

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

**Um Estudo Sobre Equações Auxiliares em
Formulações Nodais Explícitas para
Solução da Equação de Transporte de
Nêutrons Bidimensional**

por

Solange Regina Cromianski

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

Profa. Dra. Liliane Basso Barichello
Orientadora

Porto Alegre, 13 de Julho de 2016.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Cromianski, Solange Regina

Um Estudo Sobre Equações Auxiliares em Formulações Nodais Explícitas para Solução da Equação de Transporte de Nêutrons Bidimensional / Solange Regina Cromianski.— Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2016.

118 p.: il.

Tese (Doutorado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2016.

Orientadora: Barichello, Liliane Basso

Tese: Matemática Aplicada

**Um Estudo Sobre Equações Auxiliares em Formulações
Nodais Explícitas para Solução da Equação de Transporte
de Nêutrons Bidimensional**

por

Solange Regina Cromianski

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

Doutor em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Fenômenos de Transporte

Orientadora: Profa. Dra. Liliane Basso Barichello

Banca examinadora:

Prof. Dr. Hermes Alves Filho

IPRJ-UERJ

Profa. Dra. Patrícia Rodrigues Fortes

UFSM-FW

Profa. Dra. Eliete Biasotto Hauser

FAMAT-PUCRS

Tese apresentada e aprovada em

13 de Julho de 2016.

Prof. Dr. Carlos Hoppen

Coordenador

*Porque pela graça sois salvos, por meio da fé;
e isto não vem de vós é dom de Deus.
(Efésios 2.8)*

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço a Deus por estar sempre presente em minha vida, me iluminando, me guiando e me dando forças para continuar e nunca desistir.

Aos meus pais Emílio Luiz Cromianski e Tânia Maria Cromianski, agradeço o exemplo de vida, o carinho, o amor, o cuidado que tiveram comigo e pelo incentivo incondicional que me deram durante toda essa minha trajetória.

Agradeço ao meu amor Ranon de Souza Gomes, pelo companheirismo, amor, carinho e incentivo.

Agradeço, em especial, a minha orientadora, Dra. Liliane Basso Barichello, pela oportunidade, conhecimento, paciência, incentivo e amizade.

A minha colega, Camila Becker Picoloto, agradeço pela amizade e pela ajuda durante toda essa jornada.

Ao professor Dr. Rudnei Dias da Cunha, pelo auxílio na realização deste trabalho e ao professor Dr. Yousry Azmy pelos ensinamentos compartilhados.

Agradeço a todos os meus colegas, amigos e demais familiares que contribuíram direta ou indiretamente para a realização deste trabalho.

Agradeço à CAPES pela concessão de bolsa de estudo, possibilitando a realização desta pesquisa.

Sumário

AGRADECIMENTOS	v
LISTA DE FIGURAS	viii
LISTA DE TABELAS	ix
LISTA DE ABREVIATURAS	x
LISTA DE SÍMBOLOS	xi
RESUMO	xiii
ABSTRACT	xiv
1 INTRODUÇÃO	1
2 EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE NÊUTRONS	9
2.1 Equação de transporte de nêutrons multidimensional	9
2.2 Quadratura simétrica de Nível	10
2.3 Conjuntos de Quadratura Legendre-Chebyshev	12
2.3.1 Quadratura Legendre-Chebyshev Quadrangular	13
2.3.2 Quadratura Legendre-Chebyshev Triangular	14
2.4 Quadratura Quadruple Range QR	16
3 FORMULAÇÃO NODAL BIDIMENSIONAL EM ORDENADAS DIS- CRETAS	17
3.1 Equação de Ordenadas Discretas	17
3.2 Esquema ADO Nodal	18
3.3 Solução Homogênea pelo Método ADO na Região r	22
4 EQUAÇÕES AUXILIARES: TERMOS DE FUGA TRANSVERSAIS 27	
4.1 Algumas Abordagens Existentes na Literatura	27
4.1.1 Método SGF-CN	27
4.1.2 Método SGF-LN	28
4.1.3 Método SGF-ExpN	28
4.1.4 Método LTS_N2D -DiagExpN	28
4.1.5 Método AHOT	28
4.1.6 Equações auxiliares: método ADO	29

4.1.6.1	Aproximações em termos dos fluxos médios integrados	29
4.1.6.2	Aproximações em termos das soluções dos problemas unidimensionais in- tegrados	30
4.1.6.3	Aproximações por polinômios de ordem zero	31
4.1.7	Equações Auxiliares: propostas alternativas	32
5	SOLUÇÃO PARTICULAR	34
5.1	Caracterização do termo fonte	34
5.2	Solução particular via função de Green	36
5.3	Solução geral do problema	39
6	RESULTADOS NUMÉRICOS	42
6.1	Meio Homogêneo: Fluxo Escalar Médio	42
6.1.1	Caso teste 1	43
6.1.2	Caso teste 2	47
6.2	Meio Heterogêneo: Fluxo Escalar Médio	65
6.2.1	Caso teste 3	65
6.2.2	Caso teste 4	76
7	CONSIDERAÇÕES FINAIS	83
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	85
APÊNDICE A	FORMULAÇÃO NODAL DEFINIDA EM DOMÍNIO COMPLETO	99

