BLACKFORD, L. S., DEMMEL, J., DONGARRA, J. J., DU CROZ, J., HAMMARLING, S., GREENBAUM, A., MCKENNEY, A., AND SORENSEN, D. *LAPACK Users' Guide (Third Ed.)*. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, USA, 1999.
- [6] BADRUZZAMAN, A. Nodal methods in transport theory. *Advances in Nuclear Science and Technology* 21 (1990).
- [7] BARICHELLO, L. Explicit formulations for radiative transfer problems. In *Thermal Measurements and Inverse Techniques* (Boca Raton (FL), 2011), R. Orlande, O. Fudym, D. Maillet, and R. Cotta, Eds., CRC Press, pp. 541–562.

- [8] BARICHELO, L., CABRERA, L., AND FILHO, J. P. An analytical discrete ordinates solution for two dimensional problems based on nodal schemes. *International Nuclear Atlantic Conference* (2009).
- [9] BARICHELO, L., CABRERA, L., AND FILHO, J. P. An analytical approach for a nodal scheme of two-dimensional neutron transport problems. *Annals of Nuclear Energy* 38 (2011), 1310 – 1317.
- [10] BARICHELO, L., GARCIA, R., AND SIEWERT, C. Particular Solutions for the Discrete-Ordinates Method. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* 64 (2000), 219–226.
- [11] BARICHELO, L., AND SIEWERT, C. A discrete-ordinates solution for a non-grey model with complete frequency redistribution. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* 62 (1999), 665–675.
- [12] BARICHELO, L., AND SIEWERT, C. A new version of the discrete-ordinates method. *Proceedings of the 2nd International Conference on Computational Heat and Mass Transfer* (2001), 340–347.
- [13] BARICHELO, L. B., PICOLATO, 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.
- [14] BARICHELO, 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.
- [15] BARROS, R. Curso em teoria do transporte de partículas neutras: Modelagem matemática e computacional. *Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica - UFRGS* (2013).

- [16] BELL, G., AND GLASSTONE, S. *Nuclear Reactor Theory*. Robert E. Krieger Publishing Company, New York, 1979.
- [17] CABRERA, L. C. *Solução Espectral para Modelos Bidimensionais da Equação Linear de Boltzmann*. Doutorado em matemática aplicada, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2009.
- [18] CACUCI, D. G. *Handbook of Nuclear Engineering*. Springer, New York, 2010.
- [19] CERCIGNANI, C. *The Boltzmann Equation and Its Application*. Springer, New York, 1988.
- [20] CHANDRASEKHAR, S. *Radiative Transfer*. Oxford University Press, London, 1950.
- [21] CRIEKINGEN, S. V. A linear algebraic analysis of diffusion synthetic acceleration for three-dimensional transport equations. *SIAM Journal on Numerical Analysis* 45 (2005), 2034–2059.
- [22] DELAHAYE, J. P., AND GERMAIN-BONNE, B. The set of logarithmically convergent sequences cannot be accelerated. *SIAM j. Numer. Anal.* 19 (1982), 840–844.
- [23] EDDY, R. P. The Even-rho and Even-epsilon Algorithms for Accelerating Convergence of a Numerical Sequence. Tech. rep., David W. Taylor Naval Ship Research and Development Center, 12 1981.
- [24] GANAPOL, B. D. *Analytical Benchmarks for Nuclear Engineering Applications*. OECD Publications, Paris & France, 2008.
- [25] GARCIA, R. Métodos para solução da equação de transporte de partículas íntegro-diferencial. *Escola de Verão em Teoria de Transporte de Partículas Neutras, PUC - Porto Alegre - RS* (2002).

