

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

**Solução espectral para modelos
bidimensionais da equação linear
de Boltzmann**

por

Luciana Chimendes Cabrera

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

Profa. Dra. Liliane Basso Barichello
Orientadora

Porto Alegre, dezembro de 2009.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Cabrera, Luciana Chimendes

Solução espectral para modelos bidimensionais da equação linear de Boltzmann / Luciana Chimendes Cabrera.—Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2009.

115 p.: il.

Tese (doutorado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2009.

Orientadora: Barichello, Liliane Basso

Tese: Matemática Aplicada

Equação de Boltzmann, Problema bidimensional, Métodos Nodais, Método de Ordenadas Discretas

Solução espectral para modelos bidimensionais da equação linear de Boltzmann

por

Luciana Chimendes Cabrera

Tese submetida 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

Doutor em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Teoria de Transporte e Transformadas Integrais

Orientadora: Profa. Dra. Liliane Basso Barichello

Banca examinadora:

Profa. Dra. Eliete Biasotto Hauser
FAMAT/PUCRS

Prof. Dr. Júlio César Clayessem
PPGMATp/UFRGS

Prof. Dr. Roberto D. M. Garcia
IEAv/CTA

Tese apresentada e aprovada em
14 de dezembro de 2009.

Prof. Dr. Waldir Leite Roque
Coordenador

A professora,
Liliane B. Barichello,
cuja orientação, incentivo e exemplo
de vida jamais esquecerei...

AGRADECIMENTO

Ao concluir esse trabalho, imensa é a minha gratidão a todas pessoas que propiciaram que eu chegasse a esse momento.

Assim, de forma muito especial, agradeço a professora Dra. Liliâne Basso Barichello pelo constante incentivo e compreensão que foram imprescindíveis na realização deste trabalho. Sua dedicação e entusiasmo sempre nos impulsiona, reanima e encoraja. Sua ajuda, em palavras e ações, nos encaminha e nos faz superar as dificuldades. Por tudo isso, obrigada professora. E acima de tudo, obrigada pela amizade.

A minha família, também agradeço carinhosamente: vocês são especiais e mostraram-me o valor da união e da solidariedade para superar os desafios.

Aos colegas da pós-graduação agradeço pela convivência amigável e enriquecedora; em especial, agradeço ao João Francisco Prolo Filho, sempre disposto a discutir o trabalho e a comparar os resultados computacionais.

Aos professores, que acompanharam cada etapa da minha formação e que foram deixando gravado sua amizade, um carinhoso obrigado pelas importantes contribuições.

A todos, muito obrigada. Sempre estarei invocando a proteção e bênção de Deus sobre vocês, para que sintam-se recompensados por cada atitude de apoio e colaboração.

INDICE

LISTA DE SÍMBOLOS	viii
LISTA DE TABELAS	ix
LISTA DE FIGURAS	x
RESUMO	xi
ABSTRACT	xii
1 INTRODUÇÃO	1
2 EQUAÇÃO LINEAR DE BOLTZMANN	6
2.1 Equação de transporte de nêutrons bidimensional	6
3 O PROBLEMA BIDIMENSIONAL EM ORDENADAS DISCRETAS	15
3.1 Formulação do problema	15
3.2 Equações em ordenadas discretas	17
3.3 Equações nodais integradas	23
4 FLUXOS NOS CONTORNOS: APROXIMAÇÃO PELO FLUXO INTEGRADO	27
4.1 Aproximação pelo fluxo médio integrado	28
4.2 Solução do problema unidimensional em x pelo método ADO	33
4.2.1 Solução homogênea	34
4.2.2 Solução particular	38
4.2.3 Solução geral do problema unidimensional na variável x	39
4.2.4 Determinação dos coeficientes da solução homogênea	41
4.3 Solução do problema unidimensional em y pelo método ADO	43
4.3.1 Solução homogênea	43

4.3.2	Solução geral do problema unidimensional em y	47
5	FLUXOS NOS CONTORNOS: APROXIMAÇÃO COMO TERMO DE FONTE	50
5.1	Equações nodais integradas	50
5.2	Solução do problema unidimensional em x pelo método ADO	57
5.2.1	Solução homogênea	57
5.2.2	Solução particular	60
5.3	Solução do problema unidimensional em y pelo método ADO	62
5.3.1	Solução homogênea	62
5.3.2	Solução particular	64
5.4	Determinação dos coeficientes da solução homogênea e dos parâmetros das aproximações	66
6	RESULTADOS NUMÉRICOS	72
6.1	Descrição geral	73
6.2	Primeira abordagem: aproximação pelo fluxo médio	74
6.2.1	Resultados numéricos para o problema 1	74
6.2.2	Resultados numéricos para o problema 2	83
6.3	Segunda abordagem: aproximação como termo de fonte	95
6.3.1	Resultados numéricos para o problema 1	95
6.3.2	Resultados numéricos para o problema 2	96
7	CONSIDERAÇÕES FINAIS	99
ANEXO A	QUADRATURA ANGULAR COM SIMETRIA DE NÍVEL	102
BIBLIOGRAFIA	105

LISTA DE SÍMBOLOS

σ_t	Seção de choque macroscópica total
σ_s	Seção de choque de espalhamento
σ_a	Seção de choque de absorção
\mathbf{r}	vetor posição (x, y, z) em coordenadas cartesianas
Ω	vetor direção $\Omega(\mu, \omega)$
Ψ	Fluxo angular de nêutrons
Ψ_y	Fluxo angular médio de nêutrons, integrado em relação a y
Ψ_x	Fluxo angular médio de nêutrons, integrado em relação a x
ϕ	fluxo escalar de nêutrons
J	Fuga de nêutrons
J_x	Fuga parcial de nêutrons no contorno $x = a$ da placa
J_y	Fuga parcial de nêutrons no contorno $y = b$ da placa
J_N	Fuga de nêutrons avaliada considerando a quadratura S_N
N	Ordem do conjunto da quadratura angular: S_N
M	Número de direções discretas: $M = N(N + 2)/2$
Ω_m	direção discretizada $\Omega_m = (\mu_m, \eta_m)$
w_m	Pesos da quadratura S_N
λ	Autovalor associado ao autovetor U
U	Autovetor associado ao autovalor λ
ν	Constantes de separação do problema homogêneo
Φ	Autofunções do problema homogêneo

Abreviaturas

ADO	<i>(Analytical Discrete Ordinates)</i>	Método Analítico de Ordenadas discretas
BE	<i>(Boltzmann Equation)</i>	Equação de Boltzmann
LBE	<i>(Linearized Boltzmann Equation)</i>	Equação Linearizada de Boltzmann
LQ_N	<i>Level Symetric Quadrature</i>	Quadratura Nível Simétrica
S_N		Aproximação em ordenadas discretas de ordem N

LISTA DE TABELAS

Tabela 6.1	Fuga de nêutrons J_N , problema 1, $k_1 = k_2 = 0.1$	76
Tabela 6.2	Fuga de nêutrons J_N , problema 1, $k_1 = k_2 = 0.5$	76
Tabela 6.3	Fuga de nêutrons J_N , problema 1, $k_1 = 0.1, k_2 = 0.5$	76
Tabela 6.4	Fuga de nêutrons J_N , problema 1, $k_1 = k_2 = 2.0$	77
Tabela 6.5	Fuga de nêutrons J_N , problema 1, $k_1 = k_2 = 20.0$	77
Tabela 6.6	Fuga de nêutrons J_N , problema 1, $k_1 = 10.0, k_2 = 20.0$	77
Tabela 6.7	Fuga de nêutrons J_N , problema 1, $\sigma_s = 0.5$	80
Tabela 6.8	Fuga de nêutrons J_N , problema 1, $\sigma_s = 0.99$	81
Tabela 6.9	Fuga de nêutrons J_N , problema 1, $\sigma_s = 0.5, N = 4$	82
Tabela 6.10	Fuga de nêutrons J_N , problema 1, $\sigma_s = 0.99, N = 4$	83
Tabela 6.11	Fluxo escalar $\phi(x)$, problema 2, $\sigma_s = 0.5, k_1 = k_2 = 0.01$	84
Tabela 6.12	Fluxo escalar $\phi(x)$, problema 2, $\sigma_s = 0.5, k_1 = k_2 = 0.5$	84
Tabela 6.13	Fluxo escalar $\phi(x)$, problema 2, $\sigma_s = 0.5, k_1 = k_2 = 0.8$	85
Tabela 6.14	Fluxo escalar $\phi(x)$, problema 2, $\sigma_s = 0.5, k_1 = k_2 = 2.0$	85
Tabela 6.15	Fluxo escalar $\phi(x)$, problema 2, $\sigma_s = 0.1, k_1 = k_2 = 0.5$	86
Tabela 6.16	Fluxo escalar $\phi(x)$, problema 2, $\sigma_s = 0.05, k_1 = k_2 = 0.5$	86
Tabela 6.17	Fluxo escalar $\phi(x)$, em $x=0.5$, para o problema 2	89
Tabela 6.18	Fluxo escalar $\phi(x)$, em $x = 0.7$, para o problema 2	90
Tabela 6.19	Fluxo escalar $\phi(x)$, em $x = 0.98$, para o problema 2	91
Tabela 6.20	Fuga de nêutrons J_N , problema 1	96
Tabela 6.21	Fluxo escalar $\phi(x)$, problema 2, com $\sigma_s = 0.5$	96
Tabela 6.22	Fluxo escalar $\phi(x)$, problema 2, com $\sigma_s = 0.1$	97
Tabela 6.23	Fluxo escalar $\phi(x)$, problema 2, com $\sigma_s = 0.05$	97
Tabela A.1	Conjunto de Quadraturas de Simetria de Nível S_N	103

LISTA DE FIGURAS

Figura 2.1	Elemento de volume e de ângulo sólido	7
Figura 2.2	Sistema de coordenadas cartesianas, espaciais e angulares, em três dimensões	8
Figura 3.1	Domínio de definição do problema	16
Figura 3.2	Ordenação das direções para o caso $N=4$, considerando $\mu \in [0, 1]$	20
Figura 3.3	Ordenação das direções para o caso $N=4$, considerando $\eta \in [0, 1]$	22
Figura 5.1	Direções de saída do fluxo, para $m = 1, \dots, M/4$, da quadratura S_4	67
Figura 6.1	Fluxo escalar $\phi(x)$, avaliados por diferentes ordens de quadratura, para o problema 2, com $\sigma_s = 0.5$	87
Figura 6.2	Fluxo escalar $\phi(x)$, avaliados por diferentes ordens de quadratura, para o problema 2, com $\sigma_s = 0.9$	88
Figura 6.3	Fluxo escalar $\phi(x)$ - Método ADO e [80] - para o problema 2, com $\sigma_s = 0.5$, $k_1 = k_2 = 0.35$, $N = 16$	92
Figura 6.4	Fluxo escalar $\phi(x)$ - Método ADO e [80] - para o problema 2, com $\sigma_s = 0.5$, $k_1 = k_2 = 2.0$, $N = 16$	93
Figura 6.5	Fluxo escalar $\phi(x)$ - Método ADO e [80] - para o problema 2, com $\sigma_s = 0.5$, $k_1 = k_2 = 2.5$, $N = 16$	94
Figura A.1	Configuração das ordenadas discretas para um quadrante, ilustrando ordenadas com o mesmo peso w_m	104

RESUMO

Solução espectral para modelos bidimensionais da equação linear de Boltzmann

Neste trabalho, estuda-se uma abordagem de caráter analítico para problemas bidimensionais de transporte de nêutrons que são descritos pela equação linear de Boltzmann. Neste sentido, aplica-se o método ADO, método Analítico de Ordenadas Discretas, para resolver as equações unidimensionais nodais, obtidas a partir da integração da formulação bidimensional. Nesta derivação, necessita-se de equações auxiliares para os fluxos desconhecidos no contorno. Assim, duas propostas são apresentadas: na primeira, relações entre o fluxo integrado e o fluxo desconhecido são introduzidas e na segunda, os termos desconhecidos são tratados como fonte do problema. Resultados numéricos são apresentados e comparados com resultados existentes na literatura.

ABSTRACT

Spectral solution for two dimensional models of linear Boltzmann Equation

In this work, an analytical approach for two dimensional transport problems, described by the linear Boltzmann Equation, is proposed. In this sense, the ADO method, Analytical Discrete Ordinates, is applied to solve the one dimensional equations obtained by the application of a nodal scheme. In this derivation, auxiliary equations are needed for the unknown fluxes at the boundary. So two proposals are presented: first, relations between the integrated flux and the unknown flux are introduced and the second, the unknown terms are treated as source of the problem. Numerical results are presented and compared with available results in the literature.

1 INTRODUÇÃO

A equação de Boltzmann descreve matematicamente vários fenômenos da teoria de transporte [15, 23, 24, 55] e tem sido o foco de interesse de muitos pesquisadores nesses últimos anos, estando esse campo científico em desenvolvimento intensivo. A importância destes estudos deve-se, principalmente, às suas numerosas aplicações, dentre as quais podemos citar:

- reatores nucleares [32], proteção radiológica e medicina nuclear [87];
- aplicações em nanotecnologia, relacionada, por exemplo, a micro-máquinas [37, 47] e a micro-fluidos [82];
- estudo de fenômenos da transpiração térmica [57], existentes em escoamentos internos produzidos por um gradiente de temperatura ou pressão, que aplicam-se em sistemas micro-elétricos-mecânicos [34, 61];
- estimativa de propriedades térmicas de materiais semi-transparentes (como, por exemplo, secagem de cerâmica e vidro) [83];
- estudos aerodinâmicos [33] e equipamentos de vácuo [63].

Originalmente, a Equação de Boltzmann (BE: *Boltzmann Equation*) foi introduzida por Ludwig Boltzmann, no final do século XIX, no estudo da teoria cinética de gases [16]. Ela é uma equação íntegro-diferencial e fornece uma descrição quantitativa da distribuição espacial, direcional, energética e temporal de partículas em meios materiais [38]. Um estudo detalhado sobre a derivação e propriedades da BE, ou sua forma linearizada, encontra-se, por exemplo, nos livros de Cercignani [21, 24] e Duderstadt [31], bem como aspectos sobre a existência e estrutura da solução geral da equação [22].

Devido a dificuldade de se obter uma solução exata para a BE (o método proposto por Case, em 1960, denominado método de expansão em autofunções singulares [20], ou método de Case, como passou a ser conhecido, pode ser utilizado apenas para problemas de transporte idealizados), durante as últimas décadas muitos métodos têm sido propostos, principalmente para o tratamento numérico da Equação de Boltzmann [56, 62, 77, 78].

No contexto dos métodos determinísticos, que buscam uma solução exata para a equação aproximada, cita-se o método de ordenadas discretas. A versão original do método de ordenadas discretas foi introduzida por Wick [84], para solução de problemas de transporte de nêutrons, e Chandrasekhar [26], em estudos de transferência radiativa, e tem como base a aproximação da integral angular do termo de espalhamento da equação de transporte por uma quadratura numérica, reduzindo a equação íntegro-diferencial em um sistema de equações diferenciais ordinárias.

O método de ordenadas discretas tem recebido crescente atenção, na comunidade científica, e tem sido amplamente utilizado para resolver problemas unidimensionais e multidimensionais da teoria de transporte [1, 28, 42, 46, 54, 77], devido a sua boa precisão, sua relativa facilidade de aplicação a meio absorvedor, emissor e espalhador [58, 78], bem como sua eficiente integração com outros métodos, tais como os métodos de diferenças finitas [35, 79] e de elementos finitos [41]. Mais recentemente, cita-se a aplicação de métodos nodais para resolver problemas de transporte em ordenadas discretas. Os métodos nodais convencionais resolvem numericamente as equações em ordenadas discretas integradas transversalmente em uma das variáveis, usando aproximações por polinômios de baixo grau para o termo de fuga transversal e para os termos de fonte por espalhamento [44]. Recentes avanços na classe de métodos nodais, aplicados a problemas de transporte multidimensionais em ordenadas discretas, encontram-se nos trabalhos de Lawrence [51], Azmy [3, 4], Barros [13, 14] e Hauser [44, 45].

Uma dificuldade numérica inerente ao método de ordenadas discretas proposto por Chandrasekhar, consiste na determinação dos autovalores, obtidos pela solução de equações características. Buscando contornar essa dificuldade, novas formulações ao método têm sido propostas, como por exemplo, o método DISORT (*Discrete Ordinate Radiative Transfer*) [77] e a versão analítica do Método de Ordenadas Discretas (ADO: *Analytical Discrete Ordinates*). O método ADO, proposto por Barichello e Siewert [9], para a solução de problemas de transporte em geometria plana, apresenta algumas características que o tornam bastante atrativo do ponto de vista computacional, como por exemplo, possibilita o uso de um esquema de quadratura mais arbitrário, do tipo *half-range*; as constantes de separação são obtidas pela resolução de um problema de autovalor e a solução também é analítica na variável espacial.

O Método ADO tem-se mostrado uma ferramenta muito útil na resolução de vários problemas da Dinâmica de Gases Rarefeitos [86], como por exemplo:

- fluxo de Poiseuille em canal plano descrito pelo modelo BGK [10];
- problema de salto de temperatura descrito segundo o modelo BGK [11] e segundo o modelo CLF [6];
- fluxo de Poiseuille e o problema “Creep” Térmico, também descritos pelo modelo BGK, em geometria cilíndrica [65];
- fluxo de Poiseuille, “Creep” Térmico, Couette [68] e salto de temperatura [72], descritos segundo o modelo CES ;
- fluxo de Poiseuille e “Creep” Térmico descritos pelo modelo S, com condições de contorno de Cercignani-Lampis [67] e problemas de fluxo associados à diferentes condições de contorno [48, 49];
- fluxo de Poiseuille e “Creep” Térmico com o modelo S [81];

- fluxo de Couette para mistura de dois gases num canal plano, com o modelo BGK [66];
- problemas de misturas de gases baseados no modelo McCormack [39, 73, 74, 75];
- outros problemas relacionados a LBE, associada à expansões polinomiais [69, 70, 71];
- solução unificada de problemas clássicos de gases rarefeitos baseados no modelo BGK [7], em modelos com frequência de colisão variável [18, 19], no modelo Gross-Jackson [43, 59, 60] e, inclusive o trabalho desenvolvido na fase inicial do projeto de doutorado abordando estes problemas unidimensionais, descritos pelo Modelo S [17].

Devido a eficiência do método ADO, evidenciada na solução dos problemas citados acima, onde foram obtidas soluções precisas, analíticas na variável espacial, de fácil implementação e de rápida obtenção de resultados numéricos, busca-se, a partir desse trabalho, estender a aplicação do método a problemas multidimensionais.

A relevância desse estudo ressalta-se pela ampla aplicabilidade dos problemas multidimensionais e pelo grande interesse existente em abordagens de caráter analítico voltadas a estes problemas, visto que, devido as dificuldades intrínsecas da própria BE [25], na literatura encontra-se em geral soluções numéricas [13, 35, 36, 55, 79] para os mesmos. Além disso, mesmo existindo códigos numéricos para a solução desses problemas, a determinação de soluções analíticas é importante também do ponto de vista computacional, pois busca-se reduzir o tempo de execução dos programas e pode vir a ser útil como validação de parte de um código numérico.

Na abordagem de problemas multidimensionais, observa-se que o estudo das quadraturas multidimensionais conhecidas [53] motivou a iniciar-se trabalhando

com a equação linear de Boltzmann [24, 31, 85] voltada à aplicações de transporte de nêutrons e radiação. Nesta classe de aplicações, encontram-se os problemas de penetração profunda ou de "fonte fixa" [29], onde a interação das partículas com o meio material não produz mais partículas do que absorve, isto é, meios materiais não-multiplicativos. Estes tipos de problemas são os que pretende-se, inicialmente, abordar nesse trabalho, visto que são considerados clássicos na literatura e fornecem resultados que servirão para validação da aplicabilidade do método ADO a problemas bidimensionais de transporte.

Ressalta-se que este é o primeiro trabalho de aplicação do método ADO a este tipo de problema bidimensional em geometria cartesiana.

Assim, no capítulo 2, apresenta-se a equação bidimensional de transporte de nêutrons. A definição do problema, com as equações em ordenadas discretas e esquemas de quadratura, é apresentada no capítulo 3; a aplicação do método ADO, para resolver as equações unidimensionais obtidas, considerando-se aproximações para o fluxo desconhecido na fronteira pelo fluxo integrado, é apresentada no capítulo 4 e a solução, para o problema em que os termos desconhecidos são considerados como termos fonte do problema, no capítulo 5. Os resultados numéricos são apresentados e comentados no capítulo 6 e finalmente algumas considerações finais são apresentadas no capítulo 7.

2 EQUAÇÃO LINEAR DE BOLTZMANN

Na teoria de transporte, os problemas de migração de partículas neutras num meio material são modelados matematicamente pela equação linear de Boltzmann, que pode ser deduzida a partir de um balanço de partículas realizado no espaço fase do problema [31, 85].

Mais especificamente, os problemas que aqui pretende-se abordar, são descritos pela chamada equação de transporte de nêutrons derivada da equação linear de Boltzmann ao serem inseridos um conjunto apropriado de seções de choque, que representam as probabilidades de sua interação, juntamente com a geometria dos materiais no sistema.

Dessa forma, inicia-se esse estudo pela descrição da equação linear de Boltzmann para problemas bidimensionais de transporte de nêutrons, apresentando-se nesse capítulo a formulação matemática da equação e a definição de suas variáveis.

2.1 Equação de transporte de nêutrons bidimensional

Seguindo Lewis e Miller [53], considera-se a equação de transporte independente do tempo em um meio não-multiplicador, a um grupo de energia, dada por

$$[\mathbf{\Omega} \cdot \nabla + \sigma_t(\mathbf{r})]\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = Q(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) + \int_S d\Omega' \sigma_s(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega})\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}'), \quad (2.1)$$

onde $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ é o fluxo angular de nêutrons e representa o número de nêutrons esperado, por unidade de volume dV e por unidade de ângulo sólido $d\Omega$, em torno da posição $\mathbf{r} = (x, y, z)$ e direção de movimento $\mathbf{\Omega}(\mu, \omega)$ (conforme figura 2.1); $\sigma_t(\mathbf{r})$ é a seção de choque macroscópica total e $\sigma_s(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega})$ é a seção de choque diferencial de espalhamento, que descreve a distribuição dos nêutrons na posição \mathbf{r} , com direção de movimento inicial $\mathbf{\Omega}$, que são emitidos por espalhamento, na direção final $\mathbf{\Omega}'$.

A integral da equação (2.1) é avaliada sobre todas as direções Ω na esfera unitária S . O termo $Q(\mathbf{r}, \Omega)$ representa a fonte externa do problema e ∇ denota o operador gradiente. Assim, em geometria cartesiana

$$\Omega \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}, \Omega) = \mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi(\mathbf{r}, \Omega) + \eta \frac{\partial}{\partial y} \Psi(\mathbf{r}, \Omega) + \xi \frac{\partial}{\partial z} \Psi(\mathbf{r}, \Omega). \quad (2.2)$$

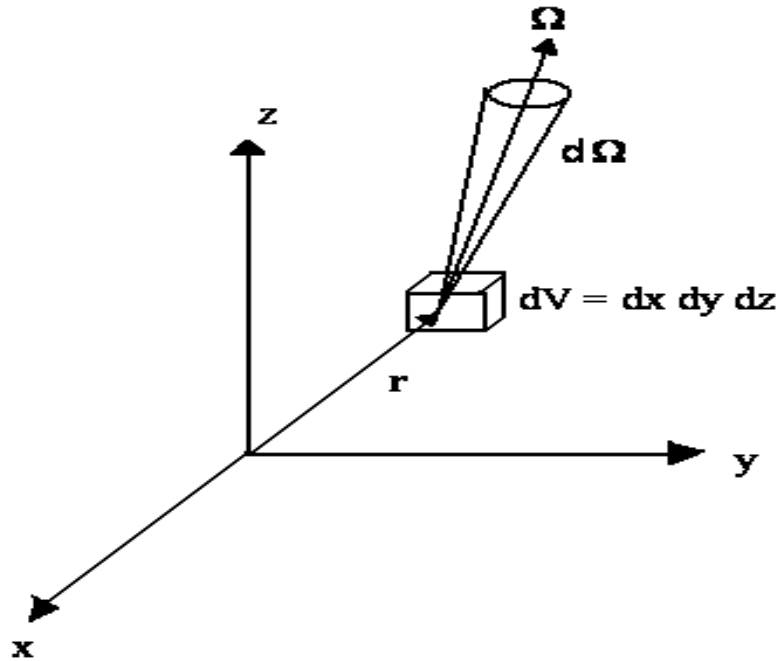


Figura 2.1: Elemento de volume e de ângulo sólido

Na figura (2.2), apresenta-se o sistema de coordenadas cartesianas para a variável espacial \mathbf{r} e para a variável angular Ω .