Lista de Figuras

Figura 2.1	Quadratura Nível Simétrica LQ_N , para $N=6$	11
Figura 2.2	Configuração dos pesos por octantes, para $N = 2, 4, 6, 8$ e 10	12
Figura 2.3	Quadratura $P_N T_N$, $N = 6$	14
Figura 2.4	Quadratura $P_N T_N S_N$, $N = 6$	15
Figura 3.1	Representação da divisão do domínio em regiões.	18
Figura 3.2	Escolha do ordenamento das direções $\Psi_{yr}(x, \Omega_i)$	21
Figura 3.3	Escolha do ordenamento das direções $\Psi_{xr}(y, \Omega_i)$	21
Figura 4.1	Representação dos diferentes domínios.	29
Figura 6.1	Representação do domínio do problema, caso teste 1.	43
Figura 6.2	Representação do fluxo escalar médio para cada região	47
Figura 6.3	Representação do fluxo escalar médio para a região I, $\sigma_s = 0.9$	55
Figura 6.4	Representação do fluxo escalar médio para a regiões II e III, $\sigma_s = 0.9$	55
Figura 6.5	Representação do fluxo escalar médio para a região IV, $\sigma_s = 0.9$. . .	56
Figura 6.6	Representação do fluxo escalar médio para a região I, $\sigma_s = 0.3$	62
Figura 6.7	Representação do fluxo escalar médio para a regiões II e III, $\sigma_s = 0.3$	63
Figura 6.8	Representação do fluxo escalar médio para a região IV, $\sigma_s = 0.3$. . .	64
Figura 6.9	Configuração do domínio do problema, caso teste 3.	65
Figura 6.10	Representação do fluxo escalar médio da região I, quadratura LQ_N . .	74
Figura 6.11	Representação do fluxo escalar médio das regiões II e III, quadratura LQ_N	74
Figura 6.12	Representação do fluxo escalar médio da região IV, quadratura LQ_N .	75
Figura 6.13	Configuração do domínio do problema, caso teste 4.	76
Figura 6.14	Representação do fluxo escalar médio na região, quadratura LQ_N . . .	80
Figura A.1	Representação geométrica do domínio do problema.	99
Figura A.2	Escolha da numeração das direções em S_4 para a equação nodal integrada em y , quadratura LQ_N	101
Figura A.3	Escolha da numeração das direções em S_4 para a equação nodal integrada em x , quadratura LQ_N	102
Figura A.4	Representação geométrica do domínio do problema.	113

Lista de Tabelas

Tabela 6.1	Fluxo escalar médio, caso teste 1	44
Tabela 6.2	Fluxo escalar médio, caso teste 2 - região I, $\sigma_s = 0.9$	51
Tabela 6.3	Fluxo escalar médio, caso teste 2 - regiões II e III, $\sigma_s = 0.9$	52
Tabela 6.4	Fluxo escalar médio, caso teste 2 - região IV, $\sigma_s = 0.9$	53
Tabela 6.5	Fluxo escalar médio, caso teste 2 - região I, $\sigma_s = 0.3$	59
Tabela 6.6	Fluxo escalar médio, caso teste 2 - regiões II e III, $\sigma_s = 0.3$	60
Tabela 6.7	Fluxo escalar médio, caso teste 2 - região IV, $\sigma_s = 0.3$	61
Tabela 6.8	Fluxo escalar médio, caso teste 3 - região I	71
Tabela 6.9	Fluxo escalar médio, caso teste 3 - regiões II e III	72
Tabela 6.10	Fluxo escalar médio, caso teste 3 - região IV	73
Tabela 6.11	Fluxo escalar médio, caso teste 4.	79
Tabela A.1	Fluxo escalar, $x = 0.5 \text{ cm}$, $y = 0.5 \text{ cm}$	115
Tabela A.2	Fluxo escalar, $x = 0.7 \text{ cm}$, $y = 0.7 \text{ cm}$	116
Tabela A.3	Fluxo escalar, $x = 0.98 \text{ cm}$, $y = 0.98 \text{ cm}$	118