- [26] GARCIA, R. D. M., AND SIEWERT, C. E. A multiregion calculation in the theory of neutron diffusion. *Nuclear Science and Engineering* 76, 1 (1980), 53–56.
- [27] GARCÍA-FERNÁNDEZ, C., VELARDE, P., AND COTELO, M. Comparison of acceleration methods in a radiation transport code with adaptive mesh refinement. *IEEE Transactions on Plasma Science* 38 (2010), 2359–2366.
- [28] GELBARD, E. M., AND HAGEMAN, L. A. The synthetic method as applied to the s_n equations. *Nuclear Science and Engineering*, 37 (1969).
- [29] GRAVES-MORRIS, P. R., ROBERTS, D., AND SALAM, A. The epsilon algorithm and related topics. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 122 (2000), 51–80.
- [30] HESTENES, M. R., AND STIEFEL, E. L. Method of Conjugate Gradients for Solving Linear Systems. *Journal of Research National Bureau of Standards* 49 (1952), 435–498.
- [31] KELLEY, B. W., AND LARSEN, E. W. Cmfd acceleration of spatial domain-decomposed neutron transport problems. *International Conference on the Physics of Reactors* (2012).
- [32] KNOLL, D. A., AND PARK, H. Application of the jacobian-free newton-krylov acceleration of transport source iteration in slab geometry. *Nuclear Science and Engineering* 167 (2011), 122–132.
- [33] KOPP, H. J. Synthetic method solution of the transport equation. *Nuclear Science and Engineering* 17 (1963), 65–74.
- [34] LARSEN, E., AND ALCOUFFE, R. *The linear characteristic method for spatially discretizing the discrete ordinates equations in (x,y)-geometry. Advances in mathematical methods for the solution of nuclear engineering problems.* Germany, 1981.

- [35] LARSEN, E. W., AND KELLEY, B. W. Cmfd and coarse-mesh dsa. *International Conference on the Physics of Reactors* (2012).
- [36] LARSEN, E. W., AND KELLEY, B. W. The relationship between the coarse-mesh finite difference and the coarse-mesh diffusion synthetic acceleration methods. *Nuclear Science and Engineering* 178 (2014), 1–15.
- [37] LEWIS, E., AND MILLER, W. *Computational Methods of Neutron Transport*. John Wiley & Sons, New York, 1984.
- [38] MANSUR, R. S., SANTOS, F. P., ALVES FILHO, H., AND BARROS, R. C. Diffusion synthetic methods for computational modeling of one-speed slab-geometry transport problems with linearly anisotropic scattering. *Progress in Nuclear Energy* 73 (2014), 179–187.
- [39] MARTIN, W., DE OLIVEIRA, C., AND PARK, H. Nonlinear acceleration methods for even-parity neutron transport. *International Conference on the Physics of Reactors* (2010).
- [40] MCCORMICK, N. J., AND SANCHEZ, R. Inverse problem transport calculations for anisotropic scattering coefficients. *Journal of Mathematical Physics* 22 (1981), 199–208.
- [41] MODEST, M. F. *Radiative Heat Transfer*. Mc Graw-Hill, New York, 1993.
- [42] PAZINATTO, C. B. *Formulação ADO para o Problema Ajunto de Transporte Unidimensional e Aplicação em um Problema Inverso de Reconstrução de Fonte*. Mestrado em matemática aplicada, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2015.
- [43] PAZINATTO, C. B., BARROS, R. C., AND BARICHELLO, L. B. Analytical adjoint discrete ordinates formulation for monoenergetic slab-geometry source-detector calculations. *Nuclear Energy Science and Tecnology* 10, 2 (2016), 107–122.