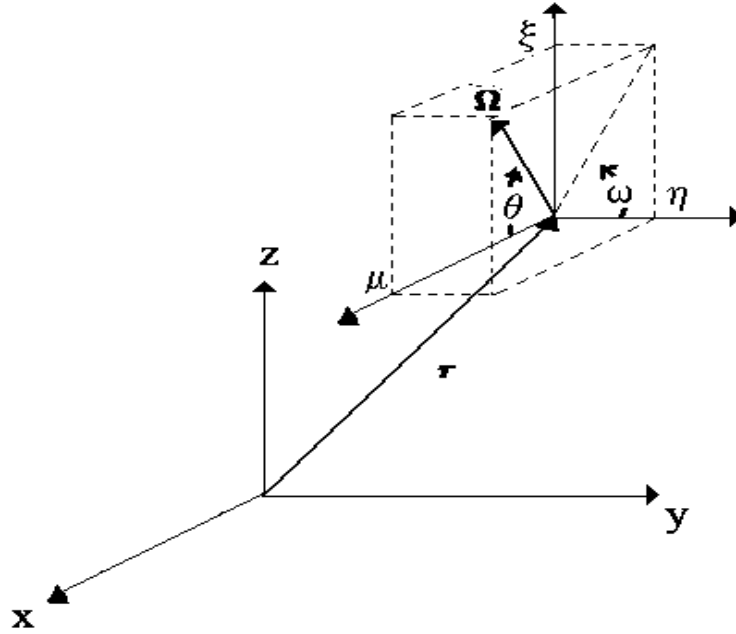


Figura 2.2: Sistema de coordenadas cartesianas, espaciais e angulares, em três dimensões

Assim as ordenadas da variável angular ficam definidas por

$$\mu = \cos \theta \quad (2.3)$$

$$\eta = (1 - \mu^2)^{1/2} \cos \omega \quad (2.4)$$

$$\xi = (1 - \mu^2)^{1/2} \text{sen } \omega. \quad (2.5)$$

Associadas à equação (2.1), existem várias formulações para as condições de contorno. Cita-se, por exemplo, as condições de contorno prescritas, onde o fluxo angular incidente na fronteira do domínio é conhecido

$$\Psi(\mathbf{r}_w, \Omega_*) = f(\mathbf{r}_w, \Omega_*), \quad (2.6)$$

onde \mathbf{r}_w representa um ponto no contorno, $\boldsymbol{\Omega}_*$ representa a direção de incidência do fluxo nesse ponto e $f(\mathbf{r}_w, \boldsymbol{\Omega}_*)$ procura descrever a condição prescrita conhecida. Um caso particular desta condição de contorno ocorre quando o fluxo angular incidente é igual a zero, conhecido como condição de contorno do tipo vácuo, que serão as abordadas neste trabalho.

Por apresentar muitas vantagens computacionais, uma expansão em termos de polinômios de Legendre é comumente utilizada para representar a seção de choque diferencial na equação (2.1). Assim, a partir da equação (2.1), considerando-se o termo de fonte

$$q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \int_S d\Omega' \sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') \quad (2.7)$$

e expandindo-se o fluxo angular em harmônicos esféricos [53]

$$\Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \phi_l^m(\mathbf{r}) Y_{lm}^*(\boldsymbol{\Omega}), \quad (2.8)$$

onde

$$\phi_l^m(\mathbf{r}) = \int_S d\Omega' Y_{lm}(\boldsymbol{\Omega}') \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}'), \quad (2.9)$$

e representando a seção de choque diferencial em termos da expansão em polinômios de Legendre [53]

$$\sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', \boldsymbol{\Omega}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sigma_{sl}(\mathbf{r}) P_l(\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}), \quad (2.10)$$

pode-se escrever a equação (2.7) na forma

$$q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \int_S d\Omega' \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sigma_{sl}(\mathbf{r}) P_l(\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\boldsymbol{\Omega}) \phi_l^m(\mathbf{r}). \quad (2.11)$$

Lembra-se aqui, que os harmônicos esféricos são definidos por

$$Y_{lm}(\boldsymbol{\Omega}) = C_{lm}^{1/2} P_l^m(\mu) e^{i\omega m}, \quad (2.12)$$

onde têm-se os coeficientes

$$C_{lm} = \frac{(2l+1)(l-m)!}{(l+m)!}, \quad (2.13)$$

as funções associadas de Legendre

$$P_l^m(\mu) = (-1)^m (1-\mu^2)^{m/2} \frac{d^m}{d\mu^m} P_l(\mu) \quad (2.14)$$

e que $Y_{lm}^*(\boldsymbol{\Omega})$ denota o conjugado complexo de $Y_{lm}(\boldsymbol{\Omega})$.

Usando-se o teorema da adição dos polinômios de Legendre

$$P_l(\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) = \frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\boldsymbol{\Omega}) Y_{lm}(\boldsymbol{\Omega}) \quad (2.15)$$

e a definição dos coeficientes $\phi_l^m(\mathbf{r})$, dada pela equação (2.9), pode-se reescrever a equação (2.11), obtendo-se

$$q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sigma_{sl}(\mathbf{r}) Y_{lm}^*(\boldsymbol{\Omega}) \int_S d\boldsymbol{\Omega}' Y_{lm}(\boldsymbol{\Omega}') \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}'), \quad (2.16)$$

ou de forma semelhante, utilizando a equação (2.9),

$$q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\boldsymbol{\Omega}) \sigma_{sl}(\mathbf{r}) \phi_l^m(\mathbf{r}). \quad (2.17)$$

Ainda seguindo Lewis e Miller [53], observa-se que esta expansão, em termos gerais dos harmônicos esféricos, somente é necessária quando se aborda problemas tridimensionais de transporte. Para problemas unidimensionais e bidimensionais, as simetrias impostas geometricamente no fluxo angular, podem ser utilizadas para reduzir o número de momentos angulares. Observando-se que em geometria cartesiana, para problemas bidimensionais, o fluxo angular é uma função par no ângulo ω

$$\Psi(\mathbf{r}, \mu, \omega) = \Psi(\mathbf{r}, \mu, -\omega), \quad (2.18)$$

considerando-se o sistema de coordenadas mostrado na figura (2.2), pode-se simplificar a expansão em harmônicos esféricos, pois desta forma é possível expressar

$$Y_{lm}(\mathbf{\Omega}) = Y_{lm}^e(\mathbf{\Omega}) + iY_{lm}^0(\mathbf{\Omega}), \quad (2.19)$$

onde

$$Y_{lm}^e(\mathbf{\Omega}) = C_{lm}^{1/2} P_l^m(\mu) \cos(m\omega) \quad (2.20)$$

e

$$Y_{lm}^0(\mathbf{\Omega}) = C_{lm}^{1/2} P_l^m(\mu) \sin(m\omega). \quad (2.21)$$

Substituindo-se a equação (2.19), juntamente com as equações (2.20) e (2.21), em (2.9), mostra-se que

$$\phi_l^m(\mathbf{r}) = \int_S d\Omega' Y_{lm}^e(\mathbf{\Omega}') \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}'). \quad (2.22)$$

Além disso, usando-se o fato de que

$$Y_{l,-m}(\boldsymbol{\Omega}) = (-1)^m Y_{l,m}^*(\boldsymbol{\Omega}), \quad (2.23)$$

pode-se concluir que

$$Y_{l,-m}^e(\boldsymbol{\Omega}) = (-1)^m Y_{l,m}^e(\boldsymbol{\Omega}) \quad (2.24)$$

e

$$\phi_l^{-m}(\boldsymbol{\Omega}) = (-1)^m \phi_l^m(\boldsymbol{\Omega}). \quad (2.25)$$

Assim, substituindo-se a equação (2.19), na equação (2.16) ou equação (2.17) e utilizando-se as expressões (2.22) - (2.25), obtém-se

$$q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = Q(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^l (2 - \delta_{m0}) Y_{lm}^e(\boldsymbol{\Omega}) \sigma_{sl}(\mathbf{r}) \int_S d\Omega' Y_{lm}^e(\boldsymbol{\Omega}') \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}'). \quad (2.26)$$

A partir da expressão obtida na equação (2.26) e da definição de $\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$, expressa na equação (2.2), escreve-se então a equação (2.1), para problemas bidimensionais, em geometria cartesiana na forma

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \boldsymbol{\Omega}) + \eta \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma_t(x, y) \Psi(x, y, \boldsymbol{\Omega}) = Q(x, y, \boldsymbol{\Omega}) + \\ \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^l (2 - \delta_{m0}) Y_{lm}^e(\boldsymbol{\Omega}) \sigma_{sl}(x, y) \int_S d\Omega' Y_{lm}^e(\boldsymbol{\Omega}') \Psi(x, y, \boldsymbol{\Omega}'). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Particularmente, para fonte de espalhamento isotrópica, caso em que $L = 0$, obtém-se

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \boldsymbol{\Omega}) + \eta \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma_t(x, y) \Psi(x, y, \boldsymbol{\Omega}) = Q(x, y, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma_s(x, y) \int_S \Psi(x, y, \boldsymbol{\Omega}') d\Omega'. \quad (2.28)$$

A partir da solução da equação (2.28), com condições de contorno apropriadas, obtém-se então o fluxo angular de nêutrons $\Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$. Como em muitas aplicações as direções de movimento dos nêutrons não assumem tanta relevância, pode-se determinar, a partir do fluxo angular obtido, outras quantidades de interesse, como por exemplo, o fluxo escalar e a fuga de nêutrons.

Seguindo-se a referência [53], define-se

$$\phi(x, y) = \int_S \Psi(x, y, \boldsymbol{\Omega}') d\Omega' \quad (2.29)$$

como sendo o fluxo escalar de nêutrons e

$$\begin{aligned} J(x, y) &= \mathbf{n} \cdot \mathbf{J}(\mathbf{r}) \\ &= \mathbf{n} \cdot \int \Psi(x, y, \boldsymbol{\Omega}') \boldsymbol{\Omega} d\Omega', \\ &= \int_{\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Omega} > 0} \Psi(x, y, \boldsymbol{\Omega}') |\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Omega}| d\Omega', \end{aligned} \quad (2.30)$$

é a corrente parcial de nêutrons, número esperado de partículas atravessando, por unidade de área, na superfície. Na equação (2.30), \mathbf{n} é um vetor normal unitário apontando para o exterior da superfície e $\mathbf{J}(\mathbf{r})$ é a corrente de nêutrons. A quantidade $J(x, y)$ também é comumente denominada por fuga de nêutrons [13, 44],

denominação que adota-se neste trabalho, por ser a utilizada nas referências que servirão de comparação com os resultados obtidos.

Obtida a equação que modela problemas bidimensionais de transporte de nêutrons, com fonte de espalhamento isotrópica, no próximo capítulo apresenta-se a formulação em ordenadas discretas da equação (2.28), das condições de contorno associadas e das quantidades de interesse.

3 O PROBLEMA BIDIMENSIONAL EM ORDENADAS DISCRETAS

Os problemas de transporte de nêutrons bidimensionais, que serão neste trabalho abordados, são modelados pela equação descrita no capítulo anterior. O objetivo desse trabalho é desenvolver uma abordagem analítica para a solução desses problemas em ordenadas discretas.

Assim, nesse capítulo, inicialmente apresenta-se a formulação do problema que será abordado, bem como as equações em ordenadas discretas. Aplicando-se uma integração em relação a uma das variáveis espaciais, base dos métodos nodais, obtém-se as equações unidimensionais em ordenadas discretas. Como quadraturas multidimensionais são necessárias nas discretizações da variável angular, algumas considerações sobre a quadratura utilizada são apresentadas.

3.1 Formulação do problema

O problema de transporte de nêutrons, que pretende-se abordar, definido numa placa homogênea de dimensões $2a \times 2b$, com uma fonte isotrópica de nêutrons na região $(-a_s, a_s) \times (-b_s, b_s)$, é modelado matematicamente pela equação (2.28)

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}) + \eta \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}) + \sigma_t \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}) = Q(x, y) + \sigma_s \int_S \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}') d\Omega', \quad (3.1)$$

onde $x \in [-a, a]$, $y \in [-b, b]$ e $\mathbf{\Omega} = \mathbf{\Omega}(\mu, \omega)$.

Considerando-se condições de contorno do tipo vácuo, escreve-se

$$\Psi(-a, y, \Omega_*) = 0, \quad (3.2)$$

$$\Psi(a, y, \Omega_*) = 0, \quad (3.3)$$

$$\Psi(x, -b, \Omega_*) = 0, \quad (3.4)$$

$$\Psi(x, b, \Omega_*) = 0, \quad (3.5)$$

para as direções Ω_* que indicam as direções de incidência do fluxo em cada fronteira.

A figura (3.1) representa geometricamente a situação.

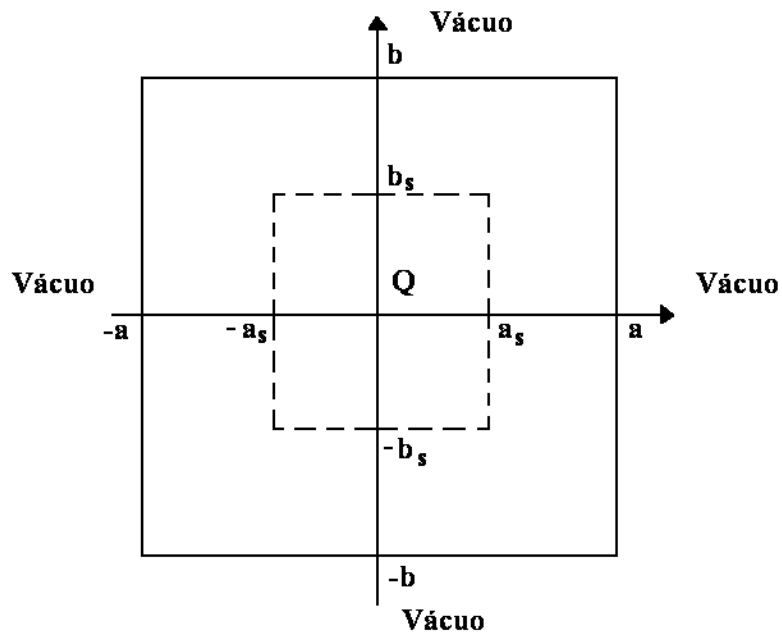


Figura 3.1: Domínio de definição do problema

3.2 Equações em ordenadas discretas

Definido matematicamente o problema pela equação (3.1), juntamente com as condições de contorno dadas pelas equações (3.2) – (3.5), busca-se então escrever essas equações em ordenadas discretas.

Na abordagem de problemas multidimensionais, pelo método de ordenadas discretas, a escolha do conjunto de quadratura angular é arbitrária, embora restrições, nas direções Ω_n e nos pesos da quadratura w_n , possam aparecer do desejo de preservar-se simetria ou outras propriedades [55]. Conjuntos de direções e pesos que são completamente simétricos (isto é, que são invariantes após qualquer rotação de 90°) têm sido mais comumente utilizados na abordagem de problemas multidimensionais. Diferentes conjuntos de quadraturas têm sido tabulados, por exemplo, por Lee [52], Lathrop e Carlson [50].

Como a base do método consiste na substituição do termo integral por uma fórmula de quadratura angular, para escrever as equações em ordenadas discretas utiliza-se, nesse trabalho, uma quadratura multidimensional com simetria de nível LQ_N (*Level Symetric Quadrature*) [53]. Nessa quadratura, o conjunto $\{\mu_n, \eta_n, \xi_n\}$, que descreve as direções $\Omega_n(\mu_n, \eta_n, \xi_n)$, é formado pelos pontos (μ_n, η_n, ξ_n) na esfera unitária

$$\mu_n^2 + \eta_n^2 + \xi_n^2 = 1 \quad (3.6)$$

e os pesos são normalizados de forma que tenhamos em cada octante

$$\sum_k w_k = 1. \quad (3.7)$$

Estes conjuntos de quadratura, também denominados conjuntos de quadraturas simétricas S_N , utilizam o mesmo conjunto de $N/2$ valores positivos das direções cossenos em relação a cada um dos eixos. Assim, numa quadratura S_N , existem

$$\frac{N(N+2)}{8} \quad (3.8)$$

ordenadas por octante ou $N(N+2)$ ordenadas em toda esfera unitária. As condições nível simétricas resultam numa propriedade muito desejada: em geometria cartesiana, se a dimensionalidade do problema é diminuída, o mesmo conjunto de ordenadas e pesos pode ser utilizado para problemas bidimensionais ou unidimensionais.

Para problemas bidimensionais, conforme discutido no capítulo anterior, a simetria apresentada por $\Psi(x, y, \mathbf{\Omega})$ em torno do plano formado por quaisquer dois eixos ortogonais, reduz para quatro o número de octantes sobre os quais a dependência angular de $\Psi(x, y, \mathbf{\Omega})$ deve ser determinada. Assim, seguindo-se a referência [53], define-se o eixo polar e o ângulo azimutal a partir do eixo y . A integral da equação (3.1) é então avaliada apenas na semiesfera formada pelos quatro octantes nos quais $\mathbf{\Omega} \cdot \mathbf{k} > 0$, onde $\mathbf{k} = (0, 0, 1)$ é o vetor unitário na direção do eixo z . Assim as direções discretas ficam definidas por $\mathbf{\Omega}_m = (\mu_m, \eta_m)$, para $m = 1, \dots, M$, onde

$$M = \frac{N(N+2)}{2} \quad (3.9)$$

representa o número de direções, nos quatro quadrantes, para a respectiva aproximação S_N e os pesos ficam definidos por

$$\hat{w} = \frac{w}{4}. \quad (3.10)$$

A relação das ordenadas μ_m, η_m e a distribuição dos pesos w , para aproximações S_N , com $N = 2, 4, 6, 8, 12, 16$, conforme [53], são reproduzidos, respectivamente, na tabela (A.1) e na figura (A.1) do Anexo A deste trabalho.

A partir da definição desse esquema de quadratura, escreve-se então a equação (3.1), em ordenadas discretas, na forma

$$\mu_m \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_m) + \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_m) + \sigma_t \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_m) = Q(x, y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^M w_k \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_k) \quad (3.11)$$

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

Diferentemente de [53], que trabalha com a equação em ordenadas discretas na forma dada pela equação (3.11), ressalta-se que pela aplicação do método ADO, procura-se escrever o conjunto $\{w_k, \mathbf{\Omega}_k\}$, $m = 1, \dots, M$, dos pesos e direções da quadratura S_N , de forma que $\mathbf{\Omega}_m$, para $m = 1, \dots, M/2$, represente as direções de entrada de fluxo numa fronteira fixada e $\mathbf{\Omega}_{m+M/2}$, para $m = 1, \dots, M/2$, represente as direções de saída. Como consequência desse procedimento, trabalhar-se-á com dois conjuntos de equações, cada um deles com $M/2$ equações e a soma do lado direito da equação (3.11) será escrita então na forma

$$\sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})]. \quad (3.12)$$

A ordenação do conjunto das direções, nesta quadratura bidimensional, é relevante para a aplicação do método ADO, conforme ficará mais evidente na solução dos problemas, pois define se é mais conveniente desenvolver uma formulação do problema unidimensional na variável espacial x ou na variável y . Esta escolha pode ser determinada pela geometria do problema, onde, por exemplo, seria mais

significativo determinar o fluxo angular de nêutrons em relação a x em uma região retangular em que a fosse muito maior que b . Estas duas formulações são apresentadas a seguir.

Propõe-se então, inicialmente, a ordenação das direções de forma que para $m = 1, \dots, M/2$, tenhamos $\mu_m > 0$ e para $m = (M/2 + 1), \dots, M$, tenhamos $\mu_m < 0$, como mostrado na figura (3.2), para a aproximação S_4 .

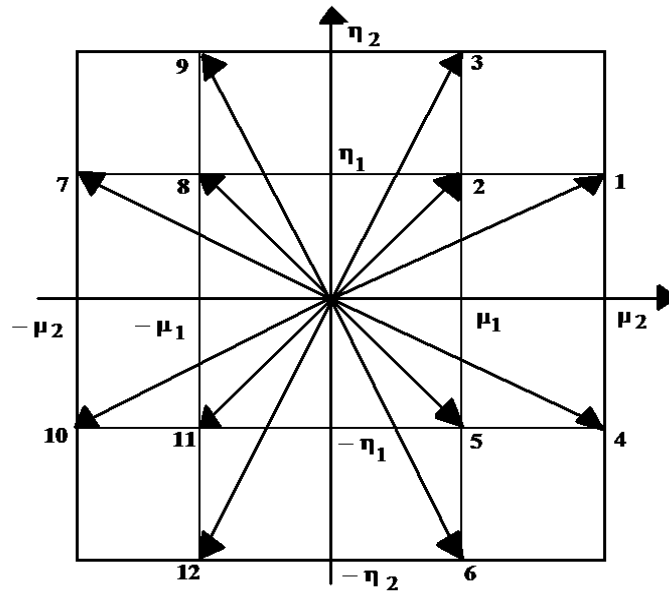


Figura 3.2: Ordenação das direções para o caso $N=4$, considerando $\mu \in [0, 1]$

Escreve-se então a equação (3.1) em ordenadas discretas, na forma

$$\begin{aligned} \mu_m \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \Omega_m) + \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \Omega_m) + \sigma_t \Psi(x, y, \Omega_m) = \\ Q(x, y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi(x, y, \Omega_k) + \Psi(x, y, \Omega_{k+\frac{M}{2}})] \end{aligned} \quad (3.13)$$

e

$$-\mu_m \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{2}}) + \eta_{m+\frac{M}{2}} \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{2}}) + \sigma_t \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{2}}) =$$

$$Q(x, y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_{k+\frac{M}{2}})], \quad (3.14)$$

para $m = 1, \dots, M/2$, onde w_n são os pesos e $\mathbf{\Omega}_n = (\mu_n, \eta_n)$ são as direções da quadratura.

As condições de contorno, expressas pelas equações (3.2) – (3.5), são então escritas como

$$\Psi(-a, y, \mathbf{\Omega}_m) = 0, \quad (3.15)$$

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

$$\Psi(a, y, \mathbf{\Omega}_m) = 0, \quad (3.16)$$

para $m = (M/2 + 1), \dots, M$;

$$\Psi(x, -b, \mathbf{\Omega}_m) = 0, \quad (3.17)$$

para $m = 1, \dots, M/4$ e $m = (M/2 + 1), \dots, 3M/4$;

$$\Psi(x, b, \mathbf{\Omega}_m) = 0, \quad (3.18)$$

para $m = (M/4 + 1), \dots, M/2$ e $m = (3M/4 + 1), \dots, M$.

Se uma outra ordenação é agora proposta, uma forma diferente de escrever a equação (3.1) é obtida. Considerando-se a ordenação das direções de forma

que para $m = 1, \dots, M/2$, tenhamos $\eta > 0$ e para $m = (M/2 + 1), \dots, M$, tenhamos $\eta < 0$ (como mostrado na figura (3.3), para a aproximação S_4), escreve-se a equação (3.1) em ordenadas discretas, para $m = 1, \dots, M/2$, na forma

$$\begin{aligned} \mu_m \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \Omega_m) + \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \Omega_m) + \sigma_t \Psi(x, y, \Omega_m) = \\ Q(x, y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi(x, y, \Omega_k) + \Psi(x, y, \Omega_{k+\frac{M}{2}})] \end{aligned} \quad (3.19)$$

e

$$\begin{aligned} \mu_{m+\frac{M}{2}} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) - \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) + \sigma_t \Psi(x, y, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) = \\ Q(x, y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi(x, y, \Omega_k) + \Psi(x, y, \Omega_{k+\frac{M}{2}})]. \end{aligned} \quad (3.20)$$

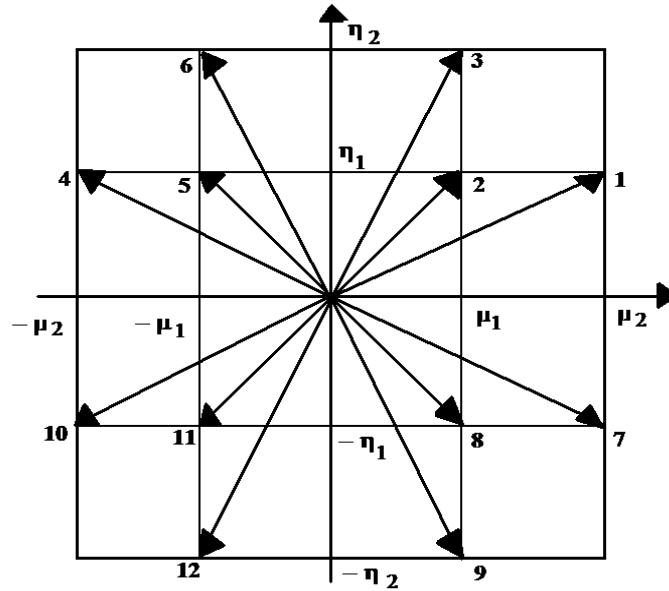


Figura 3.3: Ordenação das direções para o caso $N=4$, considerando $\eta \in [0, 1]$

As condições de contorno, expressas pelas equações (3.2) – (3.5), para esta formulação, são escritas como

$$\Psi(x, -b, \Omega_m) = 0, \quad (3.21)$$

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

$$\Psi(x, b, \Omega_m) = 0, \quad (3.22)$$

para $m = (M/2 + 1), \dots, M$;

$$\Psi(-a, y, \Omega_m) = 0, \quad (3.23)$$

para $m = 1, \dots, M/4$ e $m = (M/2 + 1), \dots, 3M/4$;

$$\Psi(a, y, \Omega_m) = 0, \quad (3.24)$$

para $m = (M/4 + 1), \dots, M/2$ e $m = (3M/4 + 1), \dots, M$.