LISTA DE ABREVIATURAS

ADO	Método Analítico de Ordenadas Discretas
AHOT	Método Nodal <i>Arbitrarily High Order Transport</i>
CCN	Modelo nodal constante constante
EB	Equação de Boltzmann
LLN	Modelo nodal linear
LQ_N	Quadratura Simétrica de Nível
$P_N T_N S_N$	Quadratura Legendre-Chebyshev Triangular
$P_N T_N$	Quadratura Legendre-Chebyshev Quadrangular
P_N	Polinômios de Legendre
SGF-CN	Modelo espectro-nodal constante
SGF-LN	Modelo espectro-nodal linear
SGF-ExpN	Modelo espectro-nodal exponencial
T_N	Polinômios de Chebyshev

LISTA DE SÍMBOLOS

$a_m, a_{m-1}, b_m, b_{m-1}$	Divisões do domínio x e y
x, y	Caracterizam as posições das partículas, cm
ω	Pesos da quadratura numérica
θ	Ângulo polar
ϕ	Ângulo azimutal
r	Região considerada
σ_{tr}	Seção de choque macroscópica total cm^{-1}
σ_{sr}	Seção de choque macroscópica de espalhamento cm^{-1}
$A_{yr}, D_{yr}, A_{xr}, D_{xr}$	Matrizes associadas ao problema de autovalor
$A_{j,r}, A_{j+M/2,r}$	Coefficientes da solução homogênea
$B_{j,r}, B_{j+M/2,r}$	Coefficientes da solução homogênea
$A_{j,r}(x), A_{j+M/2,r}(x)$	Coefficientes da solução particular
$A_{j,r,\alpha}, A_{j+M/2,r,\alpha}$	Coefficientes da solução particular
$B_{j,r}(y), B_{j+M/2,r}(y)$	Coefficientes da solução particular
$B_{j,r,\alpha}, B_{j+M/2,r,\alpha}$	Coefficientes da solução particular
$D_{m,r,i}, D_{m-1,r,i}$	Coefficientes das aproximações nos contornos das regiões
$C_{m,r,i}, C_{m-1,r,i}$	Coefficientes das aproximações nos contornos das regiões
$\lambda_{yr}, \lambda_{xr}$	Autovalores do problema homogêneo médio
M	Número de direções discretas
N	Ordem da quadratura
ν_{jr}, γ_{jr}	Constantes de separação
$\mathbf{\Omega} = (\mu, \eta)$	Vetor direção das partículas
$\Phi_{yr}(\nu, \mathbf{\Omega}), \Phi_{xr}(\gamma, \mathbf{\Omega})$	Autofunções do problema homogêneo
$\overline{\phi_r}$	Fluxo escalar na região r
$\Psi(x, y, \mathbf{\Omega})$	Fluxo angular
$\Psi_{yr}(x, \mathbf{\Omega}), \Psi_{xr}(y, \mathbf{\Omega})$	Fluxo angular médio em y e x da região r
$\Psi_{yr}^h(x, \mathbf{\Omega}), \Psi_{xr}^h(y, \mathbf{\Omega})$	Solução homogênea média em y e x
$\Psi_{yr}^p(x, \mathbf{\Omega}), \Psi_{xr}^p(y, \mathbf{\Omega})$	Solução particular média em y e x
$Q(x, y)$	Fonte isotrópica
$Q_y(x), Q_x(y)$	Fonte isotrópica média em y e x

$Q_{yr}(x, \mathbf{\Omega}), Q_{xr}(y, \mathbf{\Omega})$	Termo fonte das equações nodais integradas transversalmente
$U_{yr}(\nu, \mathbf{\Omega}), U_{xr}(\gamma, \mathbf{\Omega})$	Vetores auxiliares
$V_{yr}(\nu, \mathbf{\Omega}), V_{xr}(\gamma, \mathbf{\Omega})$	Vetores auxiliares

RESUMO

Neste trabalho, uma abordagem analítica é utilizada juntamente com esquemas nodais para resolução de um problema de transporte de nêutrons de fonte fixa, definido em meios homogêneos e heterogêneos, em geometria cartesiana bidimensional, com espalhamento isotrópico. A metodologia é desenvolvida a partir da versão em ordenadas discretas da equação bidimensional de transporte. Utiliza-se esquemas nodais para obtenção de equações unidimensionais integradas transversalmente, as quais são resolvidas via método ADO (*Analytical Discrete Ordinates*). Expressões explícitas em termos das variáveis espaciais são determinadas para os fluxos angulares médios em cada região em que o domínio foi subdividido. Para obtenção da solução em todo o domínio, acopla-se as soluções de cada região às regiões vizinhas, através de um sistema linear. Neste contexto, o objetivo principal é o estudo relacionado às equações auxiliares necessárias para aproximação dos termos desconhecidos nos contornos do domínio ou das interfaces, que surgem devido ao processo de integração. Três abordagens distintas para aproximação dos termos de fuga transversais, oriundos da integração transversal, são estudadas: aproximações por constantes, aproximações lineares e aproximações exponenciais, as quais são incorporadas ao termo fonte. Adicionalmente, neste trabalho quatro esquemas de quadraturas numéricas são utilizados para aproximar o termo integral de espalhamento: quadratura Simétrica de Nível (LQ_N), Legendre-Chebyshev quadrangular ($P_N T_N$), Legendre-Chebyshev triangular ($P_N T_N S_N$) e Quadruple Range (QR). Resultados numéricos são obtidos para o fluxo escalar médio em regiões do domínio e comparados com resultados disponíveis na literatura bem como gerados pelo código AHOT. A análise dos resultados confirma a viabilidade da proposta das equações auxiliares alternativas, mantendo a eficiência computacional já verificada em outras abordagens do método ADO, no entanto indica que estudos complementares necessitam ser realizados para caracterizar vantagens adicionais no uso de tais propostas.