- [44] PICOLOTO, C. B. *Formulações Espectronodais em Cálculos Neutrônicos Multidimensionais*. Doutorado em engenharia, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2015.
- [45] PICOLOTO, C. B., DA CUNHA, R. D. AND BARROS, R. C., AND BARICHELLO, L. B. An analytical approach for solving a nodal formulation of two-dimensional fixed-source neutrons transport problems with linearly anisotropic scattering. *Progress in Nuclear Energy* 98 (2017), 193–201.
- [46] PROLO FILHO, J. *Abordagens Espectronodais para Modelos Multidimensionais em Transporte de Partículas*. Doutorado em matemática aplicada, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2011.
- [47] REED, W. H. The effectiveness of acceleration techniques for iterative methods in transport theory. *Nuclear Science and Engineering* 45 (1971), 245–254.
- [48] REED, W. H. New difference schemes for the neutron transport equation. *Nuclear Science and Engineering* 46, 2 (1971), 309–314.
- [49] SANTOS, F. P., FILHO, H. A., AND C. BARROS, R. Coarse-mesh diffusion synthetic acceleration of the scattering source iteration scheme for one-speed slab-geometry discrete ordinates problems. *Proceeding of ICNAAM 1558* (Rhodes, Greece, September 21–27 2013), 2398–2401.
- [50] SCHULZ, D. M. *Métodos Analíticos e Computacionais em Geofísica Nuclear*. Mestrado em matemática aplicada, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2014.
- [51] TRES, A. *Análise de Esquemas de Aproximações Angulares para a Equação de Transporte Bidimensional em Ordenadas Discretas via Formulações Nodais*. Doutorado em matemática aplicada, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2015.

- [52] TRES, A., PICOLOTO, C. B., PROLO FILHO, J. F., DA CUNHA, R. D., AND BARICHELLO, L. B. Explicit formulation of a nodal transport method for discrete ordinates calculations in two-dimensional fixed-source problems. *Kerntechnik* 79 (2014), 155–162.
- [53] WILLERT, J., PARK, H., AND KNOLL, D. A. A comparison of acceleration methods for solving the neutron transport k-eigenvalue problem. *Journal of Computational Physics* 274 (2014), 681–694.
- [54] WILLERT, J., TAITANO, W. T., AND KNOLL, D. Leveraging anderson acceleration for improved convergence of iterative solutions to transport systems. *Journal of Computational Physics* 273 (2014), 122–132.
- [55] WYNN, P. The epsilon algorithm and operational formulas of numerical analysis. *Math. Comp.* 15 (1961), 151–158.

Apêndice A DESENVOLVIMENTO DO MÉTODO DSA

Considerando uma iteração SI escrita como,

$$\mu \frac{\partial \psi^{(l+1/2)}}{\partial x}(x, \mu) + \sigma_t(x) \psi^{(l+1/2)}(x, \mu) = \frac{\sigma_{s0}(x)}{2} \phi^{(l)}(x) + \frac{3}{2} \sigma_{s1}(x) \mu J^{(l)}(x) + \frac{Q(x)}{2}, \quad (\text{A.1})$$

com as condições de contorno

$$\psi^{(l+1/2)}(0, \mu) = F_1(\mu) + \alpha_1 \psi^{(l+1/2)}(0, -\mu), \quad 0 < \mu \leq 1, \quad (\text{A.2})$$

e

$$\psi^{(l+1/2)}(L, \mu) = F_2(\mu) + \alpha_2 \psi^{(l+1/2)}(L, -\mu), \quad -1 \leq \mu < 0. \quad (\text{A.3})$$

Se subtrair-se as equações (A.1), (A.2) e (A.3) das equações (2.1), (2.2) e (2.3), respectivamente, considerando $\alpha_1 = 0$ e $F_2(\mu) = 0$, ou seja, apenas contorno à direita reflexivo, e definindo

$$f(x, \mu) = \psi(x, \mu) - \psi^{(l+1/2)}(x, \mu), \quad (\text{A.4})$$

$$\phi^{(l+1/2)}(x) = \int_{-1}^1 \psi^{(l+1/2)}(x, \mu') d\mu' \quad (\text{A.5})$$