Observa-se que a forma das equações (3.13) e (3.14), tendo em vista a aplicação do método ADO, sugerem a formulação de um problema unidimensional na variável espacial x , enquanto as equações (3.19) e (3.20), um problema unidimensional na variável y . Estas formulações são apresentadas na próxima seção e são chamadas de equações nodais integradas.

3.3 Equações nodais integradas

A integração das equações em ordenadas discretas em uma das variáveis espaciais é a base dos métodos nodais [4, 5, 51]. Dessa forma, para obter-se equações

unidimensionais, na variável x , integra-se as equações (3.13) e (3.14) em relação a $y \in [-b, b]$, obtendo-se

$$\begin{aligned} \mu_m \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \Omega_m) + \frac{\eta_m}{2b} [\Psi(x, b, \Omega_m) - \Psi(x, -b, \Omega_m)] + \sigma_t \Psi_y(x, \Omega_m) = \\ Q_y(x) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+\frac{M}{2}})], \end{aligned} \quad (3.25)$$

$$\begin{aligned} -\mu_m \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) + \frac{\eta_{m+\frac{M}{2}}}{2b} [\Psi(x, b, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) - \Psi(x, -b, \Omega_{m+\frac{M}{2}})] + \\ \sigma_t \Psi_y(x, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) = Q_y(x) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+\frac{M}{2}})] \end{aligned} \quad (3.26)$$

para $m = 1, \dots, M/2$ e onde considera-se

$$\Psi_y(x, \Omega_m) = \frac{1}{2b} \int_{-b}^b \Psi(x, y, \Omega_m) dy, \quad (3.27)$$

como sendo o fluxo angular médio, ou fluxo integrado e

$$Q_y(x) = \frac{1}{2b} \int_{-b}^b Q(x, y) dy. \quad (3.28)$$

As quantidades de interesse são também discretizadas em relação à variável angular. Assim, da equação (2.29), obtém-se para o fluxo escalar

$$\phi(x) = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+M/2})] \quad (3.29)$$

e, a partir da equação (2.30), escreve-se a expressão para a fuga de nêutrons na forma

$$J_x = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{M/2} \mu_k w_k \Psi_y(x, \Omega_k). \quad (3.30)$$

Realiza-se agora, procedimento análogo para obter-se as equações integradas nodais dependentes de y , integrando-se as equações (3.19) e (3.20) em relação a $x \in [-a, a]$ e obtendo-se

$$\begin{aligned} \eta_m \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \Omega_m) + \frac{\mu_m}{2a} [\Psi(a, y, \Omega_m) - \Psi(-a, y, \Omega_m)] + \sigma_t \Psi_x(y, \Omega_m) = \\ Q_x(y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_x(y, \Omega_k) + \Psi_x(y, \Omega_{k+\frac{M}{2}})], \end{aligned} \quad (3.31)$$

$$\begin{aligned} -\eta_m \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) + \frac{\mu_{m+\frac{M}{2}}}{2a} [\Psi(a, y, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) - \Psi(-a, y, \Omega_{m+\frac{M}{2}})] + \\ \sigma_t \Psi_x(y, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) = Q_x(y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_x(y, \Omega_k) + \Psi_x(y, \Omega_{k+\frac{M}{2}})] \end{aligned} \quad (3.32)$$

para $m = 1, \dots, M/2$ e onde considera-se

$$\Psi_x(y, \Omega_m) = \frac{1}{2a} \int_{-a}^a \Psi(x, y, \Omega_m) dx, \quad (3.33)$$

$$Q_x(y) = \frac{1}{2a} \int_{-a}^a Q(x, y) dx. \quad (3.34)$$

A partir da equação (2.29), obtém-se então para o fluxo escalar

$$\phi(y) = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})] \quad (3.35)$$

e, a partir da equação (2.30), a fuga de nêutrons é determinada por

$$J_y = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{M/2} \eta_k w_k \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_k). \quad (3.36)$$

Obtidas as equações nodais (3.25), (3.26), unidimensionais na variável x e (3.31) e (3.32), unidimensionais na variável y , observa-se que definições para os fluxos desconhecidos no contorno são necessárias para continuar-se na busca de soluções para essas equações e, conseqüentemente, para as quantidades de interesse desejadas. Assim, no próximo capítulo, relações entre o fluxo angular médio e o fluxo desconhecido nas fronteiras são incluídas e desenvolve-se então a solução pelo método ADO para as equações unidimensionais obtidas. Após, no capítulo 5, é proposto uma outra forma de aproximação para os fluxos desconhecidos no contorno, considerados então como termos de fonte do problema.

4 FLUXOS NOS CONTORNOS: APROXIMAÇÃO PELO FLUXO INTEGRADO

Na determinação das equações unidimensionais, no capítulo anterior, equações auxiliares são necessárias para expressar os fluxos desconhecidos no contorno. Nesse capítulo, serão introduzidas aproximações pelo fluxo médio integrado. Após, procura-se a solução dessas equações pelo método de ordenadas discretas.

O método de ordenadas discretas tem sido muito utilizado para a solução de problemas de transporte [36, 42, 79]. Desde o trabalho representativo de Chandrasekhar, na década de 40, muitas formulações têm sido propostas ao método, tornando-o uma ferramenta eficiente e precisa na solução desses problemas. Em particular, neste trabalho, pretende-se utilizar a versão analítica do Método Analítico de Ordenadas Discretas (ADO) [9], a fim de obter-se soluções para as equações formuladas no capítulo anterior.

Assim, na próxima seção, define-se as equações unidimensionais em relação a cada uma das variáveis, substituindo-se os termos conhecidos no contorno e usando-se aproximações para os demais; depois, na seção 4.2 aplica-se o método ADO para determinar a solução das equações integradas unidimensionais, na variável x e as quantidades de interesse relacionadas. Na seção 4.3, aborda-se então a solução para o caso de escolher-se trabalhar com as equações em y . Estes desenvolvimentos são apresentados e resolvidos separadamente, pois a solução de cada um deles não envolve acoplamento com as equações relacionadas ao outro problema.

4.1 Aproximação pelo fluxo médio integrado

Nas equações (3.25) e (3.26), obtidas anteriormente

$$\begin{aligned} \mu_m \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \Omega_m) + \frac{\eta_m}{2b} [\Psi(x, b, \Omega_m) - \Psi(x, -b, \Omega_m)] + \sigma_t \Psi_y(x, \Omega_m) = \\ Q_y(x) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+\frac{M}{2}})], \end{aligned} \quad (4.1)$$

$$\begin{aligned} -\mu_m \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) + \frac{\eta_{m+\frac{M}{2}}}{2b} [\Psi(x, b, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) - \Psi(x, -b, \Omega_{m+\frac{M}{2}})] + \\ \sigma_t \Psi_y(x, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) = Q_y(x) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+\frac{M}{2}})], \end{aligned} \quad (4.2)$$

para $m = 1, \dots, M/2$, observa-se, a partir das equações (3.21) e (3.22), que existem termos avaliados no contorno que são conhecidos

$$\Psi(x, -b, \Omega_m) = 0 \quad (4.3)$$

para $m = 1, \dots, M/4$ e $m = (M/2 + 1), \dots, 3M/4$ e

$$\Psi(x, b, \Omega_m) = 0 \quad (4.4)$$

para $m = (M/4 + 1), \dots, M/2$ e $m = (3M/4 + 1), \dots, M$.

Seguindo idéia similar à usada em problemas de transferência de calor [27], os termos desconhecidos serão aproximados pelo fluxo médio integrado,

$$\Psi(x, b, \Omega_m) \approx k_1 \Psi_y(x, \Omega_m) \quad (4.5)$$

para $m = 1, \dots, M/4$ e $m = (M/2 + 1), \dots, 3M/4$, e

$$\Psi(x, -b, \Omega_m) \approx k_2 \Psi_y(x, \Omega_m), \quad (4.6)$$

para $m = (M/4 + 1), \dots, M/2$ e $m = (3M/4 + 1), \dots, M$, onde k_1 e k_2 são parâmetros estimados *a priori*, cuja influência deve ser analisada na solução do problema.

Ressalta-se que diferentemente de outros métodos nodais [2, 13, 44, 29], que propõem aproximações constantes ou exponenciais para os termos avaliados no contorno, introduzindo-os na parte não-homogênea do problema, aqui a utilização das relações (4.5) e (4.6), permite que estes termos sejam abordados na solução do problema homogêneo sem acrescentar complicações na solução pelo método ADO, simplificando assim também a implementação computacional.

Substituindo-se as expressões (4.3) – (4.6) nas equações (4.1) e (4.2), obtém-se um sistema de equações nodais unidimensionais em ordenadas discretas, para $m = 1, \dots, M/4$

$$\mu_m \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \Omega_m) + K_m \Psi_y(x, \Omega_m) = Q(x), \quad (4.7)$$

$$\mu_{m+\frac{M}{4}} \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \Omega_{m+\frac{M}{4}}) + K_{m+M/4} \Psi_y(x, \Omega_{m+\frac{M}{4}}) = Q(x), \quad (4.8)$$

$$-\mu_m \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) + K_{m+M/2} \Psi_y(x, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) = Q(x), \quad (4.9)$$

$$-\mu_{m+\frac{M}{4}} \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \Omega_{m+\frac{3M}{4}}) + K_{m+3M/4} \Psi_y(x, \Omega_{m+\frac{3M}{4}}) = Q(x), \quad (4.10)$$

onde define-se

$$Q(x) = Q_y(x) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+\frac{M}{2}})] \quad (4.11)$$

e

$$K_m = \begin{cases} \sigma_t + \frac{k_1 \eta_m}{2b}, & m = 1, \dots, M/4 \text{ e } m = (M/2 + 1), \dots, 3M/4 \\ \sigma_t - \frac{k_2 \eta_m}{2b}, & m = (M/4 + 1), \dots, M/2 \text{ e } m = (3M/4 + 1), \dots, M. \end{cases}$$

Associadas às equações (4.7) – (4.10), obtém-se as condições de contorno integrando-se em $y \in [-b, b]$ as equações (3.15) e (3.16), obtendo-se assim

$$\Psi_y(-a, \Omega_m) = 0, \quad (4.12)$$

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

$$\Psi_y(a, \Omega_m) = 0, \quad (4.13)$$

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

Agora, procedimento análogo é desenvolvido considerando-se então as equações integradas dependentes de y , (3.31) e (3.32), para $m = 1, \dots, M/2$

$$\eta_m \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \Omega_m) + \frac{\mu_m}{2a} [\Psi(a, y, \Omega_m) - \Psi(-a, y, \Omega_m)] + \sigma_t \Psi_x(y, \Omega_m) = Q_x(y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_x(y, \Omega_k) + \Psi_x(y, \Omega_{k+\frac{M}{2}})], \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned}
& -\eta_m \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) + \frac{\mu_{m+\frac{M}{2}}}{2a} [\Psi(a, y, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) - \Psi(-a, y, \Omega_{m+\frac{M}{2}})] + \\
& \sigma_t \Psi_x(y, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) = Q_x(y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_x(y, \Omega_k) + \Psi_x(y, \Omega_{k+\frac{M}{2}})]. \quad (4.15)
\end{aligned}$$

Observa-se que nas equações (4.14) e (4.15), aparecem termos avaliados no contorno que são conhecidos (3.23)–(3.24),

$$\Psi(-a, y, \Omega_m) = 0, \quad (4.16)$$

para $m = 1, \dots, M/4$ e $m = (M/2 + 1), \dots, 3M/4$ e

$$\Psi(a, y, \Omega_m) = 0, \quad (4.17)$$

para $m = (M/4 + 1), \dots, M/2$ e $m = (3M/4 + 1), \dots, M$.

Utiliza-se o fluxo médio integrado, definido na equação (3.33), para aproximar os termos desconhecidos

$$\Psi(a, y, \Omega_m) \approx \gamma_1 \Psi_x(y, \Omega_m) \quad (4.18)$$

para $m = 1, \dots, M/4$ e $m = (M/2 + 1), \dots, 3M/4$,

$$\Psi(-a, y, \Omega_m) \approx \gamma_2 \Psi_x(y, \Omega_m), \quad (4.19)$$

para $m = (M/4+1), \dots, M/2$ e $m = (3M/4+1), \dots, M$, onde novamente os parâmetros γ_1 e γ_2 serão estimados *a priori*.

Substituindo as expressões (4.16) – (4.19) nas equações (4.14) e (4.15), obtém-se então as equações nodais unidimensionais para o problema definido na variável espacial y

$$\eta_m \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \Omega_m) + L_m \Psi_x(y, \Omega_m) = Q(y), \quad (4.20)$$

$$\eta_{m+\frac{M}{4}} \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \Omega_{m+\frac{M}{4}}) + L_{m+M/4} \Psi_x(y, \Omega_{m+\frac{M}{4}}) = Q(y), \quad (4.21)$$

$$-\eta_m \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) + L_{m+M/2} \Psi_x(y, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) = Q(y), \quad (4.22)$$

$$-\eta_{m+\frac{M}{4}} \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \Omega_{m+\frac{3M}{4}}) + L_{m+3M/4} \Psi_x(y, \Omega_{m+\frac{3M}{4}}) = Q(y), \quad (4.23)$$

sendo $m = 1, \dots, M/4$, onde define-se

$$Q(y) = Q_x(y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_x(y, \Omega_k) + \Psi_x(y, \Omega_{k+\frac{M}{2}})] \quad (4.24)$$

e

$$L_m = \begin{cases} \sigma_t + \frac{\gamma_1 \mu_m}{2a}, & m = 1, \dots, M/4 \quad e \quad m = (M/2 + 1), \dots, 3M/4 \\ \sigma_t - \frac{\gamma_2 \mu_m}{2a}, & m = (M/4 + 1), \dots, M/2 \quad e \quad m = (3M/4 + 1), \dots, M. \end{cases}$$

As condições de contorno associadas às equações (4.20) – (4.23), são obtidas integrando-se as equações (3.21) e (3.22) em relação a x , no intervalo $[-a, a]$.

Obtém-se assim

$$\Psi_x(-b, \Omega_m) = 0, \quad (4.25)$$

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

$$\Psi_x(b, \Omega_m) = 0, \quad (4.26)$$

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

Estando definidas as equações nodais unidimensionais e suas condições de contorno, tanto para o problema formulado na variável espacial x , quanto na variável y , busca-se então a solução dessas equações.

4.2 Solução do problema unidimensional em x pelo método ADO

Nesta seção, utilizando-se o método analítico de ordenadas discretas, apresenta-se a solução do problema associado às equações integradas unidimensionais, na variável x .

Inicialmente, obtém-se a solução homogênea do problema, através da resolução de um problema de autovalores. Após, a solução particular é definida e aplicando-se as condições de contorno, determina-se os coeficientes desejados da solução homogênea, ficando a solução geral, para o problema na variável espacial x , completamente definida.

4.2.1 Solução homogênea

Considerando-se as equações homogêneas associadas às equações (4.7) – (4.10), busca-se soluções da forma exponencial

$$\Psi_y^h(x, \mathbf{\Omega}_m) = \Phi(\nu, \mathbf{\Omega}_m) e^{-x/\nu}, \quad (4.27)$$

onde, em analogia com a teoria de equações diferenciais, ν é chamado de autovalor e $\Phi(\nu, \mathbf{\Omega}_m)$, de autofunção [20].

Substituindo a equação (4.27) nas equações (4.7) – (4.10) e multiplicando-as por $e^{x/\nu}$, para $m = 1, \dots, M/4$, obtém-se

$$-\frac{\mu_m}{\nu} \Phi(\nu, \mathbf{\Omega}_m) + K_m \Phi(\nu, \mathbf{\Omega}_m) = Q_m, \quad (4.28)$$

$$-\frac{\mu_{m+\frac{M}{4}}}{\nu} \Phi(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{4}}) + K_{m+\frac{M}{4}} \Phi(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{4}}) = Q_m, \quad (4.29)$$

$$\frac{\mu_m}{\nu} \Phi(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{2}}) + K_{m+\frac{M}{2}} \Phi(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{2}}) = Q_m, \quad (4.30)$$

$$\frac{\mu_{m+\frac{M}{4}}}{\nu} \Phi(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{3M}{4}}) + K_{m+\frac{3M}{4}} \Phi(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{3M}{4}}) = Q_m, \quad (4.31)$$

onde considera-se

$$Q_m = \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Phi(\nu, \mathbf{\Omega}_k) + \Phi(\nu, \mathbf{\Omega}_{k+\frac{M}{2}})]. \quad (4.32)$$

A solução homogênea das equações (4.28) – (4.31) depende então basicamente de se determinar os autovalores ν e as autofunções $\Phi(\nu, \mathbf{\Omega}_m)$. Assim, considerando-se

$$U(\nu, \mathbf{\Omega}_m) = \Phi(\nu, \mathbf{\Omega}_m) + \Phi(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{2}}) \quad (4.33)$$

e

$$V(\nu, \mathbf{\Omega}_m) = \Phi(\nu, \mathbf{\Omega}_m) - \Phi(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{2}}), \quad (4.34)$$

inicialmente, soma-se a equação (4.28) com a (4.30), a (4.29) com a (4.31) e observando-se que

$$\eta_m = \eta_{m+\frac{M}{2}} \quad (4.35)$$

para todo $m = 1, \dots, M/2$, obtém-se

$$-\frac{\mu_m}{\nu} V(\nu, \mathbf{\Omega}_m) + K_m U(\nu, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{\sigma_s}{2} \sum_{k=1}^{M/2} w_k U(\nu, \mathbf{\Omega}_k), \quad (4.36)$$

$$-\frac{\mu_{m+M/4}}{\nu} V(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+M/4}) + K_{m+\frac{M}{4}} U(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+M/4}) = \frac{\sigma_s}{2} \sum_{k=1}^{M/2} w_k U(\nu, \mathbf{\Omega}_k) \quad (4.37)$$

onde considera-se as direções $m = 1, \dots, M/4$.

A partir das equações (4.36) e (4.37), obtém-se

$$V(\nu, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{\nu}{\mu_m} K_m U(\nu, \mathbf{\Omega}_m) - \frac{\nu \sigma_s}{2 \mu_m} \sum_{k=1}^{M/2} w_k U(\nu, \mathbf{\Omega}_k), \quad (4.38)$$

$$V(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{4}}) = \frac{\nu}{\mu_{m+\frac{M}{4}}} K_{m+\frac{M}{4}} U(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{4}}) - \frac{\nu \sigma_s}{2 \mu_{m+\frac{M}{4}}} \sum_{k=1}^{M/2} w_k U(\nu, \mathbf{\Omega}_k). \quad (4.39)$$

Agora diminuindo a equação (4.30) da (4.28) e a (4.31) da (4.29), obtém-se

$$-\frac{\mu_m}{\nu} U(\nu, \mathbf{\Omega}_m) + K_m V(\nu, \mathbf{\Omega}_m) = 0 \quad (4.40)$$

e

$$-\frac{\mu_{m+\frac{M}{4}}}{\nu} U(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{4}}) + K_{m+\frac{M}{4}} V(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{4}}) = 0. \quad (4.41)$$

Finalmente, substituindo-se a equação (4.38) na equação (4.40) e a equação (4.39) na equação (4.41), obtém-se

$$\frac{1}{\mu_m^2} K_m^2 U(\nu, \mathbf{\Omega}_m) - \frac{\sigma_s}{2 \mu_m^2} K_m \sum_{k=1}^{M/2} w_k U(\nu, \mathbf{\Omega}_k) = \lambda U(\nu, \mathbf{\Omega}_m), \quad (4.42)$$

$$\frac{1}{\mu_{m+\frac{M}{4}}^2} K_{m+\frac{M}{4}}^2 U(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{4}}) - \frac{\sigma_s}{2 \mu_{m+\frac{M}{4}}^2} K_{m+\frac{M}{4}} \sum_{k=1}^{M/2} w_k U(\nu, \mathbf{\Omega}_k) = \lambda U(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{4}}), \quad (4.43)$$

para $m = 1, \dots, M/4$, onde

$$\lambda = \frac{1}{\nu^2}. \quad (4.44)$$

Avaliando-se as equações (4.42) e (4.43) em $m = 1, \dots, M/4$ e considerando-se o vetor \mathbf{U} , de dimensão $M/2 \times 1$, com componentes $U(\nu, \boldsymbol{\Omega}_m)$, obtém-se o problema de autovalor

$$[\mathbf{D} - \mathbf{A}] \mathbf{U} = \lambda \mathbf{U}, \quad (4.45)$$

onde \mathbf{D} e \mathbf{A} são matrizes de ordem $M/2 \times M/2$. A matriz \mathbf{D} é definida por

$$\mathbf{D} = \text{diag} \left\{ \frac{K_1^2}{\mu_1^2}, \frac{K_2^2}{\mu_2^2}, \dots, \frac{K_{M/2}^2}{\mu_{M/2}^2} \right\} \quad (4.46)$$

e \mathbf{A} tem componentes da forma

$$a(i, j) = \frac{w_j \sigma_s K_i}{2 \mu_i^2}, \quad i, j = 1, \dots, M/2$$

Resolvido o problema de autovalor (4.45), obtém-se então $\{\lambda_j, \mathbf{U}_j\}$, para $j = 1, \dots, M/2$, que são os respectivos autovalores e autovetores do problema (4.45) e determina-se assim, a partir das equações (4.33) e (4.34), as autofunções

$$\Phi(\nu_j, \boldsymbol{\Omega}_m) = \frac{1}{2} [U(\nu_j, \boldsymbol{\Omega}_m) + V(\nu_j, \boldsymbol{\Omega}_m)], \quad (4.47)$$

$$\Phi(\nu_j, \boldsymbol{\Omega}_{m+\frac{M}{2}}) = \frac{1}{2} [U(\nu_j, \boldsymbol{\Omega}_m) - V(\nu_j, \boldsymbol{\Omega}_m)], \quad (4.48)$$

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

Observa-se que λ_j são os autovalores associados ao problema (4.45). A fim de diferenciá-los dos autovalores ν_j , associados às autofunções da solução

homogênea, conforme especificado na equação (4.27), considera-se aqui ν_j como constantes de separação, nomenclatura usualmente utilizada em teoria de transporte. Assim as constantes de separação ν_j , são obtidas a partir da equação (4.44) e como elas ocorrem aos pares $\pm \nu_j$, toma-se somente os valores positivos e escreve-se a solução homogênea das equações (4.7)– (4.10), seguindo-se referência [40], na forma

$$\Psi_{k,y}^h(x, \Omega_m) = \sum_{j=1}^{M/2} A_{k,j} \Phi(\nu_j, \Omega_m) e^{-(x-a_{k-1})/\nu_j} + B_{k,j} \Phi(\nu_j, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) e^{-(a_k-x)/\nu_j}, \quad (4.49)$$

$$\Psi_{k,y}^h(x, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) = \sum_{j=1}^{M/2} A_{k,j} \Phi(\nu_j, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) e^{-(x-a_{k-1})/\nu_j} + B_{k,j} \Phi(\nu_j, \Omega_m) e^{-(a_k-x)/\nu_j}, \quad (4.50)$$

para $m = 1, \dots, M/2$, $x \in [a_{k-1}, a_k]$, com $-a \leq a_{k-1} \leq a_k \leq a$, onde k representa o número de intervalos que pretende-se dividir o domínio $[-a, a]$ e $A_{k,j}$ e $B_{k,j}$ são coeficientes que precisam ser determinados.

Ressalta-se aqui, que mesmo partindo-se de um problema definido em M direções ordenadas discretas, deriva-se e resolve-se um problema de autovalor de ordem $M/2$, uma importante propriedade associada ao método ADO.

4.2.2 Solução particular

Buscando-se uma solução particular para as equações (4.7) – (4.10) e observando-se que a fonte $Q_y(x)$, definida por

$$Q_y(x) = \begin{cases} b_s/b, & x \in [-a_s, a_s] \\ 0, & -a \leq x < -a_s \text{ ou } a_s < x \leq a \end{cases}$$

é constante em relação a variável x , no intervalo $[-a_s, a_s]$ propõe-se uma solução particular dependente apenas da direção Ω_m

$$\Psi_y^p(\Omega_m) = C_m, \quad (4.51)$$

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

Substituindo-se a eq. (4.51) nas equações (4.7) – (4.10), obtém-se

$$K_m C_m - \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^M w_k C_k = b_s/b, \quad (4.52)$$

para $m = 1, \dots, M$, $x \in [-a_s, a_s]$, que define um sistema de M equações, possibilitando assim determinar-se os termos C_m que definem a solução particular do problema.

Determinada a solução particular, apresenta-se na próxima seção a forma da solução geral do problema unidimensional definido na variável x , para depois prosseguir-se na determinação dos coeficientes da solução homogênea que, neste ponto, ainda estão indeterminados.