ABSTRACT

In this work, an analytical approach is used along with nodal schemes for solving fixed source neutron transport problems defined in two-dimensional homogeneous and heterogeneous medium with isotropic scattering. The methodology is developed from the discrete ordinates version of the two-dimensional transport equation. Nodal procedures are performed to derive one-dimensional transverse integrated equations, which are solved by the ADO method. Explicit expressions in terms of the spatial variables are obtained for averaged angular fluxes in each region in which the domain is subdivided. The solution for the whole domain is obtained through the coupling of the local solutions in a general linear system. In this context, the main goal is to analyse the use of different auxiliary equations to describe the unknown transverse leakage terms on the boundaries and interfaces. Three different approaches are used to approximate the unknown transverse leakage terms: constant, linear and exponential approximations, which are incorporated into the source term. Four numerical quadrature schemes are used to approximate the integral scattering term: Level Symmetric quadrature scheme LQ_N , Legendre-Chebyshev quadrangular $P_N T_N$, Legendre-Chebyshev triangular $P_N T_N S_N$ and Quadruple Range (QR). The numerical results obtained for region-averaged scalar fluxes are compared with results available in the literature as well as numerical results provided by the AHOT code. The analysis of the results confirm the feasibility with computational efficiency as usual for the ADO method. However subsequent work is indicated to evidence advantages of the proposed auxiliary equations.

1 INTRODUÇÃO

A modelagem e simulação de fenômenos que envolvem o transporte de partículas é tema relevante de pesquisa atual em várias áreas. Interesse no estudo de geração de energia elétrica ou mesmo aplicações médicas são sempre razões para estudos experimentais, numéricos e computacionais envolvendo o transporte de nêutrons [55, 69, 80, 93]. Acrescenta-se a isso: modelagens computacionais em problemas de *oil-well logging*, relacionados à prospecção de hidrocarbonetos (petróleo ou gás), que são estimados através do uso de sondas nucleares [9, 16]; aplicações relacionadas ao transporte de radiação, onde por exemplo, estimativas da distribuição de doses em tratamentos de radioterapia são determinadas pelo método Monte Carlo [79]; estudos em microsistemas (microcanais, microssensores) com gases rarefeitos, em que a taxa de fluxo de massa de um gás é calculada pela equação linearizada de Boltzmann [62, 102].

Estudos acima relacionados referem-se ao transporte de nêutrons, fótons ou partículas de gases rarefeitos, fenômenos que podem ser modelados pela Equação de Boltzmann (EB). Sabe-se que, a EB desenvolvida originalmente por Ludwig Boltzmann em 1872 [35], foi primeiramente utilizada na teoria cinética dos gases. É uma equação íntegro-diferencial e fornece uma descrição quantitativa da distribuição espacial, direcional, energética e temporal das partículas em meios materiais. A incógnita, é uma função de distribuição que retrata a evolução temporal da distribuição das partículas e depende de sete variáveis independentes: três espaciais, duas angulares, uma da energia e uma do tempo [58]. Um estudo detalhado sobre as propriedades e a forma de derivação da EB, bem como a descrição em sua forma linear e linearizada, pode ser encontrado nos livros de Bell e Glasstone [33], Duderstadt [55] e Cercignani [41, 42].

O enfoque desse trabalho está relacionado à equação de transporte de nêutrons, também conhecida como equação linear de Boltzmann ou ainda equação de transporte.