obtém-se

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial f}{\partial x}(x, \mu) + \sigma_t(x) f(x, \mu) - \frac{\sigma_{s0}(x)}{2} \int_{-1}^1 f(x, \mu') d\mu' - \\ \frac{3}{2} \mu \sigma_{s1}(x) \int_{-1}^1 \mu' f(x, \mu') d\mu' = \frac{\sigma_{s0}(x)}{2} [\phi^{(l+1/2)}(x) - \phi^{(l)}(x)] + \\ \frac{3}{2} \mu \sigma_{s1}(x) [J^{(l+1/2)}(x) - J^{(l)}(x)], \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

com

$$f(0, \mu) = 0, \quad 0 < \mu \leq 1, \quad (\text{A.7})$$

e

$$f(L, \mu) = f(L, -\mu), \quad -1 \leq \mu < 0. \quad (\text{A.8})$$

Como esse problema tem a mesma complexidade que o problema de transporte inicial, utiliza-se a aproximação de difusão para resolução do problema em f , ou seja, expande-se a solução da equação (A.6) usando polinômios de Legendre,

$$f(x, \mu) = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(2n+1)}{2} f_n(x) P_n(\mu) \quad (\text{A.9})$$

onde

$$f_n(x) = \int_{-1}^1 f(x, \mu) P_n(\mu) d\mu. \quad (\text{A.10})$$

Considerando o caso particular de polinômios de ordem 1 e substituindo essa aproximação na Equação (A.6), para o caso particular, ou seja, $n = 0$ e $n = 1$, tem-se

$$\begin{aligned} & \mu \frac{d}{dx} \left[\sum_{n=0}^1 \frac{(2n+1)}{2} f_n(x) P_n(\mu) \right] + \sigma_t(x) \sum_{n=0}^1 \frac{(2n+1)}{2} f_n(x) P_n(\mu) - \\ & \quad \frac{\sigma_{s0}(x)}{2} \int_{-1}^1 \sum_{n=0}^1 \frac{(2n+1)}{2} f_n(x) P_n(\mu') d\mu' - \\ & \quad \frac{3}{2} \mu \sigma_{s1}(x) \int_{-1}^1 \mu' \sum_{n=0}^1 \frac{(2n+1)}{2} f_n(x) P_n(\mu') d\mu' \\ & = \frac{\sigma_{s0}(x)}{2} [\phi^{(l+1/2)}(x) - \phi^{(l)}(x)] + \frac{3}{2} \mu \sigma_{s1}(x) [J^{(l+1/2)}(x) - J^{(l)}(x)]. \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Ainda usando a relação de recorrência para os polinômios de Legendre, obtém-se

$$\begin{aligned}
& \sum_{n=0}^1 \frac{d}{dx} f_n(x) [(n+1)P_{n+1}(\mu) + nP_{n-1}(\mu)] + \sigma_t(x) \sum_{n=0}^1 (2n+1) f_n(x) P_n(\mu) - \\
& \quad \frac{\sigma_{s0}(x)}{2} \sum_{n=0}^1 (2n+1) f_n(x) \int_{-1}^1 P_n(\mu') d\mu' - \\
& \quad \frac{3}{2} \mu \sigma_{s1}(x) \sum_{n=0}^1 (2n+1) f_n(x) \int_{-1}^1 \mu' P_n(\mu') d\mu' \\
& = \sigma_{s0}(x) [\phi^{(l+1/2)}(x) - \phi^{(l)}(x)] + 3\mu \sigma_{s1}(x) [J^{(l+1/2)}(x) - J^{(l)}(x)], \quad (\text{A.12})
\end{aligned}$$

Com as equações

$$\sum_{n=0}^1 (2n+1) f_n(x) \int_{-1}^1 P_n(\mu') d\mu' = 2f_0(x), \quad (\text{A.13})$$

$$\sum_{n=0}^1 (2n+1) f_n(x) \int_{-1}^1 \mu' P_n(\mu') d\mu' = 2f_1(x), \quad (\text{A.14})$$

multiplicando a equação anterior por $\frac{2m+1}{2} P_m(\mu)$ e integrando no intervalo de -1 a 1 , em relação a μ , resulta em