4.2.3 Solução geral do problema unidimensional na variável x

A solução do problema, definido pelas equações (4.7) – (4.10) e associadas às condições de contorno (4.12) e (4.13), pode ser escrita na forma

$$\Psi_y(x, \Omega_m) = \Psi_y^h(x, \Omega_m) + \Psi_y^p(x, \Omega_m). \quad (4.53)$$

Considerando-se que o problema abordado possui uma fonte no intervalo $[-a_s, a_s]$, divide-se o domínio $[-a, a]$ em três subintervalos, considerando então $k = 1, 2, 3$, que definem

$$[a_0, a_1] = [-a, -a_s], \quad (4.54)$$

$$[a_1, a_2] = [-a_s, a_s], \quad (4.55)$$

$$[a_2, a_3] = [a_s, a] \quad (4.56)$$

e que permitem então escrever a solução geral, em cada uma dessas regiões, a partir das equações (4.49), (4.50) e (4.51), para $m = 1, \dots, M/2$, na forma

$$\Psi_y(x, \Omega_m) = \sum_{j=1}^{M/2} A_j \Phi(\nu_j, \Omega_m) e^{-(x+a)/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) e^{(a_s+x)/\nu_j}, \quad (4.57)$$

$$\Psi_y(x, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) = \sum_{j=1}^{M/2} A_j \Phi(\nu_j, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) e^{-(x+a)/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \Omega_m) e^{(a_s+x)/\nu_j}, \quad (4.58)$$

quando $x \in [-a, -a_s]$, aqui considerada região 1;

$$\Psi_y(x, \Omega_m) = \sum_{j=1}^{M/2} C_j \Phi(\nu_j, \Omega_m) e^{-(x+a_s)/\nu_j} + D_j \Phi(\nu_j, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) e^{-(a_s-x)/\nu_j} + \mathcal{C}_m, \quad (4.59)$$

$$\Psi_y(x, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) = \sum_{j=1}^{M/2} C_j \Phi(\nu_j, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) e^{-(x+a_s)/\nu_j} + D_j \Phi(\nu_j, \Omega_m) e^{-(a_s-x)/\nu_j} + \mathcal{C}_{m+\frac{M}{2}}, \quad (4.60)$$

quando $x \in [-a_s, a_s]$, considerada região 2, e

$$\Psi_y(x, \Omega_m) = \sum_{j=1}^{M/2} E_j \Phi(\nu_j, \Omega_m) e^{-(x-a_s)/\nu_j} + F_j \Phi(\nu_j, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) e^{-(a-x)/\nu_j}, \quad (4.61)$$

$$\Psi_y(x, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) = \sum_{j=1}^{M/2} E_j \Phi(\nu_j, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) e^{-(x-a_s)/\nu_j} + F_j \Phi(\nu_j, \Omega_m) e^{-(a-x)/\nu_j}, \quad (4.62)$$

para $x \in [a_s, a]$, considerada região 3.

4.2.4 Determinação dos coeficientes da solução homogênea

Para que as soluções (4.57) – (4.62) estejam completamente definidas, necessita-se determinar os coeficientes da solução homogênea: $A_j, B_j, C_j, D_j, E_j, F_j$, $j = 1, \dots, M/2$. Aplicando-se, respectivamente, as condições de contorno (4.12) e (4.13)

$$\Psi_y(-a, \Omega_m) = 0, \quad (4.63)$$

para as direções Ω_m , tais que $m = 1, \dots, M/2$,

$$\Psi_y(a, \Omega_m) = 0, \quad (4.64)$$

para as direções Ω_m , tais que $m = (M/2 + 1), \dots, M$, nas equações (4.57) e (4.62), obtém-se para $m = 1, \dots, M/2$

$$\sum_{k=1}^{M/2} A_k \Phi(\nu_k, \Omega_m) + B_k \Phi(\nu_k, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) e^{-(a-a_s)/\nu_k} = 0 \quad (4.65)$$

e

$$\sum_{k=1}^{M/2} E_k \Phi(\nu_k, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) e^{-(a-a_s)/\nu_k} + F_k \Phi(\nu_k, \Omega_m) = 0. \quad (4.66)$$

Outras $2M$ equações são obtidas considerando-se condições de continuidade nas fronteiras $x = -a_s$ e $x = a_s$. Assim, impõem-se a condição de que o fluxo emergente de uma região, seja igual ao incidente na outra. A partir dessas condições de continuidade, obtém-se, para $m = 1, \dots, M/2$

$$\sum_{k=1}^{M/2} \Phi(\nu_k, \Omega_m) [A_k e^{-(a-a_s)/\nu_k} - C_k] + \Phi(\nu_k, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) [B_k - D_k e^{-2a_s/\nu_k}] = \mathcal{C}_m, \quad (4.67)$$

$$\sum_{k=1}^{M/2} \Phi(\nu_k, \Omega_m) [B_k - D_k e^{-2a_s/\nu_k}] + \Phi(\nu_k, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) [A_k e^{-(a-a_s)/\nu_k} - C_k] = \mathcal{C}_{m+\frac{M}{2}}, \quad (4.68)$$

$$\sum_{k=1}^{M/2} \Phi(\nu_k, \Omega_m) [E_k - C_k e^{-2a_s/\nu_k}] + \Phi(\nu_k, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) [F_k e^{-(a-a_s)/\nu_k} - D_k] = \mathcal{C}_m, \quad (4.69)$$

$$\sum_{k=1}^{M/2} \Phi(\nu_k, \Omega_m) [F_k e^{-(a-a_s)/\nu_k} - D_k] + \Phi(\nu_k, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) [E_k - C_k e^{-2a_s/\nu_k}] = \mathcal{C}_{m+\frac{M}{2}}, \quad (4.70)$$

que juntamente com as equações (4.65) e (4.66) definem um sistema de ordem $3M \times 3M$, que após resolvido determinam os $3M$ coeficientes da solução homogênea, ficando as soluções (4.57) – (4.62) completamente definidas.

Determinada então a solução geral do problema unidimensional definido na variável x , pode-se avaliar assim as quantidades de interesse: $\phi(x)$, fluxo escalar definido na equação (3.29) e a fuga de nêutrons J_x , expressa na equação (3.30).

Lembra-se aqui que a determinação de uma solução para o problema em y , apresentada na próxima seção, nesse ponto não é necessária para a definição da solução do problema dependente na variável espacial x , que no momento já está completamente definida. Nota-se assim, que nesta abordagem, os dois problemas são desacoplados.

4.3 Solução do problema unidimensional em y pelo método ADO

Para determinar agora a solução das equações unidimensionais integradas em y , segue-se os mesmos procedimentos desenvolvidos na seção anterior.

4.3.1 Solução homogênea

Buscando-se solução para as equações homogêneas associadas às equações (4.20) – (4.23), propõe-se

$$\Psi_x^h(y, \Omega_m) = \Phi(\nu, \Omega_m) e^{-y/\nu}. \quad (4.71)$$

Substituindo a equação (4.71) nas equações (4.20) – (4.23) e multiplicando-as por $e^{y/\nu}$, para $m = 1, \dots, M/4$, obtém-se

$$-\frac{\eta_m}{\nu} \Phi(\nu, \Omega_m) + L_m \Phi(\nu, \Omega_m) = \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Phi(\nu, \Omega_k) + \Phi(\nu, \Omega_{k+\frac{M}{2}})] \quad (4.72)$$

$$-\frac{\eta_{m+M/4}}{\nu} \Phi(\nu, \Omega_{m+\frac{M}{4}}) + L_{m+\frac{M}{4}} \Phi(\nu, \Omega_{m+\frac{M}{4}}) = \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Phi(\nu, \Omega_k) + \Phi(\nu, \Omega_{k+\frac{M}{2}})], \quad (4.73)$$

$$\frac{\eta_m}{\nu} \Phi(\nu, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) + L_{m+\frac{M}{2}} \Phi(\nu, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) = \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Phi(\nu, \Omega_k) + \Phi(\nu, \Omega_{k+\frac{M}{2}})], \quad (4.74)$$

$$\frac{\eta_{m+\frac{M}{4}}}{\nu} \Phi(\nu, \Omega_{m+\frac{3M}{4}}) + L_{m+\frac{3M}{4}} \Phi(\nu, \Omega_{m+\frac{3M}{4}}) = \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Phi(\nu, \Omega_k) + \Phi(\nu, \Omega_{k+\frac{M}{2}})]. \quad (4.75)$$

Agora somando a equação (4.72) com a (4.74), a (4.73) com a (4.75) e observando-se que

$$\mu_m = \mu_{m+\frac{M}{2}} \quad (4.76)$$

para todo $m = 1, \dots, M/2$, obtém-se

$$-\frac{\eta_m}{\nu} V(\nu, \Omega_m) + L_m U(\nu, \Omega_m) = \frac{\sigma_s}{2} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Phi(\nu, \Omega_k) + \Phi(\nu, \Omega_{k+\frac{M}{2}})], \quad (4.77)$$

$$-\frac{\eta_{m+\frac{M}{4}}}{\nu} V(\nu, \Omega_{m+\frac{M}{4}}) + L_{m+\frac{M}{4}} U(\nu, \Omega_{m+\frac{M}{4}}) = \frac{\sigma_s}{2} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Phi(\nu, \Omega_k) + \Phi(\nu, \Omega_{k+\frac{M}{2}})], \quad (4.78)$$

onde considera-se $m = 1, \dots, M/4$,

$$U(\nu, \Omega_m) = \Phi(\nu, \Omega_m) + \Phi(\nu, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) \quad (4.79)$$

e

$$V(\nu, \Omega_m) = \Phi(\nu, \Omega_m) - \Phi(\nu, \Omega_{m+\frac{M}{2}}). \quad (4.80)$$

A partir das equações (4.77) e (4.78), com $m = 1, \dots, M/4$, obtém-se

$$V(\nu, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{\nu}{\eta_m} L_m U(\nu, \mathbf{\Omega}_m) - \frac{\nu \sigma_s}{2 \eta_m} \sum_{k=1}^{M/2} w_k U(\nu, \mathbf{\Omega}_k), \quad (4.81)$$

$$V(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{4}}) = \frac{\nu}{\eta_{m+\frac{M}{4}}} L_{m+\frac{M}{4}} U(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{4}}) - \frac{\nu \sigma_s}{2 \eta_{m+\frac{M}{4}}} \sum_{k=1}^{M/2} w_k U(\nu, \mathbf{\Omega}_k). \quad (4.82)$$

Agora diminuindo a equação (4.74) da (4.72) e a (4.75) da (4.73), obtém-se , para $m = 1, \dots, M/4$

$$-\frac{\eta_m}{\nu} U(\nu, \mathbf{\Omega}_m) + L_m V(\nu, \mathbf{\Omega}_m) = 0 \quad (4.83)$$

$$-\frac{\eta_{m+\frac{M}{4}}}{\nu} U(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{4}}) + L_{m+\frac{M}{4}} V(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{4}}) = 0. \quad (4.84)$$

Substituindo a equação (4.81) na equação (4.83) e a equação (4.82) na equação (4.84), obtém-se

$$\frac{1}{\eta_m^2} L_m^2 U(\nu, \mathbf{\Omega}_m) - \frac{\sigma_s}{2 \eta_m^2} L_m \sum_{k=1}^{M/2} w_k U(\nu, \mathbf{\Omega}_k) = \lambda U(\nu, \mathbf{\Omega}_m), \quad (4.85)$$

$$\frac{1}{\eta_{m+\frac{M}{4}}^2} L_{m+\frac{M}{4}}^2 U(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{4}}) - \frac{\sigma_s}{2 \eta_{m+\frac{M}{4}}^2} L_{m+\frac{M}{4}} \sum_{k=1}^{M/2} w_k U(\nu, \mathbf{\Omega}_k) = \lambda U(\nu, \mathbf{\Omega}_m), \quad (4.86)$$

para $m = 1, \dots, M/4$, onde

$$\lambda = \frac{1}{\nu^2}. \quad (4.87)$$

Avaliando as equações (4.85) e (4.86) em $m = 1, \dots, M/4$ e considerando o vetor \mathbf{U} , de dimensão $M/2 \times 1$, com componentes $U(\nu, \boldsymbol{\Omega}_m)$, obtém-se o problema de autovalor

$$[\mathbf{D} - \mathbf{A}] \mathbf{U} = \lambda \mathbf{U}, \quad (4.88)$$

onde \mathbf{D} e \mathbf{A} são matrizes de ordem $M/2 \times M/2$. A matriz \mathbf{D} é definida por

$$\mathbf{D} = \text{diag} \left\{ \frac{L_1^2}{\eta_1^2}, \frac{L_2^2}{\eta_2^2}, \dots, \frac{L_{M/2}^2}{\eta_{M/2}^2} \right\} \quad (4.89)$$

e \mathbf{A} tem componentes da forma

$$a(i, j) = \frac{w_j \sigma_s L_i}{2 \eta_i^2}, \quad i, j = 1, \dots, M/2.$$

Resolvido o problema de autovalor (4.88), obtém-se $\{\lambda_j, \mathbf{U}_j\}$, para $j = 1, \dots, M/2$, que são os respectivos autovalores e autovetores do problema e determina-se, a partir das equações (4.79) e (4.80), as autofunções

$$\Phi(\nu_j, \boldsymbol{\Omega}_m) = \frac{U(\nu_j, \boldsymbol{\Omega}_m) + V(\nu_j, \boldsymbol{\Omega}_m)}{2}, \quad (4.90)$$

$$\Phi(\nu_j, \boldsymbol{\Omega}_{m+\frac{M}{2}}) = \frac{U(\nu_j, \boldsymbol{\Omega}_m) - V(\nu_j, \boldsymbol{\Omega}_m)}{2}, \quad (4.91)$$

para $m = 1, \dots, M/2$ e da equação (4.87), as constantes de separação ν_j .

4.3.2 Solução geral do problema unidimensional em y

Análogo ao que foi desenvolvido na seção anterior para o problema unidimensional na variável x , encontra-se uma solução particular constante em cada direção Ω_m

$$\Psi_x^p(\Omega_m) = \mathcal{D}_m \quad (4.92)$$

para $m = 1, \dots, M$, $y \in [-b_s, b_s]$ e a solução do problema, definido pelas equações (4.20) – (4.23) e associadas às condições de contorno (4.25), (4.26), escrita na forma

$$\Psi_x(y, \Omega_m) = \Psi_x^h(y, \Omega_m) + \Psi_x^p(y, \Omega_m), \quad (4.93)$$

fica então definida por

$$\Psi_x(y, \Omega_m) = \sum_{j=1}^{M/2} A_j \Phi(\nu_j, \Omega_m) e^{-(y+b)/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) e^{(b_s+y)/\nu_j}, \quad (4.94)$$

$$\Psi_x(y, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) = \sum_{j=1}^{M/2} A_j \Phi(\nu_j, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) e^{-(y+b)/\nu_j} + B_j \Phi(\nu_j, \Omega_m) e^{(b_s+y)/\nu_j}, \quad (4.95)$$

para $y \in [-b, -b_s]$;

$$\Psi_x(y, \Omega_m) = \sum_{j=1}^{M/2} C_j \Phi(\nu_j, \Omega_m) e^{-(y+b_s)/\nu_j} + D_j \Phi(\nu_j, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) e^{-(b_s-y)/\nu_j} + \mathcal{D}_m, \quad (4.96)$$

$$\Psi_x(y, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) = \sum_{j=1}^{M/2} C_j \Phi(\nu_j, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) e^{-(y+b_s)/\nu_j} + D_j \Phi(\nu_j, \Omega_m) e^{-(b_s-y)/\nu_j} + \mathcal{D}_{m+\frac{M}{2}}, \quad (4.97)$$

para $y \in [-b_s, b_s]$ e

$$\Psi_x(y, \Omega_m) = \sum_{j=1}^{M/2} E_j \Phi(\nu_j, \Omega_m) e^{-(y-b_s)/\nu_j} + F_j \Phi(\nu_j, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) e^{-(b-y)/\nu_j}, \quad (4.98)$$

$$\Psi_x(y, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) = \sum_{j=1}^{M/2} E_j \Phi(\nu_j, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) e^{-(y-b_s)/\nu_j} + F_j \Phi(\nu_j, \Omega_m) e^{-(b-y)/\nu_j}, \quad (4.99)$$

para $y \in [b_s, b]$.

Os coeficientes da solução homogênea são então determinados pelo uso de condições de contorno e de continuidade como desenvolvido na seção anterior.

Neste momento, tem-se resolvido então pelo método ADO, desacoplada-mente, as duas equações unidimensionais nodais. Resultados numéricos aplicados a problemas testes, descritos por essas formulações, serão apresentados no capítulo 6, considerando-se a proposta descrita neste capítulo, de aproximação dos fluxos desconhecidos no contorno, pelo fluxo médio integrado, como sendo a primeira abordagem.

Aqui, lembra-se que na abordagem desenvolvida nesse capítulo, empregou-se a relação de proporcionalidade entre o fluxo desconhecido no contorno com o fluxo integrado através dos parâmetros k_j , $j = 1, 2$, nas equações (4.5) e (4.6)

$$\Psi(x, b, \Omega_m) \approx k_1 \Psi_y(x, \Omega_m) \quad (4.100)$$

para $m = 1, \dots, M/4$ e $m = (M/2 + 1), \dots, 3M/4$,

$$\Psi(x, -b, \Omega_m) \approx k_2 \Psi_y(x, \Omega_m), \quad (4.101)$$

ou γ_j , $j = 1, 2$, nas equações (4.18) e (4.19)

$$\Psi(a, y, \Omega_m) \approx \gamma_1 \Psi_x(y, \Omega_m) \quad (4.102)$$

para $m = 1, \dots, M/4$ e $m = (M/2 + 1), \dots, 3M/4$,

$$\Psi(-a, y, \Omega_m) \approx \gamma_2 \Psi_x(y, \Omega_m), \quad (4.103)$$

aqui considerados arbitrários e definidos *a priori* na resolução das equações. O próximo passo, no desenvolvimento do trabalho, é propor uma abordagem onde esses parâmetros possam ser determinados juntamente com a solução do problema. Essa nova abordagem é então proposta e desenvolvida no próximo capítulo.

5 FLUXOS NOS CONTORNOS: APROXIMAÇÃO COMO TERMO DE FONTE

Com o objetivo de não realizar-se estimativas *a priori*, como as utilizadas nas equações (4.100) – (4.103), uma nova abordagem é proposta, buscando-se agora a determinação desses parâmetros juntamente com a solução do problema. Ressalta-se aqui, que diferentemente da abordagem anterior, será considerada a possibilidade da dependência direcional desses parâmetros. Além disso, esta nova proposta não utiliza aproximações pelo fluxo integrado e, dessa forma, as relações para os fluxos desconhecidos são introduzidas no termo não-homogêneo do problema. Condições auxiliares serão necessárias para a determinação desses parâmetros, introduzindo um acoplamento das equações unidimensionais nodais em x , com as equações unidimensionais nodais em y . Dessa forma, inicia-se então esse capítulo reformulando-se as equações nodais integradas, obtidas na seção 3.3 e, logo após, apresenta-se o desenvolvimento da solução dessa nova formulação.

5.1 Equações nodais integradas

Partindo-se das equações (3.25) e (3.26), integradas em relação a $y \in [-b, b]$

$$\mu_m \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \Omega_m) + \frac{\eta_m}{2b} [\Psi(x, b, \Omega_m) - \Psi(x, -b, \Omega_m)] + \sigma_t \Psi_y(x, \Omega_m) = Q_y(x) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+\frac{M}{2}})], \quad (5.1)$$

$$\begin{aligned}
& -\mu_m \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) + \frac{\eta_{m+\frac{M}{2}}}{2b} [\Psi(x, b, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) - \Psi(x, -b, \Omega_{m+\frac{M}{2}})] + \\
& \sigma_t \Psi_y(x, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) = Q_y(x) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+\frac{M}{2}})], \quad (5.2)
\end{aligned}$$

para $m = 1, \dots, M/2$ e considerando-se as condições de contorno (3.17) e (3.18), observa-se que nas equações (5.1) e (5.2), aparecem termos avaliados no contorno que são conhecidos

$$\Psi(x, b, \Omega_m) = 0 \quad (5.3)$$

para $m = (M/4 + 1), \dots, M/2$ e $m = (3M/4 + 1), \dots, M$ e

$$\Psi(x, -b, \Omega_m) = 0, \quad (5.4)$$

para $m = 1, \dots, M/4$ e $m = (M/2 + 1), \dots, 3M/4$.

Para as outras $M/2$ direções em que o fluxo é desconhecido em cada fronteira, propõe-se que sejam aproximados por uma constante $k(\Omega)$, dependente da direção. Assim, escreve-se

$$\Psi(x, -b, \Omega_m) \approx k_m \quad (5.5)$$

para $m = (M/4 + 1), \dots, M/2$ e $m = (3M/4 + 1), \dots, M$,

$$\Psi(x, b, \mathbf{\Omega}_m) \approx k_m \quad (5.6)$$

para $m = 1, \dots, M/4$ e $m = (M/2 + 1), \dots, 3M/4$.

Como comentado anteriormente, o desenvolvimento da solução envolverá um acoplamento das equações unidimensionais nodais, assim, utilizar-se-á, em alguns termos, subscritos y para especificar que relacionam-se ao problema integrado em y , como por exemplo, μ_{ym} , que representa a ordenada μ_m na ordenação escolhida para desenvolver-se um problema unidimensional em x (ordenação apresentada na figura (3.2), para $N = 4$).

Substituindo-se as expressões (5.4) – (5.6) nas equações (5.1) e (5.2), obtém-se para $m = 1, \dots, M/4$

$$\mu_{ym} \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_m) + \sigma_t \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_m) = Q_m(x), \quad (5.7)$$

$$\mu_{y, m + \frac{M}{4}} \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{m + \frac{M}{4}}) + \sigma_t \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{m + \frac{M}{4}}) = Q_{m + \frac{M}{4}}(x), \quad (5.8)$$

$$-\mu_{ym} \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{m + \frac{M}{2}}) + \sigma_t \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{m + \frac{M}{2}}) = Q_{m + \frac{M}{2}}(x), \quad (5.9)$$

$$-\mu_{y, m + \frac{M}{4}} \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{m + \frac{3M}{4}}) + \sigma_t \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{m + \frac{3M}{4}}) = Q_{m + \frac{3M}{4}}(x), \quad (5.10)$$

definindo-se, para $m = 1, \dots, M/4$ e $m = M/2 + 1, \dots, 3M/4$

$$Q_m(x) = Q_y(x) - \frac{k_m \eta_{ym}}{2b} + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_{yk} [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+\frac{M}{2}})] \quad (5.11)$$

e para $m = M/4 + 1, \dots, M/2$ e $m = 3M/4 + 1, \dots, M$

$$Q_m(x) = Q_y(x) + \frac{k_m \eta_{ym}}{2b} + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_{yk} [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+\frac{M}{2}})]. \quad (5.12)$$

Associada às equações (5.7) – (5.10), têm-se as seguintes condições de contorno

$$\Psi_y(-a, \Omega_m) = 0, \quad m = 1, \dots, M/2, \quad (5.13)$$

$$\Psi_y(a, \Omega_m) = 0, \quad m = (M/2 + 1), \dots, M. \quad (5.14)$$

As quantidades de interesse continuam sendo o fluxo escalar

$$\phi(x) = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_{yk} [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+M/2})] \quad (5.15)$$

e a fuga de nêutrons

$$J_x = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{M/2} \mu_{yk} w_{yk} \Psi_y(x, \Omega_k). \quad (5.16)$$

Analogamente, abordando-se agora a formulação para o problema na variável espacial y , parte-se das equações (3.31) e (3.32)

$$\eta_{xm} \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \Omega_m) + \frac{\mu_{xm}}{2a} [\Psi(a, y, \Omega_m) - \Psi(-a, y, \Omega_m)] + \sigma_t \Psi_x(y, \Omega_m) = Q_x(y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_{xk} [\Psi_x(y, \Omega_k) + \Psi_x(y, \Omega_{k+\frac{M}{2}})], \quad (5.17)$$

$$-\eta_{xm} \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) + \frac{\mu_{x,m+\frac{M}{2}}}{2a} [\Psi(a, y, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) - \Psi(-a, y, \Omega_{m+\frac{M}{2}})] + \sigma_t \Psi_x(y, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) = Q_x(y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_{xk} [\Psi_x(y, \Omega_k) + \Psi_x(y, \Omega_{k+\frac{M}{2}})] \quad (5.18)$$

para $m = 1, \dots, M/2$. Nas equações (5.17) e (5.18), aparecem termos avaliados no contorno que são conhecidos (3.23) e (3.24),

$$\Psi(-a, y, \Omega_m) = 0, \quad (5.19)$$

para $m = 1, \dots, M/4$ e $m = (M/2 + 1), \dots, 3M/4$ e

$$\Psi(a, y, \Omega_m) = 0, \quad (5.20)$$

para $m = (M/4 + 1), \dots, M/2$ e $m = (3M/4 + 1), \dots, M$.