Os nêutrons foram identificados pela primeira vez em 1932 pelo físico James Chadwick [118], são partículas nucleares eletricamente neutras e fazem parte da composição dos núcleos dos átomos. Devido a sua neutralidade elétrica, os nêutrons interagem diretamente com os núcleos e a principal forma de interação do nêutron com a matéria é através do espalhamento e absorção. O transporte de nêutrons é relevante, por exemplo, em estudos relacionados aos reatores nucleares, em particular, no caso em que a geração

de energia nuclear é gerada pelo processo de fissão. A fissão nuclear é o processo ao qual lança-se um nêutron em direção ao átomo de Urânio que ao se chocar, divide o átomo em dois novos átomos liberando dois ou três nêutrons do núcleo; esses novos nêutrons se chocam com outros átomos, transformando esse processo em uma reação em cadeia, que precisa ser controlada [104]. Nesse contexto, utiliza-se a equação de transporte de nêutrons, que modela a migração dos nêutrons através de um meio material, sendo que essa migração envolve um grande número de colisões aleatórias entre os nêutrons e átomos desse meio.

A modelagem deste processo de transporte dos nêutrons segue, em geral, duas abordagens distintas: a abordagem probabilística ou a abordagem determinística. Os métodos com enfoque probabilísticos como o método de Monte Carlo [60, 115], tem o objetivo de resolver um problema de forma a considerar o maior número de efeitos e características físicas reais no modelo, utilizando então técnicas estatísticas para sua solução. Por outro lado, na abordagem determinística, busca-se resolver precisamente uma forma aproximada da equação, como no caso da utilização do método dos harmônicos esféricos (P_N) [33, 39, 57, 66] e o método de ordenadas discretas [3, 14, 18, 22, 29, 65, 100, 103], os quais propõem aproximações nas variáveis angulares da equação de transporte.

Neste trabalho, utiliza-se a formulação de ordenadas discretas para o tratamento da variável angular da equação de transporte de nêutrons. O método de ordenadas discretas (S_N), foi proposto por Wick [114] e Chandrasekhar [45], é um dos métodos clássicos conhecido e utilizado na solução da equação de problemas de transporte. Esse método tem como base a discretização das variáveis angulares em direções (ordenadas discretas), utilizando um conjunto de quadraturas numéricas para a aproximação do termo integral da fonte de espalhamento, obtendo-se um sistema de equações diferenciais que podem ser resolvidas através de abordagens analíticas ou numéricas.

Na literatura, ao longo dos anos algumas abordagens foram propostas para resolução analítica de problemas de ordenadas discretas unidimensionais. A primeira a ser citada foi proposta por Chandrasekhar [45], posteriormente outras formulações foram propostas, como o método *SGF* (*Spectral Green's Function*) e o método *LTS_N*. O método *SGF* foi proposto por Barros e Larsen em 1992 [27], e consiste em discretizar as variáveis espaciais em células nas quais as equações de ordenadas discretas são resolvidas numericamente, porém sem qualquer erro de truncamento espacial no caso de problemas

unidimensionais [30, 76, 78], ou seja, os termos de fonte de espalhamento não são aproximados, são tratados analiticamente, e as únicas aproximações utilizadas por esse método ocorrem aos termos de fuga transversal, que são aproximados por polinômios de baixa ordem. As equações provindas do método SGF são geralmente resolvidas por esquemas iterativos. O método LTS_N , proposto por Vilhena e Barichello em 1991 [111], consiste em aplicar a transformada de Laplace nas variáveis espaciais do sistema de equações diferenciais ordinárias oriundas da aproximação em ordenadas discretas, transformando-os em um sistema algébrico para os fluxos transformados. Após a resolução desse sistema, o uso da transformada inversa de Laplace fornece uma expressão analítica para o fluxo transformado. Como para obtenção dessa solução é necessário a inversão da matriz definida em termos de parâmetros do problema, alguns métodos foram desenvolvidos para essa finalidade, como o método de diagonalização proposto por Segatto e Vilhena em 1999 [99], bem como outras abordagens relacionadas a problemas multidimensionais [64, 110, 116, 117]. Ainda hoje, o método analítico LTS_N é muito utilizado e destacam-se vários trabalhos na literatura [20, 65, 98, 105].

Posteriormente, uma nova formulação foi proposta, conhecido como método analítico de ordenadas discretas, denominado método ADO (*Analytical Discrete Ordinates*). O método ADO foi proposto por Barichello e Siewert em 1999 [18], com o objetivo de resolver analiticamente o sistema de equações unidimensionais oriundo das equações de ordenadas discretas, diferenciando-se da proposta de Chandrasekhar pela utilização de esquemas de quadratura arbitrários, bem como, na forma de obtenção das chamadas constantes de separação através de um problema de autovalores evitando a busca de raízes de polinômios característicos. Além disso, os termos exponenciais presentes na solução foram reescritos a fim de evitar problemas computacionais de *overflow*.

Desde então, o método ADO tem-se mostrado uma ferramenta muito útil na resolução de problemas de transporte de nêutrons tanto unidimensionais quanto bidimensionais [21, 22, 24, 36, 84, 86, 106, 108], bem como na dinâmica de gases rarefeitos [38, 59, 92, 94, 95] e até mesmo, em problemas de transferência radiativa [47, 61, 88, 89].