$$\begin{aligned}
& \sum_{n=0}^1 \frac{d}{dx} f_n(x) (n+1) \frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 P_m(\mu) P_{n+1}(\mu) d\mu + \\
& \quad \sum_{n=0}^1 \frac{d}{dx} f_n(x) n \frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 P_m(\mu) P_{n-1}(\mu) d\mu + \\
& \quad \sigma_t(x) \sum_{n=0}^1 (2n+1) f_n(x) \frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 P_m(\mu) P_n(\mu) d\mu \\
& \quad - \sigma_{s0}(x) f_0(x) \frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 P_m(\mu) d\mu \\
& \quad - 3\sigma_{s1}(x) f_1(x) \frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 \mu P_m(\mu) d\mu = \\
& \quad \sigma_{s0}(x) [\phi^{(l+1/2)}(x) - \phi^{(l)}(x)] \frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 P_m(\mu) d\mu + \\
& \quad 3\sigma_{s1}(x) [J^{(l+1/2)}(x) - J^{(l)}(x)] \frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 \mu P_m(\mu) d\mu. \quad (\text{A.15})
\end{aligned}$$

Assim, como é conhecida a relação de ortogonalidade dos polinômios de Legendre, pode-se reescrever a Equação (A.15) como

$$\begin{aligned}
& m \frac{d}{dx} f_{m-1}(x) + (m+1) \frac{d}{dx} f_{m+1}(x) + \sigma_t(x)(2m+1)f_m(x) - \\
& \sigma_{s_0}(x)f_0(x) \frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 P_m(\mu) d\mu - 3\sigma_{s_1}(x)f_1(x) \frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 \mu P_m(\mu) d\mu \\
& = \sigma_{s_0}(x)[\phi^{(l+1/2)}(x) - \phi^{(l)}(x)] \frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 P_m(\mu) d\mu + \\
& 3\sigma_{s_1}(x)[J^{(l+1/2)}(x) - J^{(l)}(x)] \frac{2m+1}{2} \int_{-1}^1 \mu P_m(\mu) d\mu. \quad (\text{A.16})
\end{aligned}$$

Agora, tomando-se $m = 0$, $m = 1$ e utilizando a condição de truncamento $\frac{d}{dx} f_2(x) = 0$ tem-se

$$\frac{d}{dx} f_1(x) + \sigma_a(x)f_0(x) = \sigma_{s_0}(x)[\phi^{(l+1/2)}(x) - \phi^{(l)}(x)] \quad (\text{A.17})$$

e

$$\frac{d}{dx} f_0(x) + 3\sigma_{tr}(x)f_1(x) = 3\sigma_{s_1}(x)[J^{(l+1/2)}(x) - J^{(l)}(x)] \quad (\text{A.18})$$

onde $\sigma_a(x) = \sigma_t(x) - \sigma_{s_0}(x)$ e $\sigma_{tr}(x) = \sigma_t(x) - \sigma_{s_1}(x)$.

Para facilitar os cálculos, supõe-se $J^{(l+1/2)}(x) - J^{(l)}(x) = 0$, isolando $f_1(x)$ em (A.18) e substituindo em (A.17), tem-se

$$-\frac{d}{dx} \frac{1}{3\sigma_{tr}(x)} \frac{d}{dx} f_0(x) + \sigma_a(x)f_0(x) = \sigma_s(x)[\phi^{(l+1/2)}(x) - \phi^{(l)}(x)]. \quad (\text{A.19})$$

É fácil ver que

$$f_0(x) = \int_{-1}^1 f(x, \mu) d\mu \quad (\text{A.20})$$

e definindo,

$$\int_{-1}^1 f(x, \mu) d\mu \approx F^{(l+1)}(x) \quad (\text{A.21})$$

em l , tem-se,

$$-\frac{d}{dx} \frac{1}{3\sigma_{tr}(x)} \frac{d}{dx} F^{(l+1)}(x) + \sigma_a(x)F^{(l+1)}(x) = \sigma_s(x)[\phi^{(l+1/2)}(x) - \phi^{(l)}(x)]. \quad (\text{A.22})$$