Os termos desconhecidos serão aproximados por

$$\Psi(x_\omega, y, \Omega_m) \approx \kappa_m, \quad (5.21)$$

onde $x_w = -a$ ou $x_w = a$.

Substituindo-se as expressões (5.19) – (5.21) nas equações (5.17) e (5.18), obtém-se

$$\eta_{xm} \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_m) + \sigma_t \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_m) = Q_m(y), \quad (5.22)$$

$$\eta_{x,m+\frac{M}{4}} \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{4}}) + \sigma_t \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{4}}) = Q_{m+M/4}(y), \quad (5.23)$$

$$-\eta_{xm} \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{2}}) + \sigma_t \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{2}}) = Q_{m+M/2}(y), \quad (5.24)$$

$$-\eta_{x,m+\frac{M}{4}} \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{3M}{4}}) + \sigma_t \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{3M}{4}}) = Q_{m+3M/4}(y), \quad (5.25)$$

para $m = 1, \dots, M/4$, onde define-se

$$Q_m(y) = Q_x(y) - \frac{\kappa_m \mu_{xm}}{2a} + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_{yk} [\Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{k+\frac{M}{2}})], \quad (5.26)$$

para $m = 1, \dots, M/4$ e $m = M/2 + 1, \dots, 3M/4$ e

$$Q_m(y) = Q_x(y) + \frac{\kappa_m \mu_{xm}}{2a} + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_{yk} [\Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{k+\frac{M}{2}})], \quad (5.27)$$

para $m = M/4 + 1, \dots, M/2$ e $m = 3M/4 + 1, \dots, M$.

Associada às equações (5.22) – (5.25), têm-se as seguintes condições de contorno

$$\Psi_x(-b, \Omega_m) = 0, \quad m = 1, \dots, M/2 \quad (5.28)$$

$$\Psi_x(b, \Omega_m) = 0, \quad m = (M/2 + 1), \dots, M. \quad (5.29)$$

Avalia-se então, as quantidades de interesse

$$\phi(y) = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_{xk} [\Psi_x(y, \Omega_k) + \Psi_x(y, \Omega_{k+M/2})] \quad (5.30)$$

e

$$J_y = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{M/2} \eta_{xk} w_{xk} \Psi_x(y, \Omega_k). \quad (5.31)$$

Para estas equações unidimensionais nodais, busca-se então soluções através da aplicação do método ADO, primeiramente para as equações unidimensionais nodais em x e, na seção seguinte, para as equações unidimensionais nodais em y . A obtenção das soluções segue o desenvolvimento apresentado no capítulo anterior, assim os procedimentos descritos a seguir são mais resumidos, destacando-se mais a forma das equações resultantes nesta nova abordagem.

5.2 Solução do problema unidimensional em x pelo método ADO

A solução geral das equações (5.7) – (5.10), escrita na forma

$$\Psi_y(x, \Omega_m) = \Psi_y^h(x, \Omega_m) + \Psi_y^p(x, \Omega_m), \quad (5.32)$$

é abordada nessa seção, iniciando-se pela determinação da solução homogênea $\Psi_y^h(x, \Omega_m)$ e descrevendo-se depois a forma da solução particular $\Psi_y^p(x, \Omega_m)$.

5.2.1 Solução homogênea

Propondo-se soluções do tipo exponenciais para $\Psi_y^h(x, \Omega_m)$, obtém-se o seguinte conjunto de M equações

$$-\frac{\mu_{ym}}{\nu_y} \Phi_y(\nu, \Omega_m) + \sigma_t \Phi_y(\nu, \Omega_m) = Q, \quad (5.33)$$

$$\frac{\mu_{y, m + \frac{M}{2}}}{\nu_y} \Phi_y(\nu, \Omega_{m + \frac{M}{4}}) + \sigma_t \Phi_y(\nu, \Omega_{m + \frac{M}{2}}) = Q, \quad (5.34)$$

onde $m = 1, \dots, M/2$ e Q é definido pela expressão

$$Q = \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_{yk} [\Phi_y(\nu, \Omega_k) + \Phi_y(\nu, \Omega_{k + \frac{M}{2}})]. \quad (5.35)$$

A partir da soma e da subtração dessas equações, obtém-se, respectivamente

$$V_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{\nu_y \sigma_t}{\mu_{ym}} U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m) - \frac{\nu_y \sigma_s}{2\mu_{ym}} \sum_{k=1}^{M/2} w_{yk} U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_k), \quad (5.36)$$

$$\frac{\sigma_t^2}{\mu_{ym}^2} U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m) - \frac{\sigma_s \sigma_t}{2 \mu_{ym}^2} \sum_{k=1}^{M/2} w_{yk} U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_k) = \lambda_y U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m), \quad (5.37)$$

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

$$\lambda_y = \frac{1}{\nu_y^2}. \quad (5.38)$$

Avaliando-se as equações (5.37) em $m = 1, \dots, M/2$ e considerando-se o vetor \mathbf{U}_y , de dimensão $M/2 \times 1$, com componentes $U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m)$, obtém-se o problema de autovalor

$$[\mathbf{D}_y - \mathbf{A}_y] \mathbf{U}_y = \lambda_y \mathbf{U}_y, \quad (5.39)$$

onde \mathbf{D}_y e \mathbf{A}_y são matrizes de ordem $M/2 \times M/2$. A matriz \mathbf{D}_y é definida por

$$\mathbf{D}_y = \text{diag} \left\{ \frac{\sigma_t^2}{\mu_{y1}^2}, \frac{\sigma_t^2}{\mu_{y2}^2}, \frac{\sigma_t^2}{\mu_{y3}^2}, \dots, \frac{\sigma_t^2}{\mu_{y,M/2}^2} \right\} \quad (5.40)$$

e \mathbf{A}_x tem componentes da forma

$$a(i, j) = \frac{w_{yj} \sigma_s \sigma_t}{2 \mu_{yi}^2}, \quad i, j = 1, \dots, M/2. \quad (5.41)$$

Resolvido o problema de autovalor (5.39), obtém-se então $\{\lambda_{yj}, \mathbf{U}_{yj}\}$, para $j = 1, \dots, M/2$, que são os respectivos autovalores e autovetores do problema e determina-se assim as autofunções

$$\Phi_y(\nu_j, \Omega_m) = \frac{U_y(\nu_j, \Omega_m) + V_y(\nu_j, \Omega_m)}{2}, \quad (5.42)$$

$$\Phi_y(\nu_j, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) = \frac{U_y(\nu_j, \Omega_m) - V_y(\nu_j, \Omega_m)}{2}, \quad (5.43)$$

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

As constantes de separação ν_{xj} , são obtidas a partir da equação (5.38) e como elas ocorrem aos pares $\pm \nu_{yj}$, toma-se somente os valores positivos e escreve-se

a solução homogênea das equações (5.7) – (5.10) na forma

$$\Psi_y^h(x, \Omega_m) = \sum_{j=1}^{M/2} A_{yj} \Phi_y(\nu_j, \Omega_m) e^{-(a+x)/\nu_{yj}} + B_{yj} \Phi_y(\nu_j, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) e^{-(a-x)/\nu_{yj}}, \quad (5.44)$$

$$\Psi_y^h(x, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) = \sum_{j=1}^{M/2} A_{yj} \Phi_y(\nu_j, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) e^{-(a+x)/\nu_{yj}} + B_{yj} \Phi_y(\nu_j, \Omega_m) e^{-(a-x)/\nu_{yj}}, \quad (5.45)$$

para $m = 1, \dots, M/2$, onde os coeficientes A_{xj} e B_{xj} precisam ser determinados.

5.2.2 Solução particular

Seguindo-se [8, 64] e busca-se aqui uma solução particular para as equações (5.7) – (5.10) em termos das autofunções do problema homogêneo, na forma

$$\Psi_y^p(x, \Omega_m) = \sum_{j=1}^{M/2} \mathcal{A}_j(x) \Phi_x(\nu_j, \Omega_m) + \mathcal{B}_j(x) \Phi_x(\nu_j, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) \quad (5.46)$$

e

$$\Psi_y^p(x, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) = \sum_{j=1}^{M/2} \mathcal{A}_j(x) \Phi_x(\nu_j, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) + \mathcal{B}_j(x) \Phi_x(\nu_j, \Omega_m), \quad (5.47)$$

onde

$$\begin{aligned} \mathcal{A}_j(x) = \frac{1}{N_y(\nu_j)} \int_{-a}^x \sum_{\alpha=1}^{M/2} w_{y\alpha} [Q(\tau, \Omega_\alpha) \Phi_y(\nu_j, \Omega_\alpha) + \\ Q(\tau, \Omega_{\alpha+M/2}) \Phi_y(\nu_j, \Omega_{\alpha+M/2})] e^{-(x-\tau)/\nu_{yj}} d\tau, \end{aligned} \quad (5.48)$$

$$\begin{aligned} \mathcal{B}_j(x) = \frac{1}{N_y(\nu_j)} \int_x^a \sum_{\alpha=1}^{M/2} w_{y\alpha} [Q(\tau, \Omega_\alpha) \Phi_y(\nu_j, \Omega_{\alpha+M/2}) + \\ Q(\tau, \Omega_{\alpha+M/2}) \Phi_y(\nu_j, \Omega_\alpha)] e^{-(\tau-x)/\nu_{yj}} d\tau, \end{aligned} \quad (5.49)$$

$$N_y(\nu_j) = \sum_{k=1}^{M/2} w_{yk} \mu_{yk} [\Phi_y^2(\nu_j, \Omega_k) - \Phi_y^2(\nu_j, \Omega_{m+\frac{M}{2}})]. \quad (5.50)$$

Observa-se que, para o problema formulado, agora a fonte é dependente também da direção

$$Q(x, \Omega_m) = \begin{cases} Q_y(x) - \frac{k_m \eta_{ym}}{2b}, & m = 1, \dots, M/4 \\ Q_y(x) + \frac{k_m \eta_{ym}}{2b}, & m = (M/4 + 1), \dots, M/2 \\ Q_y(x) - \frac{k_m \eta_{ym}}{2b}, & m = (M/2 + 1), \dots, 3M/4 \\ Q_y(x) + \frac{k_m \eta_{ym}}{2b}, & m = 3M/4 + 1, \dots, M. \end{cases}$$

onde $Q_y(x)$ foi definida em (3.28).

Ressalta-se que, neste ponto, os parâmetros k_m , $m = 1, \dots, M$, ainda estão indefinidos. Dessa forma, as expressões obtidas para a solução homogênea, apresentadas em (5.44) e (5.45), e para a solução particular, em (5.46) e (5.47), não estão completamente definidas, pois os coeficientes da solução homogênea A_{yj} e B_{yj} , precisam ser determinados, bem como as aproximações k_m , presentes na solução particular, para $j = 1, \dots, M/2$ e $k = 1, \dots, M$. Assim, neste ponto, têm-se $2M$ constantes desconhecidas.

Como as condições de contorno (5.13) e (5.14) fornecem M condições, outras M são necessárias para que estes M termos sejam determinados. Aborda-se essa questão na última seção desse capítulo, após a apresentação da forma da solução das equações unidimensionais nodais na variável y , obtida na próxima secção.

5.3 Solução do problema unidimensional em y pelo método ADO

Nesta seção, mantém-se o mesmo desenvolvimento anterior, iniciando-se pela determinação da solução homogênea $\Psi_x^h(y, \Omega_m)$ e descrevendo-se depois a forma da solução particular $\Psi_x^p(y, \Omega_m)$, que compõem a solução geral das equações (5.22) – (5.25), que pode ser escrita na forma

$$\Psi_x(y, \Omega_m) = \Psi_x^h(y, \Omega_m) + \Psi_x^p(y, \Omega_m). \quad (5.51)$$

5.3.1 Solução homogênea

Propondo-se soluções exponenciais para o fluxo integrado

$$\Psi_x(y, \Omega_m)^h = \Phi_x(\nu, \Omega_m) e^{-y/\nu_x}, \quad (5.52)$$

substitui-se a equação (5.52) na versão homogênea das equações (5.22) – (5.25), obtém-se para $m = 1, \dots, M/2$

$$-\frac{\eta_{xm}}{\nu_x} \Phi_x(\nu, \Omega_m) + \sigma_t \Phi_x(\nu, \Omega_m) = \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_{xk} [\Phi_x(\nu, \Omega_k) + \Phi_x(\nu, \Omega_{k+\frac{M}{2}})], \quad (5.53)$$

$$\frac{\eta_{x, m+\frac{M}{2}}}{\nu_x} \Phi_x(\nu, \Omega_{m+\frac{M}{4}}) + \sigma_t \Phi_x(\nu, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) = \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_{xk} [\Phi_x(\nu, \Omega_k) + \Phi_x(\nu, \Omega_{k+\frac{M}{2}})]. \quad (5.54)$$

Somando-se a equação (5.53) com a (5.54), para $m = 1, \dots, M/2$, obtém-se

$$-\frac{\eta_{xm}}{\nu_x} V_x(\nu, \mathbf{\Omega}_m) + \sigma_t U_x(\nu, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{\sigma_s}{2} \sum_{k=1}^{M/2} w_{xk} U_x(\nu, \mathbf{\Omega}_k). \quad (5.55)$$

Agora diminuindo a equação (5.54) da (5.53), para $m = 1, \dots, M/2$ obtém-se

$$-\frac{\eta_{xm}}{\nu_x} U_x(\nu, \mathbf{\Omega}_m) + \sigma_t V_x(\nu, \mathbf{\Omega}_m) = 0. \quad (5.56)$$

Substituindo-se $V_x(\nu, \mathbf{\Omega}_m)$, obtido da equação (5.55), na equação (5.56), obtém-se

$$\frac{\sigma_t^2}{\eta_{xm}^2} U_x(\nu, \mathbf{\Omega}_m) - \frac{\sigma_s \sigma_t}{2 \eta_{xm}^2} \sum_{k=1}^{M/2} w_{xk} U_x(\nu, \mathbf{\Omega}_k) = \lambda_x U_x(\nu, \mathbf{\Omega}_m), \quad (5.57)$$

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

$$\lambda_x = \frac{1}{\nu_x^2}. \quad (5.58)$$

Avaliando-se as equações (5.57) em $m = 1, \dots, M/2$ e considerando-se o vetor \mathbf{U}_x , de dimensão $M/2 \times 1$, com componentes $U_x(\nu, \mathbf{\Omega}_m)$, obtém-se o problema de autovalor

$$[\mathbf{D}_x - \mathbf{A}_x] \mathbf{U}_x = \lambda_x \mathbf{U}_x, \quad (5.59)$$

onde \mathbf{D}_x e \mathbf{A}_x são matrizes de ordem $M/2 \times M/2$. A matriz \mathbf{D}_x é definida por

$$\mathbf{D}_x = \text{diag} \left\{ \frac{\sigma_t^2}{\eta_{x1}^2}, \frac{\sigma_t^2}{\eta_{x2}^2}, \frac{\sigma_t^2}{\eta_{x3}^2}, \dots, \frac{\sigma_t^2}{\eta_{x,M/2}^2} \right\} \quad (5.60)$$

e \mathbf{A}_x tem componentes da forma

$$a(i, j) = \frac{w_{xj} \sigma_s \sigma_t}{2 \eta_{xi}^2}, \quad i, j = 1, \dots, M/2. \quad (5.61)$$

Resolvido o problema de autovalor (5.59), obtém-se então $\{\lambda_{xj}, \mathbf{U}_{xj}\}$, para $j = 1, \dots, M/2$, que são os respectivos autovalores e autovetores do problema, ficando assim determinadas as constantes de separação ν_{xj} e as autofunções $\Phi_x(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m)$, $m = 1, \dots, M$.

Escreve-se a solução homogênea das equações (5.22) – (5.25) na forma

$$\Psi_x^h(y, \mathbf{\Omega}_m) = \sum_{j=1}^{M/2} A_{xj} \Phi_x(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(b+y)/\nu_{xj}} + B_{xj} \Phi_x(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{2}}) e^{-(b-y)/\nu_{xj}}, \quad (5.62)$$

$$\Psi_x^h(y, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{2}}) = \sum_{j=1}^{M/2} A_{xj} \Phi_x(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+\frac{M}{2}}) e^{-(b+y)/\nu_{xj}} + B_{xj} \Phi_x(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(b-y)/\nu_{xj}}, \quad (5.63)$$

para $m = 1, \dots, M/2$, onde os coeficientes A_{xj} e B_{xj} ainda são indeterminados.

5.3.2 Solução particular

Considera-se então a solução particular para as equações (5.22) – (5.25)

na forma

$$\Psi_x^p(y, \Omega_m) = \sum_{j=1}^{M/2} \mathcal{A}_j(y) \Phi_x(\nu_j, \Omega_m) + \mathcal{B}_j(y) \Phi_x(\nu_j, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) \quad (5.64)$$

e

$$\Psi_x^p(y, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) = \sum_{j=1}^{M/2} \mathcal{A}_j(y) \Phi_x(\nu_j, \Omega_{m+\frac{M}{2}}) + \mathcal{B}_j(y) \Phi_x(\nu_j, \Omega_m), \quad (5.65)$$

onde os coeficientes $\mathcal{A}_j(y)$, $\mathcal{B}_j(y)$ e $N_y(\nu_j)$, possuem expressões análogas às anteriormente definidas nas equações (5.48) – (5.50).

Observa-se que, para o problema formulado, a fonte é definida por

$$Q(y, \Omega_m) = Q_x(y) + \mathcal{K}_m, \quad (5.66)$$

onde $Q_x(y)$ foi definida em (3.34) e

$$\mathcal{K}_m = -\frac{\kappa_m \mu_{xm}}{2b}, \quad (5.67)$$

para $m = 1, \dots, M/4$ e $m = (M/2 + 1), \dots, 3M/4$,

$$\mathcal{K}_m = \frac{\kappa_m \mu_{xm}}{2b} \quad (5.68)$$

para $m = (M/4 + 1), \dots, M/2$ e $m = (3M/4 + 1), \dots, M$.

Observa-se aqui também, que as expressões para a solução homogênea, apresentadas em (5.62) e (5.63), e para a solução particular, em (5.64) e (5.65), não estão completamente definidas. Os coeficientes da solução homogênea A_{yj} e B_{yj} , bem como as aproximações κ_m , presentes na solução particular, para $j = 1, \dots, M/2$ e $\kappa = 1, \dots, M$, necessitam ser determinados.

Das condições de contorno (5.28) e (5.29), têm-se M condições, outras M serão então necessárias para que também estes outros M termos sejam determinados. Na próxima seção, então apresenta-se as condições auxiliares e a determinação desses termos.

5.4 Determinação dos coeficientes da solução homogênea e dos parâmetros das aproximações

Das condições de contornos associadas às equações unidimensionais nodais em x , (5.13) e (5.14), e das condições de contornos associadas às equações unidimensionais nodais em y , (5.28) e (5.29), têm-se $2M$ condições prescritas

$$\Psi_y(-a, \Omega_m) = 0, \quad m = 1, \dots, M/2 \tag{5.69}$$

$$\Psi_y(a, \Omega_m) = 0, \quad m = (M/2 + 1), \dots, M \tag{5.70}$$

$$\Psi_x(-b, \Omega_m) = 0, \quad m = 1, \dots, M/2 \tag{5.71}$$

$$\Psi_x(b, \Omega_m) = 0, \quad m = (M/2 + 1), \dots, M. \tag{5.72}$$

As aproximações propostas

$$\Psi(x, y_\omega, \Omega_m) \approx k_m \quad (5.73)$$

e

$$\Psi(x_\omega, y, \Omega_m) \approx \kappa_m, \quad (5.74)$$

considerando-se Ω_m como as direções de saída do fluxo em cada fronteira, sugerem que nos pontos (a, b) , $(a, -b)$, $(-a, b)$ e $(-a, -b)$ os fluxos sejam iguais nas mesmas direções Ω_m de saída. Observando-se, por exemplo, o caso em que $x = a$ e $y = b$. A representação dessas duas fronteiras e das direções Ω_m , para $m = 1, \dots, M/4$, da quadratura S_N , é apresentada na figura 5.1.

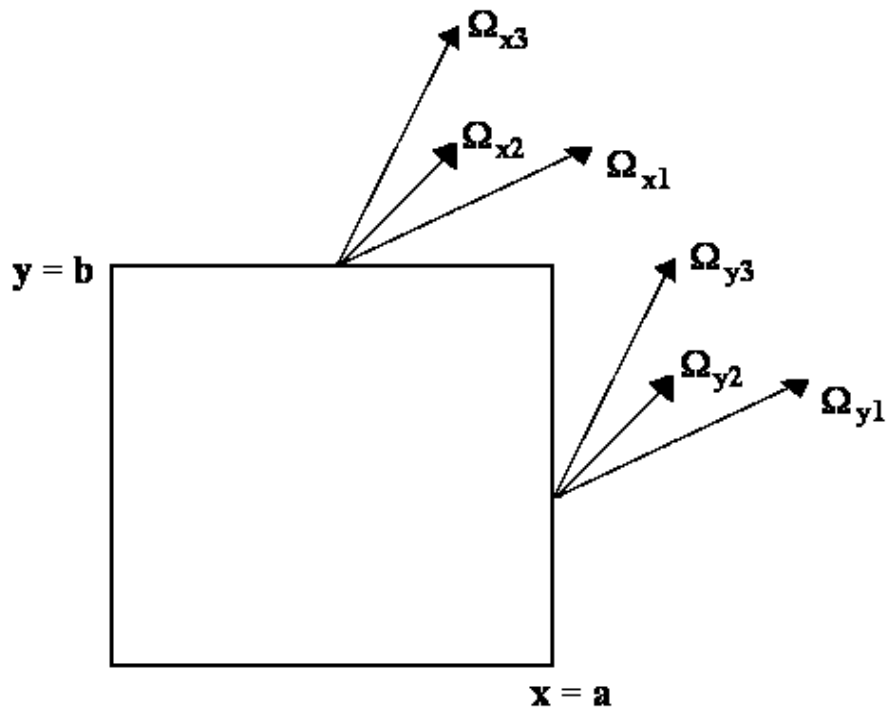


Figura 5.1: Direções de saída do fluxo, para $m = 1, \dots, M/4$, da quadratura S_4

Substituindo-se então $x = a$, na equação (5.73) e $y = b$, na equação (5.74), tem-se

$$\Psi(a, b, \Omega_{xm}) \approx k_m \tag{5.75}$$

e

$$\Psi(a, b, \Omega_{ym}) \approx \kappa_m, \tag{5.76}$$

para direções $m = 1, \dots, M/4$.

Como para $m = 1, \dots, M/4$ os fluxos devem ser iguais

$$\Psi(a, b, \Omega_{xm}) = \Psi(a, b, \Omega_{ym}) \tag{5.77}$$

segue-se que, nessas mesmas direções

$$k_m = \kappa_m. \tag{5.78}$$

De forma semelhante, analisando-se os outros pontos da fronteira, conclui-se que a igualdade obtida na equação (5.78), é válida para $m = 1, \dots, M$.

Para obter-se condições auxiliares, exige-se que a aproximação (5.73), nas direções em que o fluxo é desconhecido, satisfaça então a expressão para o fluxo integrado no contorno $x = -a$

$$\Psi_x(y, \Omega_m) = \frac{1}{2a} \int_{-a}^a \Psi(-a, y, \Omega_m) dx = \kappa_m \tag{5.79}$$

e também em $x = a$

$$\Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{1}{2a} \int_{-a}^a \Psi(a, y, \mathbf{\Omega}_m) dx = \kappa_m. \quad (5.80)$$

Da mesma forma, agora exigindo-se que a aproximação (5.74), nas direções em que o fluxo é desconhecido no contorno $y = -b$, satisfaça

$$\Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{1}{2b} \int_{-b}^b \Psi(x, -b, \mathbf{\Omega}_m) dy = k_m, \quad (5.81)$$

e também no contorno $y = b$

$$\Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{1}{2b} \int_{-b}^b \Psi(x, b, \mathbf{\Omega}_m) dy = k_m. \quad (5.82)$$

Para o caso representado na figura 5.1, com $m = 1, \dots, M/4$, das equações (5.80) e (5.82), obtém -se

$$\Psi_x(b, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{1}{2a} \int_{-a}^a \Psi(a, b, \mathbf{\Omega}_m) dx = \kappa_m, \quad (5.83)$$

$$\Psi_y(a, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{1}{2b} \int_{-b}^b \Psi(a, b, \mathbf{\Omega}_m) dy = k_m. \quad (5.84)$$

Como $k_m = \kappa_m$, $m = 1, \dots, M/4$, segue-se que

$$\Psi_x(b, \mathbf{\Omega}_m) = \Psi_y(a, \mathbf{\Omega}_m). \quad (5.85)$$

A equação (5.85) define então $M/4$ condições auxiliares. Outras $3M/4$ equações são obtidas por raciocínio análogo ao desenvolvido para o caso em que $x = a$ e $y = b$. Assim para determinação dos coeficientes da solução homogênea do problema em x , A_{yj} e B_{yj} , dos coeficientes da solução homogênea do problema em y , A_{xj} e B_{xj} e dos parâmetros $k_j = \gamma_j$, para $j = 1, \dots, M$ utiliza-se as $3M$ condições definidas por

$$\Psi_y(-a, \Omega_m) = 0, \quad (5.86)$$

$$\Psi_y(a, \Omega_{m+M/2}) = 0, \quad (5.87)$$

$$\Psi_x(-b, \Omega_m) = 0, \quad (5.88)$$

$$\Psi_x(b, \Omega_{m+M/2}) = 0, \quad (5.89)$$

considerando-se $m = 1, \dots, M/2$ e

$$\Psi_x(b, \Omega_m) = \Psi_y(a, \Omega_m), \quad (5.90)$$

$$\Psi_x(-b, \Omega_{m+3M/4}) = \Psi_y(-a, \Omega_{m+M/4}), \quad (5.91)$$

$$\Psi_x(-b, \Omega_{m+3M/4}) = \Psi_y(-a, \Omega_{m+3M/4}), \quad (5.92)$$

$$\Psi_x(b, \Omega_{m+M/4}) = \Psi_y(-a, \Omega_{m+M/2}), \quad (5.93)$$

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

Substituindo-se então, nas equações (5.86) – (5.93), as soluções gerais (5.32) e (5.51), obtém-se um sistema de $3M$ equações. Resolvido esse sistema, a solução geral das equações unidimensionais nodais ficam então completamente definidas. Os aspectos computacionais dessa solução, bem como do capítulo anterior, são apresentados a seguir, juntamente com os resultados numéricos obtidos através da solução de problemas testes.