Por outro lado, no que diz respeito ao tratamento das variáveis espaciais das equações de ordenadas discretas, no caso de problemas multidimensionais destacam-se os métodos nodais [6, 9, 14, 15, 28, 29, 113], geralmente utilizados de tal forma que, as equações multidimensionais em ordenadas discretas são integradas transversalmente em

uma ou mais variáveis espaciais de forma a se reduzir a complexidade do problema. As equações integradas via métodos nodais, são em geral resolvidas numericamente utilizando aproximações por polinômios de baixa ordem tanto para os termos de fuga transversal, oriundos da integração transversal, como para os termos de fonte de espalhamento.

Os métodos nodais podem ser caracterizados em dois grupos: métodos nodais polinomiais [6, 15, 112, 113] e métodos espectralnodais [27, 31, 53, 76, 77]. Os métodos nodais polinomiais, também conhecidos como métodos nodais convencionais, aproximam tanto o termo de fuga transversal quanto o termo de fonte de espalhamento das equações S_N , por polinômios de baixa ordem. Encontram-se na literatura dois métodos polinomiais mais conhecidos, o método CCN (*Constante-Constant Nodal*) [113], que aproxima os termos de fuga transversal e o termo de fonte de espalhamento por polinômios de ordem zero, ou seja, aproximação por constantes, e o método LLN (*Linear-Linear Nodal*) [15, 112], que utilizam aproximações de primeiro grau, ou seja, polinômios de ordem um.

Por outro lado, os métodos espectralnodais desenvolvidos por Barros e Larsen em 1992 [27], aproximam apenas o termo de fuga transversal por polinômios de baixa ordem, os termos relacionados à fonte de espalhamento são tratados analiticamente. Nessa classe de métodos, os termos de fuga transversais têm sido aproximados de maneiras distintas: primeiramente os termos de fuga transversal foram aproximados por constantes, e o método ficou conhecido como SGF-CN (*Spectro Greens's Function Constant Nodal*) [27, 28, 52]. Em sequência, exponenciais foram usadas para aproximar os termos de fuga transversais, onde a constante de decaimento é fixada e identificada como sendo a seção de choque macroscópica de absorção, esse método denominou-se SGF-ExpN (*Spectro Greens's Function Exponential*) [26]. Inicialmente o método SGF-ExpN foi utilizado em domínios espaciais homogêneos [25], logo após começou a ser utilizado para tratamento de problemas em domínios espaciais heterogêneos [49, 75]. Mais tarde, surge o método SGF-LN (*Spectro Greens's Function Linear Nodal*) [50]. Nesse método os termos de fuga transversais são aproximados por polinômios de primeira ordem e o termo de fonte é tratado de forma exata [51, 54, 119].

No contexto dos problemas multidimensionais, destaca-se também o método AHOT (*Arbitrarily High Order Transport*), na resolução das equações de ordenadas discretas em meios bidimensionais homogêneos e heterogêneos com espalhamento isotrópico. Esse método baseia-se na utilização de métodos nodais polinomiais e também do método das

características para a resolução das variáveis espaciais, denominados respectivamente por, AHOT-N [13] e AHOT-C [8, 10].

Códigos computacionais também têm sido utilizados no tratamento de problemas multidimensionais de transporte de partículas. Grande parte são baseados nas aproximações em ordenadas discretas. Dentre esses códigos pode-se citar o código ANISN [56], utilizado para resolver iterativamente a equação de transporte de nêutrons unidimensional discretizada a fim de obter o fluxo neutrônico [43, 44, 67]. Bem como, os códigos DOT [90] e TWOTRAN [70], que diferentemente do anterior, resolvem as equações de ordenadas discretas bidimensionais utilizando o método *diamond difference*, nesses códigos as variáveis espaciais são aproximadas por malhas retangulares. No entanto, o código TRIDENT [96, 97], resolve as equações de ordenadas discretas bidimensionais, utilizando método de elementos finitos triangulares para aproximar as variáveis espaciais. Já os programas computacionais TORT [91] e DORT [12], calculam o fluxo de nêutrons da equação de ordenadas discretas em três dimensões e em duas dimensões, respectivamente, com auxílio dos métodos nodais [11, 32, 46, 101].

Apesar de existirem vários métodos numéricos e computacionais que auxiliam na resolução da equação de transporte de nêutrons multidimensional, há dificuldades na obtenção de resultados *benchmark*, bem como interesse em análise relativa aos erros espaciais e angulares. Assim, pesquisas nessa área continuam intensas e o uso de métodos analíticos continua sendo de grande interesse, tendo em vista vantagens do ponto de vista de custo computacional e precisão dos resultados. Nesse sentido, devido aos resultados precisos do método ADO na resolução de problemas de transporte unidimensionais, a aplicação do mesmo em problemas de transporte multidimensionais passou a ser investigada nos últimos anos.