Utilizando as condições de contorno de Marshak [16], procede-se simi-
larmente ao processo realizado para aproximar a Equação (A.6), multiplica-se a
Equação (A.7) por $P_n(\mu)$ e integra-se no intervalo 0 a 1 em relação a μ

$$\int_0^1 P_n(\mu) f(0, \mu) d\mu = 0. \quad (\text{A.23})$$

As condições de Marshak consideram apenas momentos ímpares de Le-
gendre, assim como foi considerado P_1 para aproximar f toma-se $P_n(\mu) = P_1(\mu) = \mu$
da forma:

$$\int_0^1 \mu \sum_{n=0}^1 \frac{(2n+1)}{2} f_n(0) P_n(\mu) d\mu = 0 \quad (\text{A.24})$$

e

$$\int_0^1 \mu \left[\frac{1}{2} f_0(0) + \frac{3}{2} f_1(0) \mu \right] d\mu = 0. \quad (\text{A.25})$$

Com a Equação (A.23), obtém-se

$$\frac{1}{4} f_0(0) + \frac{1}{2} f_1(0) = 0. \quad (\text{A.26})$$

Como já foi definido

$$f_m(x) = \int_{-1}^1 f(x, \mu) P_m(\mu) d\mu, \quad (\text{A.27})$$

assim,

$$f_1(x) = \int_{-1}^1 f(x, \mu) \mu d\mu \approx J^{(l+1)}(x), \quad (\text{A.28})$$

e, l , logo pode-se escrever (A.27) como

$$F^{(l+1)}(0) + 2J^{(l+1)}(0) = 0, \quad (\text{A.29})$$

e usando a lei de Fick

$$J^{(l+1)}(x) = -\frac{1}{3\sigma_t(x)} \frac{dF^{(l+1)}}{dx}(x) \quad (\text{A.30})$$

tem-se

$$F^{(l+1)}(0) - \frac{2}{3\sigma_t(0)} \frac{dF^{(l+1)}}{dx}(0) = 0. \quad (\text{A.31})$$

Procedendo analogamente para o contorno a direita,

$$\int_0^1 P_n(\mu)[f(X, \mu) - f(X, -\mu)]d\mu = 0 \quad (\text{A.32})$$

$$\int_0^1 \mu \sum_{n=0}^1 \frac{(2n+1)}{2} (f_n(X)P_n(\mu) - f_n(X)P_n(-\mu))d\mu = 0 \quad (\text{A.33})$$

$$\int_0^1 \mu^2 f_1(X)d\mu = 0 \quad (\text{A.34})$$

assim,

$$J^{(l+1)}(X) = 0, \quad (\text{A.35})$$

usando a lei de Fick

$$-\frac{1}{3\sigma_t(X)} \frac{dF^{(l+1)}}{dx}(X) = 0 \quad (\text{A.36})$$

ou ainda

$$\frac{dF^{(l+1)}}{dx}(X) = 0. \quad (\text{A.37})$$

Assim, obtém-se as condições de contorno

$$F^{(l+1)}(0) - \frac{2}{3\sigma_t(0)} \frac{dF^{(l+1)}}{dx}(0) = 0, \quad (\text{A.38})$$

$$\frac{dF^{(l+1)}}{dx}(X) = 0, \quad (\text{A.39})$$

onde

$$F^{(l+1)}(x) \approx \int_{-1}^1 f(x, \mu)d\mu \quad (\text{A.40})$$

em l e com a atualização

$$\phi^{(l+1)}(x) = \phi^{(l+1/2)}(x) + F^{(l+1)}(x), \quad (\text{A.41})$$

onde observa-se que a solução padrão do SI fica acrescida do termo $F^{(l+1)}(x)$, que é referente ao erro iterativo no fluxo escalar.