6 RESULTADOS NUMÉRICOS

Nos capítulos anteriores, duas abordagens, ambas baseadas na aplicação do método ADO, foram definidas para solução da equação de transporte de nêutrons bidimensional (3.1), associada às condições de contorno (3.2) – (3.5). Aqui, apresenta-se os resultados numéricos para essas duas formulações.

Inicialmente, descreve-se então, de forma geral, os procedimentos computacionais utilizados para obtenção dos resultados numéricos. Como eles são os mesmos para as duas abordagens, utiliza-se nessa descrição, como referência, as equações da seção 4.2. Logo após, divide-se a apresentação dos resultados em duas seções: uma para os resultados numéricos obtidos pela abordagem descrita no capítulo 4, onde aproximou-se o fluxo desconhecido no contorno pelo fluxo integrado, que trataremos como sendo a primeira abordagem; na outra, apresenta-se os resultados obtidos pela aplicação da abordagem definida no capítulo 5, onde o fluxo desconhecido no contorno é considerado constante em cada direção, considerado então como a segunda abordagem.

Dois problemas testes serão considerados, a fim de se validar a aplicação do método ADO na solução das duas abordagens propostas:

- PROBLEMA 1: a placa é quadrada, com $a = b = 20\text{cm}$ e existe uma fonte unitária, $Q = 1.0$, no intervalo $[-1.0, 1.0] \times [-1.0, 1.0]$. O valor da seção de choque total é $\sigma_t = 1.0\text{cm}^{-1}$ e para a seção de choque de espalhamento, utiliza-se $\sigma_s = 0.1\text{cm}^{-1}$, 0.5cm^{-1} e 0.99cm^{-1} . Este problema foi abordado por Biasotto [44] e os resultados são utilizados para comparação com os aqui obtidos.
- PROBLEMA 2: este problema foi abordado por Tsai e Loyalka [80] e apresenta resultados para o fluxo escalar de nêutrons. Considera-se aqui $a = b = 1.0$ como sendo as dimensões da placa, uma fonte também

unitária encontra-se no intervalo $[-0.52, 0.52] \times [-0.52, 0.52]$ e o valor da seção de choque total é $\sigma_t = 1.0$. Resultados serão gerados para três valores da seção de choque de espalhamento: $\sigma_s = 0.5, 0.1$ e 0.05 .

As quantidades de interesse que deseja-se avaliar são fuga de nêutrons, para o problema 1 e fluxo escalar para o problema 2.

6.1 Descrição geral

A definição do esquema de quadratura é o primeiro procedimento em uma solução em ordenadas discretas. Como comentado anteriormente, quadraturas de nível simétrica têm sido muito utilizadas na discretização angular de problemas bidimensionais de transporte, assim seguiu-se a Ref. [53] e adotou-se trabalhar com a quadratura S_N , já apresentada no Anexo A deste trabalho.

Tendo definido o esquema de quadratura e desenvolvendo-se a implementação da solução em ordenadas discretas em FORTRAN, resolve-se o problema de autovalor associado a cada equação nodal unidimensional, (4.45) para o problema em x , usando-se a subrotina RG, do pacote matemático EISPACK [76], obtendo-se assim os autovalores λ e os autovetores \mathbf{U} . A seguir, determina-se as constantes de separação ν_j , $j = 1, \dots, M/2$, pela Eq. (4.44) e as autofunções $\Phi(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m)$, pela Eq. (4.47), para $m = 1, \dots, M/2$ e pela Eq. (4.48), para $m = (M/2 + 1), \dots, M$.

Para que a solução em ordenadas discretas, descrita pelas equações (4.57) – (4.62), esteja completamente definida, resolve-se o sistema linear definido nas Eqs. (4.65) – (4.70), para se determinar os coeficientes $A_j, B_j, C_j, D_j, E_j, F_j$, $j = 1, \dots, M/2$, da solução homogênea, usando-se as subrotinas DGECO e DGESL do pacote matemático LINPACK [30].

Pode-se então avaliar as quantidades de interesse: fluxo escalar, definido pela Eq. (3.29) e fuga de nêutrons, dada na Eq. (3.30).

A solução geral das equações nodais unidimensionais em y , definida pelas equações (4.94) – (4.99,) bem como a solução geral das equações definidas no capítulo 5, são obtidas desenvolvendo-se os mesmos procedimentos aqui descritos. Assim, apresenta-se a partir de agora os resultados numéricos obtidos.

6.2 Primeira abordagem: aproximação pelo fluxo médio

Apresenta-se aqui, resultados obtidos a partir da formulação matemática desenvolvida no capítulo 4. Nessa abordagem, o valor dos parâmetros k_1 , k_2 , utilizados nas aproximações (4.5) e (4.6) e γ_1 e γ_2 , nas aproximações (4.18) e (4.19) são estimados *a priori*. Feita a estimativa, aspectos computacionais, como condicionamento do sistema, convergência ou obtenção de autovalores reais, foram observados para avaliar-se a consistência da estimativa realizada.

Os resultados numéricos para o problema 1 e para o problema 2 são apresentados, respectivamente, nas duas subseções seguintes.

6.2.1 Resultados numéricos para o problema 1

Nesse problema, a quantidade de interesse avaliada é a fuga de nêutrons, avaliada pela equação (3.30), resolvido o problema na variável x

$$J_x = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{M/2} \mu_k w_k \Psi_y(x, \Omega_k) \quad (6.1)$$

e pela equação (3.36)

$$J_y = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{M/2} \eta_k w_k \Psi_x(y, \Omega_k) \quad (6.2)$$

ao resolver-se o problema dependente de y .

Em analogia a nomenclatura utilizada por alguns autores [13, 44], avalia-se a quantidade

$$J_N = J_x + J_y \quad (6.3)$$

substituindo-se $x = a$ na equação (6.1) e $y = b$ na equação (6.2). Usualmente, em teoria de transporte, J_x e J_y , são chamadas de fugas parciais e J como fuga de nêutrons, nomenclatura que adota-se então a partir daqui. O termo J_N indica assim a fuga de nêutrons avaliada para uma aproximação S_N .

Assim, inicialmente, apresenta-se nas tabelas (6.1) – (6.6) resultados para a fuga de nêutrons J_N , obtidos variando-se a aproximação S_N , as seções de choque de espalhamento e os valores dos parâmetros, onde utiliza-se sempre $k_1 = \gamma_1$, $k_2 = \gamma_2$.

Analisando-se estes resultados, observa-se a concordância de dois a três dígitos entre os resultados para uma mesma seção de choque de espalhamento, à medida que N aumenta, se $0 < k_j < 1$, $j = 1, 2$. Esta mesma convergência não se mantém para $k_j > 1$, $j = 1, 2$, conforme se observa na tabelas (6.4) – (6.6), levando-nos a considerar que obtém-se melhor convergência ao estimar-se $k_j < 1$.

Considerando que o coeficiente de absorção é determinado por

$$\sigma_a = \sigma_t - \sigma_s, \quad (6.4)$$

nota-se também, que para todos os casos indicados nas tabelas (6.1) – (6.6), com exceção do problema de baixa absorção ($\sigma_s = 0.99$ e portanto $\sigma_a = 0.01$), obtém-se resultados que concordam em pelo menos um dígito, para uma mesma seção de choque de espalhamento σ_s , independente da escolha dos parâmetros k , novamente quando escolhe-se $k_j < 1$.

Tabela 6.1: Fuga de nêutrons J_N , problema 1, $k_1 = k_2 = 0.1$

S_N	$\sigma_s = 0.1$	$\sigma_s = 0.5$	$\sigma_s = 0.99$
S_4	0.1379(-10)	0.4155(-9)	0.9036(-2)
S_6	0.2633(-10)	0.4867(-9)	0.9060(-2)
S_8	0.3144(-10)	0.5125(-9)	0.9072(-2)
S_{12}	0.3226(-10)	0.5138(-9)	0.9082(-2)
S_{16}	0.3225(-10)	0.5137(-9)	0.9085(-2)

Tabela 6.2: Fuga de nêutrons J_N , problema 1, $k_1 = k_2 = 0.5$

S_N	$\sigma_s = 0.1$	$\sigma_s = 0.5$	$\sigma_s = 0.99$
S_4	0.1273(-10)	0.3763(-9)	0.4117(-2)
S_6	0.2483(-10)	0.4475(-9)	0.4182(-2)
S_8	0.2995(-10)	0.4743(-9)	0.4215(-2)
S_{12}	0.3093(-10)	0.4771(-9)	0.4240(-2)
S_{16}	0.3097(-10)	0.4775(-9)	0.4251(-2)

Tabela 6.3: Fuga de nêutrons J_N , problema 1, $k_1 = 0.1$, $k_2 = 0.5$

S_N	$\sigma_s = 0.1$	$\sigma_s = 0.5$	$\sigma_s = 0.99$
S_4	0.1326(-10)	0.3955(-9)	0.5991(-2)
S_6	0.2558(-10)	0.4668(-9)	0.6050(-2)
S_8	0.3069(-10)	0.4931(-9)	0.6079(-2)
S_{12}	0.3159(-10)	0.4952(-9)	0.6102(-2)
S_{16}	0.3161(-10)	0.4953(-9)	0.6111(-2)

Tabela 6.4: Fuga de nêutrons J_N , problema 1, $k_1 = k_2 = 2.0$

S_N	$\sigma_s = 0.1$	$\sigma_s = 0.5$	$\sigma_s = 0.99$
S_4	0.9426(-11)	0.2604(-9)	0.4803(-3)
S_6	0.1994(-10)	0.3284(-9)	0.5046(-3)
S_8	0.2499(-10)	0.3573(-9)	0.5168(-3)
S_{12}	0.2650(-10)	0.3646(-9)	0.5264(-3)
S_{16}	0.2676(-10)	0.3667(-9)	0.5306(-3)

Tabela 6.5: Fuga de nêutrons J_N , problema 1, $k_1 = k_2 = 20.0$

S_N	$\sigma_s = 0.1$	$\sigma_s = 0.5$	$\sigma_s = 0.99$
S_4	0.2602(-12)	0.4253(-11)	0.1074(-7)
S_6	0.1485(-11)	0.1270(-10)	0.1749(-7)
S_8	0.3055(-11)	0.2105(-10)	0.2223(-7)
S_{12}	0.5014(-11)	0.2993(-10)	0.2646(-7)
S_{16}	0.6138(-11)	0.3469(-10)	0.2849(-7)

Tabela 6.6: Fuga de nêutrons J_N , problema 1, $k_1 = 10.0, k_2 = 20.0$

S_N	$\sigma_s = 0.1$	$\sigma_s = 0.5$	$\sigma_s = 0.99$
S_4	0.1029(-11)	0.1607(-10)	0.1001(-6)
S_6	0.3779(-11)	0.3448(-10)	0.1373(-6)
S_8	0.6288(-11)	0.4837(-10)	0.1602(-6)
S_{12}	0.8567(-11)	0.5972(-10)	0.1794(-6)
S_{16}	0.9639(-11)	0.6500(-10)	0.1882(-6)

Com a finalidade de compararmos os resultados com outros existentes na literatura, segue-se a referência [44] e calcula-se a fuga de nêutrons na região $[16, 20] \times [16, 20]$, definida por

$$J_N = J_x + J_y \quad (6.5)$$

onde J_x e J_y são agora definidos, respectivamente por

$$J_x = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}_1 \cdot \boldsymbol{\Omega}_k > 0} \eta_k w_k \int_{16}^{20} \Psi(20, y, \boldsymbol{\Omega}_k) dy \quad (6.6)$$

e

$$J_y = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}_2 \cdot \boldsymbol{\Omega}_k > 0} \mu_k w_k \int_{16}^{20} \Psi(x, 20, \boldsymbol{\Omega}_k) dx. \quad (6.7)$$

onde \mathbf{n}_1 é um vetor unitário apontando na direção de saída do fluxo na fronteira $x = a$ e \mathbf{n}_2 é um vetor unitário apontando na direção de saída do fluxo na fronteira $y = b$. Usando-se as aproximações para os fluxos desconhecidos nos contornos

$$\Psi(20, y, \boldsymbol{\Omega}_k) \approx \gamma_1 \Psi_x(y, \boldsymbol{\Omega}_k), \quad (6.8)$$

$$\Psi(x, 20, \boldsymbol{\Omega}_k) \approx k_1 \Psi_y(x, \boldsymbol{\Omega}_k), \quad (6.9)$$

a partir das equações (6.6) e (6.7), obtém-se, respectivamente

$$J_x = \frac{\gamma_1}{2} \sum_{k=1}^{M/4} \eta_{yk} w_{yk} \int_{16}^{20} [\Psi_x(y, \boldsymbol{\Omega}_k) + \Psi_x(y, \boldsymbol{\Omega}_{k+\frac{M}{2}})] dy \quad (6.10)$$

e

$$J_y = \frac{k_1}{2} \sum_{k=1}^{M/4} \mu_{xk} w_{xk} \int_{16}^{20} [\Psi_y(x, \boldsymbol{\Omega}_k) + \Psi_y(x, \boldsymbol{\Omega}_{k+\frac{M}{2}})] dx. \quad (6.11)$$

Assim apresenta-se nas tabelas (6.7) – (6.10), os resultados obtidos para a fuga de nêutrons, avaliados a partir das equações (6.10) – (6.11), comparando-se com outros resultados apresentados na literatura. Inicialmente, nas tabelas (6.7) e (6.8), compara-se os resultados obtidos por Hauser [44], que aplica o método LTS_N , baseado no uso da transformada de Laplace, para resolver as equações nodais unidimensionais em ordenadas discretas. Por utilizar um método de diagonalização de matrizes e aproximações para os fluxos desconhecidos no contorno por combinação linear de autovetores e exponenciais dos respectivos autovalores, denominou-o $LTS_N2D - Diag$. Posteriormente, utilizando aproximações por exponenciais, denomina-o $LTS_N2D - DiagExp$.

Tabela 6.7: Fuga de nêutrons J_N , problema 1, $\sigma_s = 0.5$

N	LTS_n2D -DiagExp		Método ADO		
	λ	J_N	k_1	k_2	J_N
4	σ_a	0.2497(-11)	1.0(-3)	1.0(-3)	0.1267(-10)
	L^{-1}	0.1422(-10)	2.5(-4)	2.5(-4)	0.3167(-11)
	$1/\rho(A)$	0.3597(-11)	1.0(-4)	1.0(-4)	0.1267(-11)
6	σ_a	0.2147(-11)	1.0(-3)	1.0(-3)	0.1399(-10)
	L^{-1}	0.9122(-11)	2.5(-4)	2.5(-4)	0.3498(-11)
	$1/\rho(A)$	0.3410(-11)	1.0(-4)	1.0(-4)	0.1399(-11)
8	σ_a	0.1489(-11)	1.0(-3)	1.0(-3)	0.1442(-10)
	L^{-1}	0.2883(-11)	2.5(-4)	2.5(-4)	0.3605(-11)
	$1/\rho(A)$	0.1863(-11)	1.0(-4)	1.0(-4)	0.1442(-11)
12	σ_a	0.1417(-11)	1.0(-3)	1.0(-3)	0.1438(-10)
	L^{-1}	0.2735(-11)	2.5(-4)	2.5(-4)	0.3596(-11)
	$1/\rho(A)$	0.1825(-11)	1.0(-4)	1.0(-4)	0.1438(-11)
16			1.0(-3)	1.0(-3)	0.1436(-10)
			2.5(-4)	2.5(-4)	0.3592(-11)
			1.0(-4)	1.0(-4)	0.1437(-11)
$LTS_42D - Diag$		0.3141(-5)			

Tabela 6.8: Fuga de nêutrons J_N , problema 1, $\sigma_s = 0.99$

N	<i>LTS_n2D-DiagExp</i>		Método ADO		
	λ	J_N	k_1	k_2	J_N
4	σ_a	0.1177(-1)	0.05	0.05	0.4464(-2)
	L^{-1}	0.3531(-1)	0.15	0.15	0.1084(-2)
	$1/\rho(A)$	0.1208(-1)	0.50	0.50	0.1875(-1)
6	σ_a	0.5478(-2)	0.05	0.05	0.4403(-2)
	L^{-1}	0.5289(-2)	0.15	0.15	0.1073(-2)
	$1/\rho(A)$	0.6777(-2)	0.50	0.50	0.1877(-1)
8	σ_a	0.4145(-2)	0.05	0.05	0.4371(-2)
	L^{-1}	0.4530(-2)	0.15	0.15	0.1068(-2)
	$1/\rho(A)$	0.4429(-2)	0.50	0.50	0.1877(-1)
12	σ_a	0.4141(-2)	0.05	0.05	0.4347(-2)
	L^{-1}	0.4257(-2)	0.15	0.15	0.1063(-2)
	$1/\rho(A)$	0.4330(-2)	0.50	0.50	0.1877(-1)
16			0.05	0.05	0.4335(-2)
			0.15	0.15	0.1061(-2)
			0.50	0.50	0.1876(-1)
<i>LTS₄2D – Diag</i>		0.2467(-3)			

Observa-se nos resultados apresentados por Hauser, que para diferentes escolhas dos parâmetros λ , no método *LTS_n2D – DiagExp*, método que referencia como o mais eficiente no desenvolvimento do seu trabalho, os resultados obtidos para a fuga de nêutrons, apresentam concordância de até dois dígitos. Pelo método ADO, essa concordância pode chegar até três dígitos, para cada valor do parâmetro k . Além disso, não encontra-se aqui problemas de condicionamento das matrizes do sistema; mesmo para o caso de baixa absorção, com $\sigma_s = 0.99$, em que Hauser

referencia obter um mal condicionamento para matrizes, aqui mesmo para diferentes ordens de quadratura e estimativas de parâmetro, o condicionamento mantém-se bom.

O tempo computacional de obtenção dos resultados entre os métodos $LTS_n2D - DiagExp$, $LTS_n2D - Diag$ e ADO, também é bastante significativo. Enquanto pelo método ADO, obtém-se o resultado numérico para a fuga de nêutrons, em um computador Pentium(R)4 480MB, para $N = 16$ em menos de dois segundos, para $N = 12$, maior ordem de quadratura resolvida pelo método $LTS_N2D - DiagExp$, o tempo é de 86739.85 segundos e para o método $LTS_82D - Diag$, o tempo computacional é de 5337.03 segundos [44], num computador Pentium III 128MB, usando o software matemático Maple.

Nas tabelas (6.9) e (6.10), os resultados são comparados também com outros autores, citados por Hauser [44].

Tabela 6.9: Fuga de nêutrons J_N , problema 1, $\sigma_s = 0.5$, $N = 4$

Método	Parâmetros	Fuga de nêutrons J_N
LN(8G4) [Mello,2000]		0.1178(-11)
LTS_42D [Zabadal, 1994]		0.4700(-11)
SGF - ExpN(4G4) [Mello, 2000]	$\lambda = \sigma_a$	0.1280(-11)
SGF - ExpN(4G4) [Mello, 2000]	$\lambda = L^{-1}$	0.1369(-11)
SGF - ExpN(4G4) [Mello, 2000]	$\lambda = 1/\rho(A)$	0.1340(-11)
$LTS_42D - DiagExp$ [Hauser, 2002]	$\lambda = \sigma_a$	0.2497(-11)
Método ADO	$k_1 = k_2 = 3.75(-4)$	0.4751(-11)
	$k_1 = k_2 = 1.0(-4)$	0.1267(-11)

Tabela 6.10: Fuga de nêutrons J_N , problema 1, $\sigma_s = 0.99$, $N = 4$

Método	Parâmetros	Fuga de nêutrons J_N
LN(4G4) [Mello,2000]		0.4154(-2)
LTS ₄ 2D [Zabadal, 1994]		0.4800(-2)
CCN(4G4) [Mello,2000]		0.1143(-1)
SGF – ExpN(2G4) [Mello, 2000]	$\lambda = \sigma_a$	0.4181(-2)
SGF – ExpN(2G4) [Mello, 2000]	$\lambda = L^{-1}$	0.4212(-2)
SGF – ExpN(2G4) [Mello, 2000]	$\lambda = 1/\rho(A)$	0.4229(-2)
<i>LTS₄2D – DiagExp</i> [Hauser, 2002]	$\lambda = \sigma_a$	0.1177(-1)
Método ADO	$k_1 = k_2 = 1.62(-1)$	0.1143(-1)
	$k_1 = k_2 = 5.5(-2)$	0.4858(-2)

Mostra-se, assim, nessas tabelas, que é possível escolher valores para os parâmetros k_i , $i = 1, 2$, de forma que se obtenha concordância de pelo menos um dígito com o resultado apresentado pelos autores e para diferentes métodos de solução, inclusive com os que utilizam aproximações exponenciais para os termos desconhecidos no contorno.

6.2.2 Resultados numéricos para o problema 2

Apresenta-se agora, a partir da tabela (6.11), resultados para o fluxo escalar de nêutrons $\phi(x)$ definido na equação (3.29), obtidos resolvendo-se o problema 2. Como avalia-se apenas $\phi(x)$, nota-se que a solução do problema unidimensional definido na variável y não é necessária.

Nas tabelas (6.11) – (6.16), para diferentes ordens da quadratura S_N e diferentes seções de choque de espalhamento, têm-se resultados para o fluxo escalar nos pontos $x = 0.1, 0.5, 0.7, 0.9$.

Como no problema 1, aqui também obtém-se concordância de pelo menos um dígito entre os resultados, para uma mesma secção de choque de espalhamento, usando-se valores $k_i < 1.0$, conforme mostra-se, para o caso em que $\sigma_s = 0.5$, nas tabelas (6.11) – (6.14).

Tabela 6.11: Fluxo escalar $\phi(x)$, problema 2, $\sigma_s = 0.5$, $k_1 = k_2 = 0.01$

N	$x = 0.1$	$x = 0.5$	$x = 0.7$	$x = 0.9$
2	0.4639	0.3578	0.2707	0.1997
4	0.5376	0.3878	0.2690	0.1837
6	0.5454	0.3911	0.2620	0.1758
8	0.5505	0.3923	0.2571	0.1719
12	0.5526	0.3932	0.2522	0.1695
16	0.5457	0.3883	0.2452	0.1655

Tabela 6.12: Fluxo escalar $\phi(x)$, problema 2, $\sigma_s = 0.5$, $k_1 = k_2 = 0.5$

N	$x = 0.1$	$x = 0.5$	$x = 0.7$	$x = 0.9$
2	0.4204	0.3140	0.2271	0.1602
4	0.4736	0.3354	0.2211	0.1449
6	0.4828	0.3378	0.2149	0.1393
8	0.4860	0.3390	0.2109	0.1369
12	0.4870	0.3402	0.2073	0.1359
16	0.4868	0.3411	0.2057	0.1359

Tabela 6.13: Fluxo escalar $\phi(x)$, problema 2, $\sigma_s = 0.5$, $k_1 = k_2 = 0.8$

N	$x = 0.1$	$x = 0.5$	$x = 0.7$	$x = 0.9$
2	0.3979	0.2917	0.2052	0.1408
4	0.4448	0.3104	0.1986	0.1273
6	0.4522	0.3127	0.1931	0.1230
8	0.4549	0.3140	0.1897	0.1213
12	0.4559	0.3155	0.1868	0.1208
16	0.4554	0.3165	0.1855	0.1210

Tabela 6.14: Fluxo escalar $\phi(x)$, problema 2, $\sigma_s = 0.5$, $k_1 = k_2 = 2.0$

N	$x = 0.1$	$x = 0.5$	$x = 0.7$	$x = 0.9$
2	0.3281	0.2254	0.1417	0.8686(-1)
4	0.3605	0.2409	0.1382	0.8215(-1)
6	0.3650	0.2441	0.1355	0.8159(-1)
8	0.3668	0.2461	0.1341	0.8174(-1)
12	0.3675	0.2482	0.1329	0.8244(-1)
16	0.3677	0.2494	0.1325	0.8295(-1)

Após essa observação, fixa-se arbitrariamente $k_1 = k_2 = 0.5$ para gerar mais resultados, agora variando-se o valor da secção de choque de espalhamento.