A utilização do método ADO em problemas de transporte multidimensionais está relacionada ao uso de abordagens nodais, uma vez que, as mesmas possibilitam a obtenção de um sistema de equações unidimensionais integradas transversalmente. Essas equações são resolvidas pelo método ADO, sendo a solução explícita em termos das variáveis espaciais.

No entanto, a utilização das integrações transversais nas equações de ordenadas discretas geram os termos de fuga transversais (ou fluxos desconhecidos no contorno), que precisam ser aproximados. Para o tratamento desses termos desconhecidos diferen-

tes propostas têm sido implementadas na literatura e particularmente em associação com o método ADO já se tem utilizado diferentes abordagens como: aproximações relacionadas aos fluxos angulares médios emergentes [22, 81, 107], aproximações por constantes [82, 87, 108], e aproximações em termos das soluções dos problemas unidimensionais integrados [85, 86].

Nessas referências acima citadas, a formulação ADO foi desenvolvida para problemas de fonte fixa em uma geometria onde a fonte aparece no interior do domínio, o qual é circundado por condições do tipo vácuo.

Nos primeiros problemas bidimensionais tratados pelo método ADO, a partir de 2009 [21, 23, 36], os termos de fuga transversais foram aproximados através de relação com fluxos médios no interior do domínio. Tal abordagem tem a vantagem de não alterar o termo de fonte do problema original, no entanto, depende da proposição de um parâmetro *a priori*. Mais tarde, em 2011, Prolo Filho [86], propôs uma nova abordagem para os termos de fuga transversais. Nessa nova proposta, os fluxos angulares desconhecidos nos contornos do domínio são escritos de forma bastante geral, em termos das soluções dos problemas unidimensionais integrados e são incorporados ao termo fonte. Para isso soluções particulares construídas via funções de Green são necessárias.

Em sequência, buscando simplificar as condições de solução dos problemas bidimensionais, condições reflexivas foram incorporadas para descrever condições de contorno em geometrias que devido à simetria do problema, representam uma quarta parte da configuração anteriormente citada. Nesta nova configuração, aproximações por constantes [81, 84, 106, 108] e aproximações por fluxos médios [84] foram utilizadas para descrever os termos de fuga transversais.

Outro aspecto que se diferencia nos diversos problemas bidimensionais abordados pelo método ADO, é a utilização de diferentes propostas para a construção de soluções particulares: por exemplo, baseada na resolução de um sistema mais simples, onde o termo fonte é aproximado por constantes [21, 23, 36, 81, 84, 106, 108], ou através de construção nas funções de Green, a qual é utilizada quando os termos não homogêneos são mais gerais [86]. Destacam-se os seguintes problemas bidimensionais com fonte fixa isotrópica, monoenergéticos e independentes do tempo utilizados pelo método ADO: problemas homogêneos [21, 23, 36, 81, 108] e problemas heterogêneos [17, 83, 84, 106].

Uma característica ainda importante do uso do método ADO em problemas bidimensionais, é referente à possibilidade de utilização de diferentes esquemas de quadratura numérica para representação das ordenadas discretas, não se restringindo à escolha do esquema de quadratura a ser utilizado, não se restringindo à escolha clássica (*Level Symmetric Quadrature*) (LQ_N) [72]. Trabalhos recentes têm abordado o tema (Tres [106] e Barichello et al. [19]). Nesse sentido, outros esquemas passaram a ser considerados: *Quadruple Range* (QR) [1] e Legendre-Chebyshev ($P_N T_N$) [71].

A quadratura *Level Symmetric Quadrature* (LQ_N) [72], preserva a simetria em relação a rotação $\pi/2$ em torno do centro da esfera unitária, no entanto, esta quadratura está restrita até a ordem $N = 20$, pois a partir desse valor, alguns pesos começam a ser negativos, isso pode ocasionar soluções fisicamente impossíveis no cálculo dos fluxos angulares das equações de ordenadas discretas. Nesse sentido, para contornar esse problema e possibilitar uso de valores de ordens maiores, outras quadraturas são propostas: a *Quadruple Range* (QR) proposta por Abu-Shumays [1], trata-se de um esquema de quadratura produto que integra de forma precisa funções que são descontínuas nos contornos [68], e a quadratura Legendre-Chebyshev ($P_N T_N$) [71], onde os ângulos polares são definidos como sendo as raízes dos polinômios de Legendre de ordem N e os ângulos azimutais são calculados a partir das raízes dos polinômios de Chebyshev [73].