Tabela 6.15: Fluxo escalar $\phi(x)$, problema 2, $\sigma_s = 0.1$, $k_1 = k_2 = 0.5$

N	$x = 0.1$	$x = 0.5$	$x = 0.7$	$x = 0.9$
2	0.3079	0.2212	0.1511	0.1026
4	0.3412	0.2312	0.1398	0.0869
6	0.3470	0.2324	0.1338	0.0823
8	0.3490	0.2332	0.1302	0.0803
12	0.3494	0.2342	0.1269	0.0794
16	0.3492	0.2350	0.1255	0.0794

Tabela 6.16: Fluxo escalar $\phi(x)$, problema 2, $\sigma_s = 0.05$, $k_1 = k_2 = 0.5$

N	$x = 0.1$	$x = 0.5$	$x = 0.7$	$x = 0.9$
2	0.2982	0.2133	0.1447	0.0978
4	0.3299	0.2226	0.1332	0.0823
6	0.3354	0.2236	0.1273	0.0778
8	0.3373	0.2244	0.1237	0.0758
12	0.3377	0.2254	0.1205	0.0750
16	0.3374	0.2262	0.1190	0.0750

Considerando-se ainda $k_1 = k_2 = 0.5$ e $N = 4, 8, 16$, apresenta-se nas figuras (6.1) e (6.2), os resultados obtidos para o fluxo escalar. Observa-se que os resultados são apresentados no intervalo $0 \leq x \leq 1.0$, pois os resultados no intervalo $-1.0 \leq x < 0$, são simétricos aos apresentados.

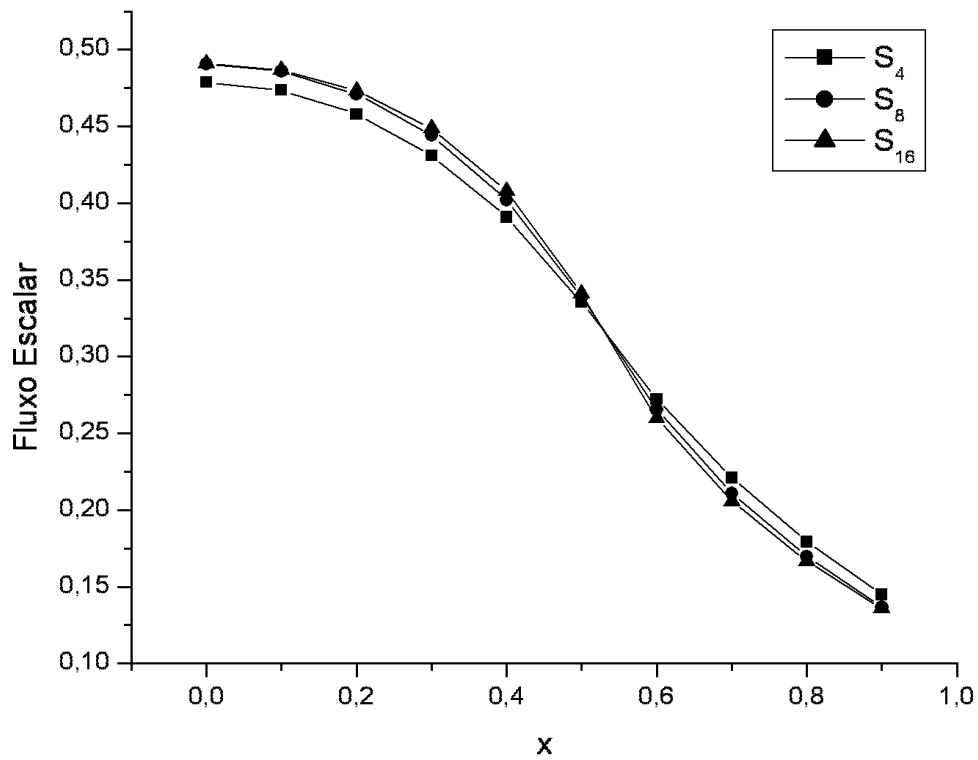


Figura 6.1: Fluxo escalar $\phi(x)$, avaliados por diferentes ordens de quadratura, para o problema 2, com $\sigma_s = 0.5$

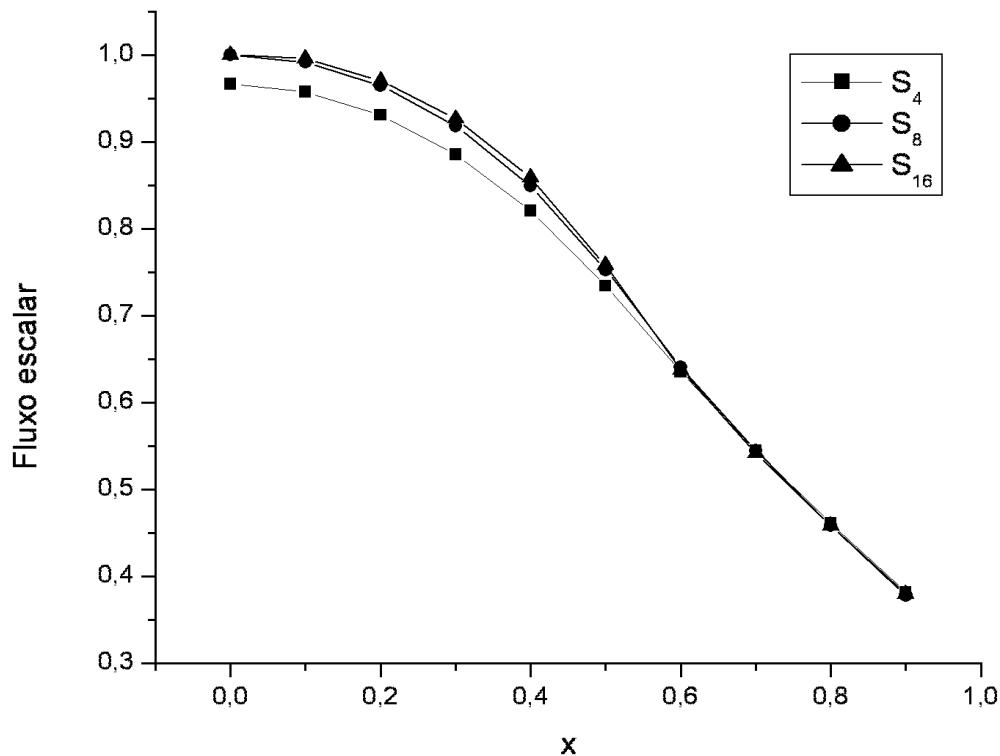


Figura 6.2: Fluxo escalar $\phi(x)$, avaliados por diferentes ordens de quadratura, para o problema 2, com $\sigma_s = 0.9$

Observa-se, na solução do problema 2, que os resultados para os fluxos escalares obtidos pelo método ADO, mostrados nas tabelas (6.11) – (6.16), também apresentam convergência, coincidindo em três ou quatro dígitos, para uma mesma seção de choque de espalhamento. A convergência também é observada nas figuras (6.1) e (6.2), onde observa-se a aproximação das soluções à medida que se aumenta o número da quadratura S_N .

Para finalizar esta seção, nas tabelas (6.17) – (6.19), dispõe-se os resultados para o fluxo escalar, comparando-se os resultados aqui obtidos [12] com os

resultados apresentados por Tsai e Loyalka [80]. Nas figuras (6.3) – (6.5), reúne-se os resultados destas tabelas, realizando-se a mesma comparação, para $N = 16$, $\sigma_s = 0.5$ e variando os parâmetros k_i .

Tabela 6.17: Fluxo escalar $\phi(x)$, em $x=0.5$, para o problema 2

σ_s	[80]	TWOTRAN-II[80]	MÉTODO ADO		
	N = 5, 7, 9, 11, 15	N = 4, 8, 16	$k = 0.1$	$k = 0.25$	$k = 0.35$
0.50	0.359604	0.337412	0.3490	0.3350	0.3263
	0.358422	0.337707	0.3768	0.3600	0.3497
	0.357414	0.339794	0.3799	0.3627	0.3523
	0.356678		0.3810	0.3638	0.3534
	0.355885		0.3820	0.3649	0.3545
			0.3827	0.3657	0.3554
0.10	0.258802	0.239483	0.2381	0.2315	0.2273
	0.259150	0.241676	0.2503	0.2427	0.2380
	0.259131	0.244032	0.2515	0.2439	0.2391
	0.259030		0.2521	0.2445	0.2398
	0.258906		0.2530	0.2455	0.2408
			0.2537	0.2462	0.2416
0.05	0.250097	0.231102	0.2290	0.2229	0.2190
	0.250569	0.233421	0.2402	0.2332	0.2288
	0.250636	0.235787	0.2413	0.2343	0.2299
	0.250591		0.2419	0.2349	0.2305
	0.250529		0.2427	0.2358	0.2315
			0.2434	0.2366	0.2323

Tabela 6.18: Fluxo escalar $\phi(x)$, em $x = 0.7$, para o problema 2

σ_s	[80]	TWOTRAN-II[80]	MÉTODO ADO		
	N = 5, 7, 9, 11, 15	N = 4, 8, 16	N = 2, 4, 6, 8, 12, 16	$k = 0.9$	$k = 2.0$
0.50	0.149801	0.157320	0.1986	0.1417	0.1230
	0.139050	0.139581	0.1920	0.1382	0.1215
	0.138539	0.133426	0.1867	0.1356	0.1199
	0.138460		0.1835	0.1341	0.1190
	0.137048		0.1808	0.1329	0.1184
			0.1796	0.1326	0.1182
0.10	0.093601	0.100591	0.1355	0.1020	0.0903
	0.083932	0.085131	0.1249	0.0954	0.0857
	0.083759	0.078914	0.1198	0.0925	0.0836
	0.083911		0.1168	0.0909	0.0824
	0.082774		0.1142	0.0896	0.0816
			0.1131	0.0892	0.0813
0.05	0.088990	0.095914	0.1300	0.0983	0.0872
	0.079448	0.080662	0.1193	0.0916	0.0824
	0.079013	0.074448	0.1143	0.0887	0.0803
	0.079469		0.1113	0.0871	0.0791
	0.078362		0.1087	0.0858	0.0783
			0.1076	0.0853	0.0783

Tabela 6.19: Fluxo escalar $\phi(x)$, em $x = 0.98$, para o problema 2

σ_s	[80]	TWOTRAN-II[80]	MÉTODO ADO		
	N = 5, 7, 9, 11, 15	N = 4, 8, 16	N = 2, 4, 6, 8, 12, 16	$k = 2.5$	$k = 3.5$
0.50	0.054250	0.045536	0.0573	0.0385	0.0318
	0.053812	0.048085	0.0566	0.0423	0.0370
	0.053558	0.052366	0.0575	0.0443	0.0394
	0.053442		0.0583	0.0455	0.0407
	0.053413		0.0593	0.0467	0.0420
			0.0598	0.0473	0.0426
0.10	0.032577	0.025670	0.0397	0.0274	0.0229
	0.032669	0.028969	0.0380	0.0295	0.0263
	0.032655	0.032432	0.0386	0.0310	0.0280
	0.032637		0.0392	0.0318	0.0290
	0.032622		0.0399	0.0327	0.0299
			0.0402	0.0331	0.0303
0.05	0.030823	0.023777	0.0381	0.0264	0.0220
	0.030952	0.027299	0.0363	0.0283	0.0252
	0.030956	0.030798	0.0369	0.0298	0.0269
	0.030945		0.0375	0.0306	0.0279
	0.030931		0.0382	0.0314	0.0287
			0.0385	0.0318	0.0291

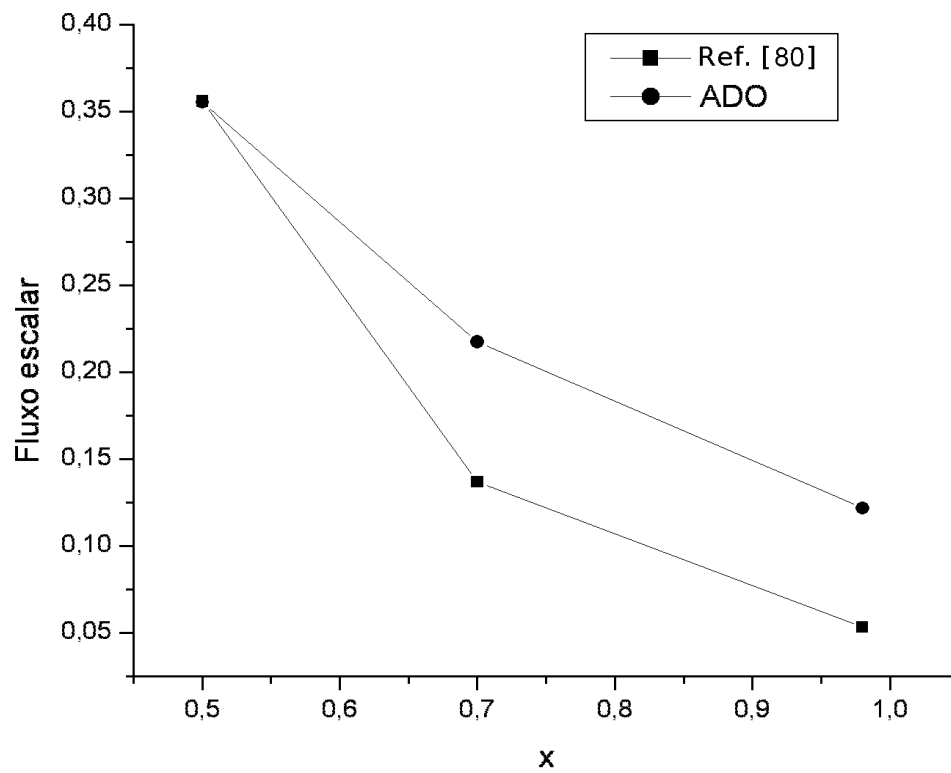


Figura 6.3: Fluxo escalar $\phi(x)$ - Método ADO e [80] - para o problema 2, com $\sigma_s = 0.5$, $k_1 = k_2 = 0.35$, $N = 16$

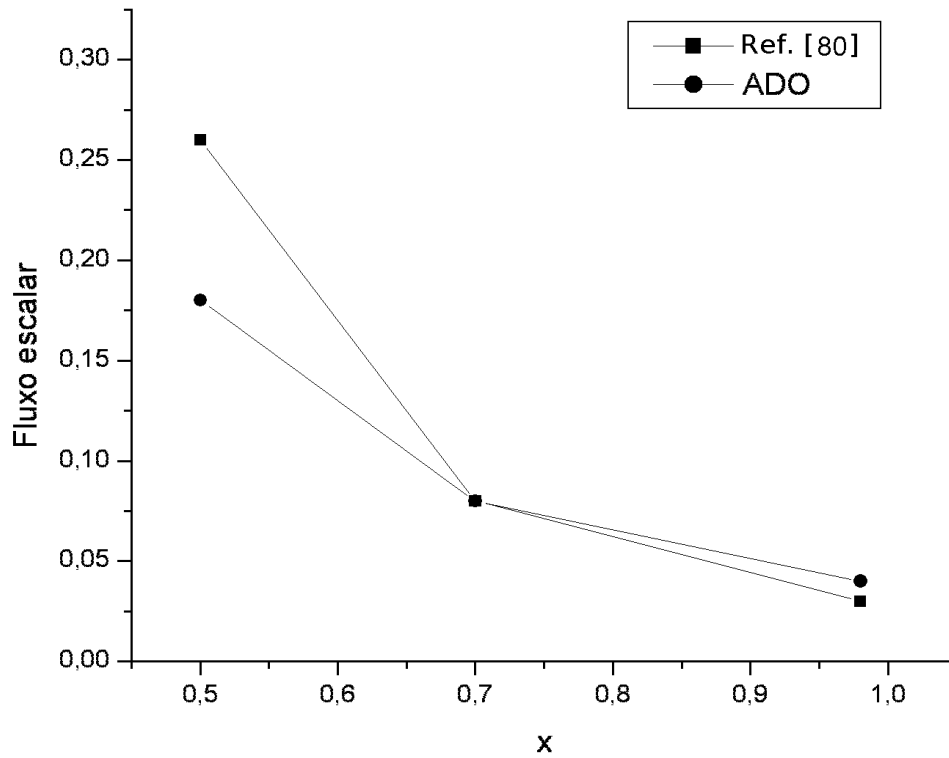


Figura 6.4: Fluxo escalar $\phi(x)$ - Método ADO e [80] - para o problema 2, com $\sigma_s = 0.5$, $k_1 = k_2 = 2.0$, $N = 16$

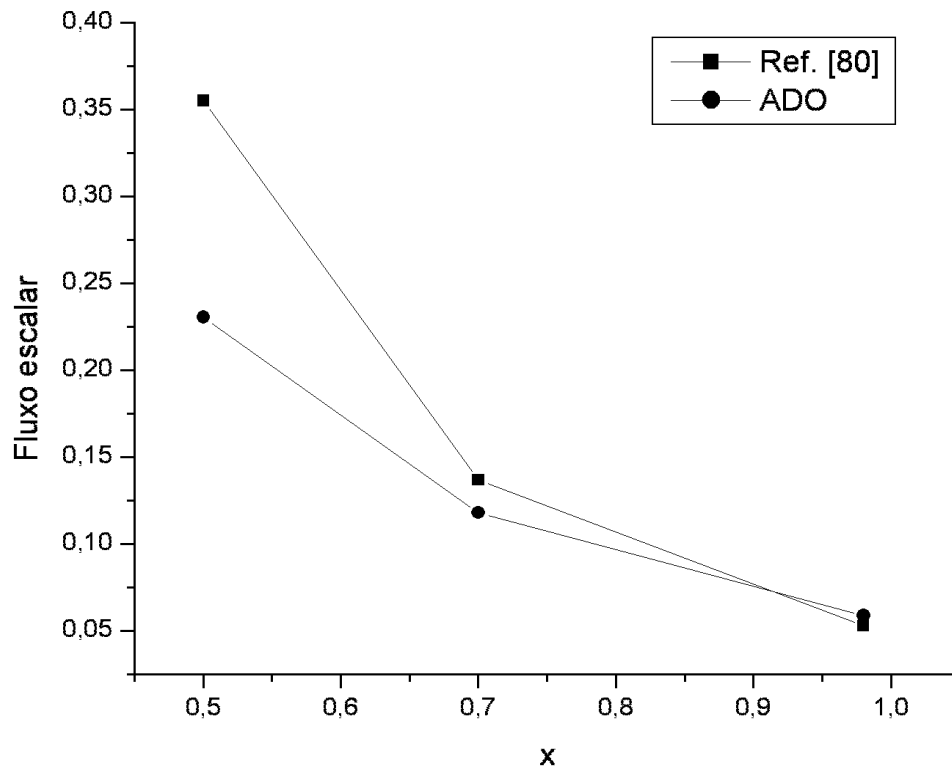


Figura 6.5: Fluxo escalar $\phi(x)$ - Método ADO e [80] - para o problema 2, com $\sigma_s = 0.5$, $k_1 = k_2 = 2.5$, $N = 16$

A partir da análise dos resultados para o fluxo escalar, apresentados nas tabelas (6.17) – (6.19), pode-se enumerar algumas observações:

- os resultados obtidos pelo método ADO mantêm dois a três dígitos de concordância, para um mesmo valor de k_m , $m=1,2$ e seção de choque de espalhamento σ_s . Para diferentes estimativas de k_m , nota-se que os resultados, obtidos pelo método ADO, ainda concordam em um dígito;

- é possível determinar valores dos parâmetros k_1, k_2 , de modo a obter-se concordância de dois a três dígitos entre resultados obtidos pelo método ADO e Ref. [80];
- para valores de x , que distanciam-se da fonte, conforme se observa também nas figuras 6.3 – 6.5, melhores resultados são obtidos quando se utiliza $k_m > 1.0$. Esta observação pode ser um indicativo que talvez se deva trabalhar com parâmetros que sejam dependentes da variável espacial.

As características relacionadas ao tempo computacional e condicionamento do sistema mantêm-se como já comentado na seção anterior.

A seguir, apresenta-se os resultados numéricos obtidos pela implementação da segunda abordagem, proposta no capítulo 5.

6.3 Segunda abordagem: aproximação como termo de fonte

Procura-se agora determinar os resultados para os mesmos casos resolvidos na seção anterior. Assim, também aqui divide-se a apresentação dos resultados em duas subseções: uma com os resultados para o problema 1 e a outra, para o problema 2.

6.3.1 Resultados numéricos para o problema 1

Na tabela (6.20), apresenta-se resultados para a fuga de nêutrons, avaliados pelas equações (6.1), (6.2) e (6.3), para o problema 1, obtidos variando-se apenas a aproximação S_N e as seções de choque de espalhamento, visto que os valores dos parâmetros $k_j, \kappa_j, j = 1, \dots, M$, são determinados juntamente com a

solução do problema. Observa-se, na tabela (6.20), que aumentando-se a ordem da quadratura, obtém-se concordância de até três dígitos entre os resultados para uma mesma seção de choque de espalhamento.

Tabela 6.20: Fuga de nêutrons J_N , problema 1

S_N	$\sigma_s = 0.1$	$\sigma_s = 0.5$	$\sigma_s = 0.99$
S_4	0.1408(-10)	0.4306(-9)	0.1581(-1)
S_6	0.2673(-10)	0.4984(-9)	0.1563(-1)
S_8	0.3183(-10)	0.5286(-9)	0.1817(-2)
S_{12}	0.3261(-10)	0.5292(-9)	0.2179(-1)
S_{16}	0.3258(-10)	0.5292(-9)	0.2039(-1)

6.3.2 Resultados numéricos para o problema 2

Resultados numéricos são apresentados para o fluxo escalar em x a partir da tabela (6.21), obtidos resolvendo-se o problema 2, para diferentes seções de choque e ordem de quadratura.

Tabela 6.21: Fluxo escalar $\phi(x)$, problema 2, com $\sigma_s = 0.5$

N	$x = 0.1$	$x = 0.5$	$x = 0.7$	$x = 0.98$
2	0.4649	0.3588	0.2717	0.1758
4	0.5334	0.3890	0.2702	0.1567
6	0.5469	0.3924	0.2632	0.1492
8	0.5521	0.3936	0.2582	0.1458
12	0.5541	0.3945	0.2534	0.1441
16	0.5542	0.3952	0.2511	0.1439

Tabela 6.22: Fluxo escalar $\phi(x)$, problema 2, com $\sigma_s = 0.1$

N	$x = 0.1$	$x = 0.5$	$x = 0.7$	$x = 0.98$
2	0.3275	0.2427	0.1741	0.1082
4	0.3682	0.2557	0.1634	0.8961(-1)
6	0.3766	0.2570	0.1563	0.8392(-1)
8	0.3798	0.2576	0.1518	0.8149(-1)
12	0.3811	0.2584	0.1475	0.8040(-1)
16	0.3811	0.2591	0.1455	0.8039(-1)

Tabela 6.23: Fluxo escalar $\phi(x)$, problema 2, com $\sigma_s = 0.05$

N	$x = 0.1$	$x = 0.5$	$x = 0.7$	$x = 0.98$
2	0.3162	0.2332	0.1662	0.1028
4	0.3548	0.2451	0.1551	0.8449(-1)
6	0.3628	0.2463	0.1481	0.7899(-1)
8	0.3659	0.2469	0.1437	0.7666(-1)
12	0.3670	0.2476	0.1394	0.7564(-1)
16	0.3669	0.2483	0.1374	0.7564(-1)

Ao final da apresentação desses resultados, comparando-se os resultados obtidos para a fuga de nêutrons da tabela (6.20), com os das tabelas (6.1) – (6.3), observa-se que, para alguns casos, consegue-se concordância de pelo menos um dígito entre os resultados das duas abordagens, com exceção do caso de baixa absorção.

Comparando-se as tabelas (6.21) – (6.23) com as (6.11) – (6.16), também se observa essa concordância de pelo menos um dígito entre os resultados obtidos nas duas abordagens para o fluxo escalar.

Embora o tipo de estimativa proposto ainda necessite ser melhorado e o uso da solução particular (5.46) – (5.49), talvez necessite ser corrigido para o caso de autovalores repetidos, que ocorrem nesta segunda abordagem, a partir dos resultados apresentados nesta seção, comprovou-se a possibilidade de se propor uma abordagem onde os parâmetros que aproximam os fluxos desconhecidos no contorno não necessitem ser estimados no início da solução do problema: evidenciou-se aqui que a convergência do método se mantém, pois os resultados ainda apresentam concordância de um a três dígitos. Além disso, essa nova abordagem não gera complicações computacionais na implementação, nem aumenta a ordem de condicionamento do sistema, servindo de base para novas formulações, conforme discute-se nas considerações finais.

Para concluir este capítulo, salienta-se que o tempo computacional necessário para se obter os resultados aqui gerados, para fluxo escalar e fuga de nêutrons, também nessa abordagem, considerando-se cada seção de choque ou ordem de quadratura, não é superior a dois segundos, demonstrando novamente a eficiência do método ADO.

7 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Observa-se, ao final deste trabalho, que a aplicação do método ADO, juntamente com o uso de equações nodais, têm-se mostrado uma boa alternativa na abordagem de problemas bidimensionais de transporte de partículas, descritos pela equação linear de Boltzmann.

Estudos preliminares com o método ADO, evidenciaram uma importante contribuição do método quanto a redução da ordem de problemas de autovalores. Nesse trabalho, isto também ficou evidenciado, pois o uso de quadraturas nível simétricas, associado a solução das equações nodais unidimensionais pelo método ADO, propiciou a resolução de problemas de autovalores com metade da ordem do problema original, ou seja, obteve-se problemas de autovalor de ordem $M/2$, para quadraturas de ordem N , com um total de M direções. Além disso, obteve-se aqui problemas bem condicionados e o método habilita a trabalhar com autovalores repetidos, pois podem ser obtidas soluções linearmente independentes, mesmo nesses casos.

O trabalho computacional é simples e fácil de ser implementado, pois evita-se aqui o uso de esquemas iterativos, comumente utilizados na obtenção de soluções de problemas de transporte, gerando também resultados com satisfatória convergência, conforme mostrado nas tabelas do capítulo anterior. A redução da ordem do problema de autovalor e a não utilização de esquemas iterativos, contribuíram consideravelmente para que o tempo computacional de execução das implementações dos problemas, fosse muito inferior ao comumente referenciado na literatura [13, 44, 80], ficando sempre em torno de no máximo dois segundos.

Estas características comprovaram-se nas duas abordagens desenvolvidas neste trabalho: ao se aproximar o fluxo desconhecido no contorno pelo fluxo médio integrado, abordagem desenvolvida no capítulo 4, o desenvolvimento da solução

mostrou-se fácil de ser implementado, gerou resultados com ótima rapidez computacional, boa convergência e satisfatória precisão (obtem-se de 1 a 3 dígitos de concordância com resultados existentes na literatura, desenvolvidos por outros métodos e outros autores). Nessa proposta, mostrou-se ainda a possibilidade de se resolver problemas desacoplados nas equações nodais unidimensionais em ordenadas discretas.

A formulação proposta no capítulo 5, também mostrou-se adequada aos objetivos propostos: evitar a estimativa *a priori* dos parâmetros das aproximações e investigar a possibilidade de sua determinação juntamente com a solução do problema, servindo então de base para trabalhos futuros, onde pretende-se continuar o estudo, ainda hoje relevante no meio científico, de equações auxiliares na aplicação de métodos nodais.

A princípio, neste trabalho, ao considerarmos os fluxos desconhecidos constantes em cada direção, conforme as Eqs. (5.6) e (5.21), obteve-se então, na formulação do problema, termos não-homogêneos independentes da variável espacial, considerados como termos fontes do problema. Mas a forma das soluções particulares utilizadas, descritas nas Eqs. (5.46) e (5.47), permite a abordagem de termos fontes mais gerais. Assim, na tentativa de aprimorar a abordagem aqui definida na busca de resultados com maior precisão, se comparados com os existentes na literatura, como proposta para trabalhos futuros, pode-se utilizar, por exemplo, aproximações para os termos desconhecido no contorno do tipo exponencial, como proposto na Ref. [13]

$$\Psi(x, y_w, \Omega_m) \approx K_m(x) e^{-\rho x} \quad (7.1)$$

onde y_w representa uma fronteira, Ω_m , as direções (μ_m, η_m) para o qual o fluxo é desconhecido e ρ é a constante de decaimento, que deve ser estimada *a priori*.

Observa-se também que um estudo sobre os efeitos de raio [53] não foi abordado nesse trabalho, mas que esse aspecto pode vir a ser focado em trabalhos

futuros, visto que o método ADO permite avançar na ordem de quadratura utilizada, um dos principais meios utilizados para mitigá-los.

Considera-se então que os objetivos desse trabalho foram atingidos, pois obteve-se soluções pelo método ADO para as duas abordagens do problema bidimensional de transporte de partículas, como se desejava, obtendo-se resultados numéricos com boa convergência e conseguiu-se investigar a determinação dos parâmetros das aproximações, incentivo para a continuidade do trabalho, como proposto anteriormente.

ANEXO A QUADRATURA ANGULAR COM SIMETRIA DE NÍVEL

As quadraturas com simetria de nível são largamente utilizadas em diversas aplicações. Caracterizam-se por utilizarem o mesmo conjunto de $N/2$ valores positivos das direções cossenos em relação a cada um dos três eixos e são invariantes em rotações de 90° sobre qualquer eixo.

Para uma aproximação S_N , existem $N(N+2)/8$ ordenadas por octante ou $N(N+2)$ em toda esfera unitária.

Apresenta-se assim, na tabela (A.1), o conjunto de quadratura angular com simetria de nível, descrito por Lewis e Miller [53], utilizado na implementação dos problemas resolvidos e na figura (A.1), a distribuição dos pesos em cada quadrante, relacionada às respectivas direções.

Tabela A.1: Conjunto de Quadraturas de Simetria de Nível S_N

Nível	n	μ_n	w_n
S_2	1	$1/\sqrt{3}$	1
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	0.0505819
	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

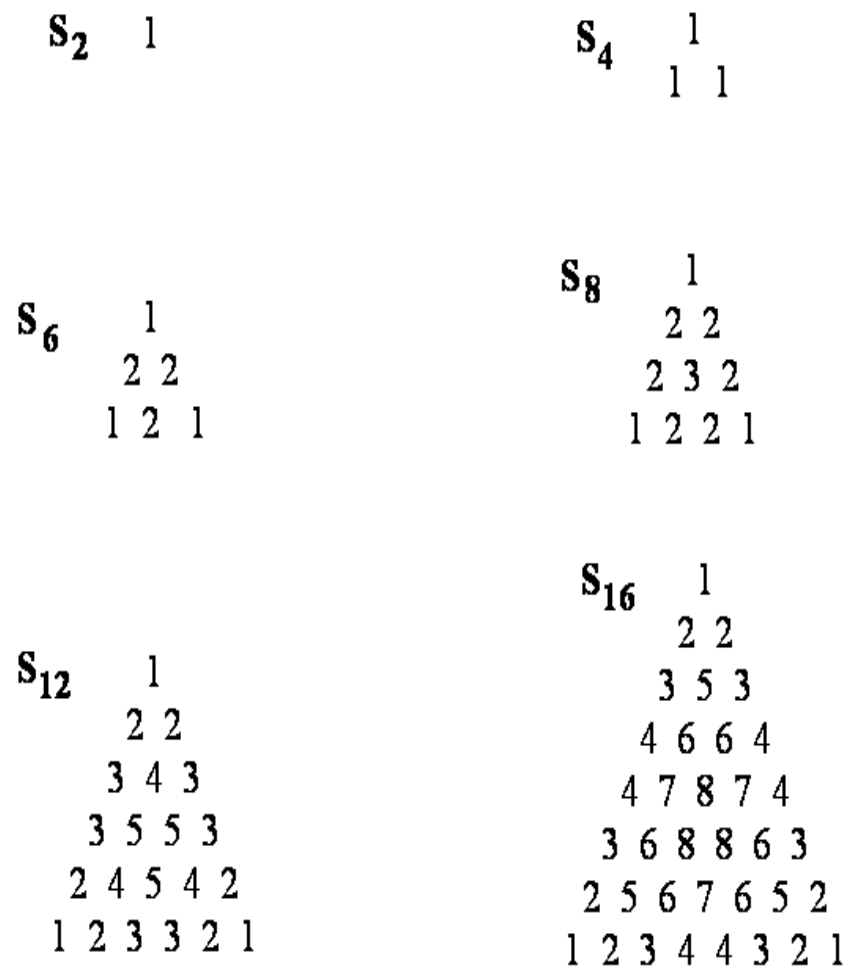


Figura A.1: Configuração das ordenadas discretas para um quadrante, ilustrando ordenadas com o mesmo peso w_m

BIBLIOGRAFIA

- [1] ABREU, M. P. A discrete ordinates scheme for void fraction evaluation with nonstandard reflective conditions and weakly divergent beams. *Kern-technik* 74 (2009), 55–59.
- [2] AZMY, Y. Y. Comparison of three approximations to the linear-linear nodal transport method in weighted diamond-difference form. *Nuclear Science and Engineering* 100 (1988), 190–200.
- [3] AZMY, Y. Y. The weighted diamond-difference form of nodal transport methods. *Nuclear Science and Engineering* 98 (1988), 29–40.
- [4] AZMY, Y. Y. A comparison between the finite difference and nodal integral methods for the neutron diffusion equation. *in the Proceedings of the International Topical Meeting on Advances in Mathematics, Computation, and Reactor Physics* (1991).
- [5] BADRUZZAMAN, A. An efficient algorithm for nodal-transport solutions in multidimensional geometry. *Nuclear Science and Engineering* 89 (1985), 281–290.
- [6] BARICHELLO, L. B., BARTZ, A. C. R., CAMARGO, M., AND SIEWERT, C. E. The temperature-jump problem for a variable collision frequency model. *Physics of Fluids* 14 (2002), 383–391.
- [7] BARICHELLO, L. B., CAMARGO, M., RODRIGUES, P., AND SIEWERT, C. E. Unified solutions to classical flow problems based on the BGK model. *Z. Angew. Math. Phys.* 52 (2001), 517–534.
- [8] BARICHELLO, L. B., GARCIA, R. D. M., AND SIEWERT, C. E. Particular solutions for the discrete-ordinates method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 64 (2000), 219.

- [9] BARICHELLO, L. B., AND SIEWERT, C. E. A discrete-ordinates solution for a non-grey model with complete frequency redistribution. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 62 (1999), 645–675.
- [10] BARICHELLO, L. B., AND SIEWERT, C. E. A discrete-ordinates solution for Poiseuille flow in a plane channel. *Z. Angew. Math. Phys.* 50 (1999), 972.
- [11] BARICHELLO, L. B., AND SIEWERT, C. E. The temperature-jump problem in rarefied-gas dynamics. *European Journal of Applied Mathematics* 11 (2000), 353–364.
- [12] BARICHELLO, L. L., CABRERA, L. C., AND FILHO, J. F. P. An analytical discrete ordinates solution for two dimensional problems based on nodal schemes. *Proceedings 2009 International Nuclear Atlantic Conference* (2009).
- [13] BARROS, R. C., DA SILVA, F. C., AND FILHO, H. A. Recent advances in spectral nodal methods for X,Y-geometry discrete ordinates deep penetration and eigenvalue problems. *Progress in Nuclear Energy* 35, No.3-4 (1999), 293–331.
- [14] BARROS, R. C., AND ET AL. The application of spectral nodal methods to discrete ordinates and diffusion problems in cartesian geometry for neutron multiplying systems. *Progress in Nuclear Energy* 42 (2003), 385–426.
- [15] BELL, G. I., AND GLASTONE, S. *Nuclear Reactor Theory*. Van Nostrand Reinhold Company, New York, 1970.
- [16] BOLTZMANN, L. Weitere studien über das wärmeleichgewicht unter gasmolekülen. *Sitzungsberichte Akademie der Wissenschaften* 60 (1872), 275–376.

- [17] CABRERA, L. C., AND BARICHELLO, L. B. Unified solutions to some classical problems in rarefied gas dynamics based on the one-dimensional linearized S-model equations. *Z. Angew. Math. Phys.* 57 (2006), 285–312.
- [18] CAMARGO, M. *Soluções Unificadas para Modelos com Freqüência de Colisão Variável da Dinâmica de Gases Rarefeitos*. Tese de Doutorado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, 2003.
- [19] CAMARGO, M. Unified approach for variable collision frequency models in rarefied gas dynamics. *TTSP* 33 (2004), 227–260.
- [20] CASE, K. M., AND ZWEIFEL, P. F. *Linear Transport Theory*. Addison Wesley, Reading MA, 1967.
- [21] CERCIGNANI, C. *Mathematical Methods in Kinetic Theory*. Plenum Press, New York, 1969.
- [22] CERCIGNANI, C. On the general solution of the steady linearized Boltzmann equation. *in Rarefied Gas. M. Becker and M. Fiebig eds., Vol.I* (1974), A.9.1–A.9.11, DFLVR Press, Porz–Wahn.
- [23] CERCIGNANI, C. *Theory and application of the Boltzmann Equation*. Elsevier, New York, 1975.
- [24] CERCIGNANI, C. *The Boltzmann Equation and its Applications*. Springer-Verlag, New York, 1988.
- [25] CERCIGNANI, C. *Mathematical Methods in Kinetic Theory*. Plenum Press, New York, 1990.
- [26] CHANDRASEKHAR, S. *Radiative Transfer*. Oxford University Press, London, 1950.

- [27] COTTA, R. M., AND MIKHAILOV, M. D. *Heat conduction: lumped analysis, integral transforms, symbolic computation*. John Wiley & Sons, Chichester, England.
- [28] DOICU, A., AND TRAUTMANN, T. Discrete-ordinate method with matrix exponential for a pseudo-spherical atmosphere: Scalar case. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 110 (2009), 146–158.
- [29] DOMINGUEZ, D. S., AND BARROS, R. C. Método espectro-nodal linear para problemas de transporte de nêutrons na formulação de ordenadas discretas em geometria bidimensional cartesiana. *Proceedings of the XXVII CILAMCE* (2006).
- [30] DONGARRA, J. J., BUNCH, J. R., MOLER, C. B., AND STEWART, G. W. *LINPACK, User's Guide*. Society for Industrial and Applied Mathematics - SIAM, Philadelphia, 1979.
- [31] DUDERSTADT, J. J. *Transport Theory*. John Wiley, New York, 1979.
- [32] DUDERSTADT, J. J., AND HAMILTON, L. J. *Nuclear Reactor Analysis*. John Wiley, New York, 1976.
- [33] FAN, J., BOYD, I. D., CAI, C. P., HENNIGHAUSEN, K., AND CANDLER, G. V. Computation of rarefied gas flows around a NACA 0012 airfoil. *AIAA Journal* 39 (2001), 618–625.
- [34] FILHO, J. F. P. *Equação de Boltzmann e a Modelagem de Fluidos em Micro e Macroescalas*. Dissertação de Mestrado do Curso de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, UFRGS, Porto Alegre, 2007.
- [35] FIVELAND, W. A. Discrete-ordinate solutions of the radiative transport equation for rectangular enclosures. *Journal Heat Transfer* 106 (1984), 699–706.

- [36] FIVELAND, W. A. Three-dimensional radiative heat-transfer solutions by the discrete-ordinates method. *Journal of Thermophysics and Heat Transfer* 2, No. 4 (1988), 309–316.
- [37] GAD-EL-HAK, M. *The MEMS Handbook*. CRC Press, Boca Raton, 2006.
- [38] GARCIA, R. D. M. *Métodos para Solução da Equação de Transporte de Partículas Integro-Diferencial*. Em: Escola de Verão em Teoria de Transporte de Partículas Neutras, PUC - Porto Alegre - RS, 2002.
- [39] GARCIA, R. D. M., AND SIEWERT, C. E. The McCormack model for gas mixtures: heat transfer in a microtube. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 40 (2004), 3251–.
- [40] GARCIA, R. D. M., SIEWERT, C. E., AND YACOUT, A. M. Radiative transfer in a multi-layer medium subject to Fresnel boundary and interface conditions and uniform illumination by obliquely incident parallel rays. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 109 (2008), 2151–2170.
- [41] GERMAN, M. L., NEKRASOV, V. P., AND NOGOTOV, E. F. Numerical method for calculating the radiation transfer in two-phase media of complex geometry. *Dokl. Akad. Nauk Belarusi* 40 (1996), 122–126.
- [42] GONZÁLES, M., FERNÁNDEZ, C. G., AND VELARDE, P. 2D numerical comparison between S_N and M_1 radiation transport methods. *Annals of Nuclear Energy* 36 (2009), 886–895.
- [43] GROSS, E. P., AND JACKSON, E. A. Kinetic models and the linearized Boltzmann equation. *The Physics of Fluids* 2 (1959), 432–441.
- [44] HAUSER, E. B. *Estudo e solução da equação de transporte de nêutrons bidimensionais pelo método LTS_N para elevadas ordens de quadraturas*

- angulares: LTS_n2D-Diag e LTS_n2D-DiagExp*. Tese de Doutorado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, 2002.
- [45] HAUSER, E. B. *Desenvolvimento de um método nodal analítico para problemas de ordenadas discretas em geometrias cartesianas bidimensional e tridimensional em domínios homogêneos e heterogêneos*. Tese de Doutorado do Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, UFRGS, Porto Alegre, 2006.
- [46] JONES, W., AND PAUL, M. Combination of DOM with LES in a gas turbine combustor. *International Journal of Engineering Science* 43 (2005), 379–397.
- [47] KARNIADAKIS, G., BESKOK, A., AND ALURU, N. *Microflows and Nanoflows*. Springer, New York, 2005.
- [48] KNACKFUSS, R. F. *Efeitos de superfície na dinâmica de gases rarefeitos: uma análise baseada no núcleo de espalhamento de Cercignani-Lampis*. Tese de Doutorado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, 2005.
- [49] KNACKFUSS, R. F. On the temperature-jump problem in rarefied gas dynamics: the effect of the Cercignani-Lampis boundary condition. *Siam J. Appl. Math* 66 (2006), 2149–2186.
- [50] LATHROP, K. D., AND CARLSON, B. G. Discrete-ordinates angular quadrature of the neutron transport equation. *Technical Information Series Report- Los Alamos Scientific Laboratory LASL-3186* (1965).
- [51] LAWRENCE, R. D. Progress in nodal methods for the solution of the neutron diffusion and transport equation. *Progress in Nuclear Energy* 17 (1986), 271–301.

- [52] LEE, C. E. The discrete S_N approximation to transport theory. *Theoretical Information Series Report- Lawrence Livermore Laboratory LA2595* (1962).
- [53] LEWIS, E. E., AND JR, W. F. M. *Computational Methods of Neutron Transport*. John Wiley and Sons, New York, 1984.
- [54] MISHRA, S. C., ROY, H. K., AND N.MISRA. Discrete ordinate method with a new and a simple quadrature scheme. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 101 (2006), 249–262.
- [55] MODEST, M. F. *Radiative Heat Transfer*. Mc Graw-Hill, New York, 1993.
- [56] OHWADA, T., AOKI, K., AND SONE, Y. Heat transfer and temperature distribution in a rarefied gas between two parallel plates with different temperatures: numerical analysis of the Boltzmann equation for a hard sphere molecule. *Rarefied Gas Dynamics: Theoretical and Computational Techniques*, edited by E. P. Muntz, D. P. Weaver and D. H. Campbell 118 of *Progress in Astronautics and Aeronautics, AIAA, Washington, DC* (1989).
- [57] OHWADA, T., AND SONE, Y. Analysis of thermal stress slip flow and negative thermophoresis using the Boltzmann equation for hard-sphere molecules. *European Journal of Mechanics B/Fluids* 11 (1992), 389–414.
- [58] SAKAMI, M., CHARETTE, A., AND DEZ, V. L. Application of the discrete ordinates method to combined conductive and radiative heat transfer in a two-dimensional complex geometry. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 56, No. 4 (1996), 517–533.
- [59] SCHERER, C. S. An analytical approach to the unified solution of kinetic equations in rarefied gas dynamics. II. heat transfer problems. *Z. angew. Math. Phys.* 60 (2009), 651–687.

- [60] SCHERER, C. S., FILHO, J. F., AND BARICHELLO, L. B. An analytical approach to the unified solution of kinetic equations in rarefied gas dynamics. I. flow problems. *Z. angew. Math. Phys.* 60 (2009), 70–115.
- [61] SHARIPOV, F. Non-isothermal gas flow through rectangular microchannels. *Journal Micromechanics Microengineering* 9 (1999), 394–401.
- [62] SHARIPOV, F., AND BERTOLDO, G. Numerical solution of the linearized boltzmann equation for an arbitrary intermolecular potential. *Journal of Computational Physics* 228 (2009), 3345–3357.
- [63] SHARIPOV, F., AND SELEZNEV, V. Data on internal rarefied gas flows. *J. Phys. Chem. Ref. Data* 27 (1998), 657–706.
- [64] SIEWERT, C. E. A concise and accurate solutions to Chandrasekhar’s basic problem in radiative transfer. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 64 (2000), 109–130.
- [65] SIEWERT, C. E. Poiseuille and Thermal Creep flow in a cylindrical tube. *Journal Computational Physics* 160 (2000), 470–480.
- [66] SIEWERT, C. E. Couette flow for a binary gas mixture. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 70 (2001), 321–332.
- [67] SIEWERT, C. E. Generalized boundary conditions for the S-model kinetic equations basic to flow in a plane channel. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 72 (2002), 75–88.
- [68] SIEWERT, C. E. Poiseuille, Thermal Creep and Couette flow: results based on the CES model of the linearized Boltzmann equation. *European Journal of Mechanics B/Fluids* 21 (2002), 579–597.
- [69] SIEWERT, C. E. The linearized Boltzmann equation: a concise and accurate solution of the temperature-jump problem. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 77 (2003), 417–432.

- [70] SIEWERT, C. E. The linearized Boltzmann equation: a concise and accurate solutions to basic flow problems. *Z. Angew. Math. Phys.* 54 (2003), 273–303.
- [71] SIEWERT, C. E. Viscous-slip, thermal-slip and temperature-jump coefficients as defined by the linearized Boltzmann equation and the Cercignani-Lampis boundary condition. *Physics of Fluids* 15 (2003), 1696–1701.
- [72] SIEWERT, C. E. The temperature-jump problem based on the CES model of the linearized Boltzmann equation. *Z. Angew. Math. Phys.* 55 (2004), 92–104.
- [73] SIEWERT, C. E. The McCormack model for gas mixture: the temperature-jump problem. *Z. Angew. Math. Phys.* 56 (2005), 273–292.
- [74] SIEWERT, C. E., AND VALOUGEORGIS, D. Concise and accurate solutions to half-space binary-gas flow problems defined by the McCormack model and specular-diffuse wall conditions. *European Journal Of Mechanics B/Fluids* 23 (2004), 709–726.
- [75] SIEWERT, C. E., AND VALOUGEORGIS, D. The McCormack model: channel flow of a binary gas mixture driven by temperature, pressure and density gradients. *European Journal Of Mechanics B/Fluids* 23 (2004), 645–664.
- [76] SMITH, B. T., BOYLE, J. M., DONGARRA, J. J., GARBOW, B. S., IKEBE, Y., KLEMA, V. C., AND MOLER, C. B. *Matrix Eigensystem Routines EISPACK Guide*. Springer-Verlang, Berlin, 1976.
- [77] STAMNES, K., TSAY, S. C., WISCOMBE, W. J., AND JAYAWEERA, K. Numerically stable algorithm for discrete-ordinate-method radiative transfer in multiple scattering and emitting layered media. *Applied Optics* 27, No. 12 (1988), 2502–2509.

- [78] TIMOSHPOŁ'SKII, V. I., GERMAN, M. L., GRINCHUK, P. S., AND OZNOBISHIN, A. N. Numerical solution of the radiative-transfer equation for an absorbing, emitting and scattering medium with a complex 3-d geometry. *Journal of Engineering and Thermophysics* 78, No. 1 (2005), 144–154.
- [79] TRUELOVE, J. S. Three-dimensional radiation in absorbing-emitting-scattering media using the discrete-ordinates approximation. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 39, No. 1 (1998), 27–31.
- [80] TSAI, R. W., AND LOYALKA, S. K. A numerical method for solving the integral equation of neutron transport - Part III. *Nuclear Science and Engineering* 59 (1976), 536–540.
- [81] VALOUGEORGIS, D. An analytical solution of the S-model kinetic equations. *Z. Angew. Math. Phys.* 54 (2003), 112–124.
- [82] VASUDEVAIAH, M., AND BALAMURUGAN, K. Heat transfer of rarefied gases in a corrugated microchannel. *International Journal of Thermal Sciences* 40 (2001), 454–468.
- [83] WELLELE, O. J. M. *Identificação de propriedades termofísicas de materiais semitransparentes a altas temperaturas*. Tese de Doutorado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia da UFRJ, Rio de Janeiro, 2007.
- [84] WICK, G. C. Über ebene diffusionsproblem. *Z. Phys.* 120 (1943), 702–705.
- [85] WILLIAMS, M. M. R. *Mathematical Methods in Particle Transport Theory*. Butterworth, London, 1971.
- [86] WILLIAMS, M. M. R. A review of the rarefied gas dynamics theory associated with some classical problems in flow and heat transfer. *Z. Angew. Math. Phys.* 52 (2001), 500–516.

- [87] WOOD, J. *Computational Methods in Reactor Shielding*. Pergamon Press, Oxford, England, 1982.