Observa-se dos trabalhos anteriores, que o método ADO tem possibilitado resultados satisfatórios e comparáveis com a literatura. Considera-se, no entanto, que a formulação e mesmo a implementação do método continuam em desenvolvimento e aprimoramento, buscando-se a solução de classe mais abrangente de problemas e estabelecimento de uma análise ampla relativa à diferentes aspectos: um deles a questão das diferentes aproximações que podem ser usadas pelo método ADO e mesmo outros métodos nodais, para os chamados termos de fuga transversal, desconhecidos nos contornos do domínio ou de nós interiores.

Com o objetivo de trazer maiores contribuições para análise das soluções de problemas multidimensionais utilizando o método ADO, neste trabalho duas novas abordagens para o tratamento dos fluxos desconhecidos nos contornos são propostas, abordagens lineares e exponenciais que até o momento não haviam sido utilizadas com o método ADO. Tais propostas são aqui aplicadas na solução de problemas em meios bidimensionais homogêneos e heterogêneos, utilizando quatro esquemas diferenciados de quadraturas

numéricas para representação das ordenadas discretas, possibilitando a consideração de ordens superiores ao tradicional esquema LQ_N . O aspecto de implementação do método em diferente número de subdivisões do domínio também é investigado. Tal estudo contribui assim para a busca e estabelecimento de soluções de referência.

Dessa forma, no capítulo 2 apresenta-se a equação de transporte de nêutrons multidimensional e descreve-se os diferentes esquemas de quadraturas numéricas multidimensionais. No capítulo 3 apresenta-se a equação de transporte de nêutrons bidimensional em sua versão em ordenadas discretas. O domínio espacial é dividido em r regiões e para obtenção das equações integradas transversalmente nas variáveis espaciais x e y , aplica-se os métodos nodais.

Da integração transversal surgem os termos de fuga transversais que devem ser aproximados, dessa forma, apresenta-se no capítulo 4 as três aproximações utilizadas nesse trabalho, constante que já foi utilizada em trabalhos anteriores e duas novas abordagens de aproximações propostas nesta tese: lineares e exponenciais. Nesse capítulo, também faz-se uma revisão bibliográfica sobre as diferentes abordagens já utilizadas a fim de mostrar o diferencial desse trabalho.

No capítulo 5, a proposta de solução particular é apresentada, sendo que para esse trabalho utilizou-se as funções de Green. Os resultados numéricos obtidos, bem como as comparações com resultados disponíveis na literatura, são apresentados no capítulo 6 e no capítulo 7 apresenta-se as conclusões desse trabalho.

Finalmente, salienta-se que estudos anteriores (apresentados no exame de qualificação) encontram-se no final desse trabalho na forma de um apêndice. Naquele caso, além da formulação ter sido definida com base em uma única região (ou nodo), os resultados numéricos foram avaliados para comparação com referência que não se trata de método nodal, o que gera inconsistências e dificuldades de estabelecer análise comparativa. De qualquer forma entendeu-se ser importante registrar tais resultados neste texto.

2 EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE NÊUTRONS

Neste capítulo apresenta-se a equação de transporte de nêutrons multidimensional em coordenadas cartesianas, bem como os quatro tipos de quadraturas numéricas que definem as direções discretas e serão utilizadas em associação com o método de ordenadas discretas: Quadratura Simétrica de Nível (LQ_N), Quadratura Legendre-Chebyshev Quadrangular ($P_N T_N$), Quadratura Legendre-Chebyshev Triangular ($P_N T_N S_N$) e a Quadratura Quadruple Range (QR).

2.1 Equação de transporte de nêutrons multidimensional

A equação de transporte de nêutrons é uma versão linear da equação de Boltzmann, em sua forma original possui sete variáveis envolvidas, três de posição, três de direção e uma de tempo. Essa equação pode ser deduzida a partir de um balanço de partículas realizado no espaço de fase do problema, ou seja, espaço das variações das grandezas onde varia-se posição e direção. Nesse balanço é analisado o que acontece com as partículas no seu estado atual, pois a mudança de posição pode ocasionar a mudança no estado em que elas se encontravam, na localização, na direção, na energia e até mesmo no tempo [58].

De acordo com Lewis e Miller [72], a equação de transporte independente do tempo em um meio não-multiplicador a um grupo de energia, é dada por

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

onde $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ representa o fluxo angular de nêutrons com volume elementar dV e unidade de ângulo sólido $d\mathbf{\Omega}$, $\mathbf{r} = (x, y, z)$ é o vetor posição e $\mathbf{\Omega}$ é o vetor unitário, onde $\mathbf{\Omega} = (\mu, \eta, \xi)$ representa as direções das partículas, $\sigma_t(\mathbf{r})$ é a seção de choque macroscópica total e $\sigma_s(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega})$ é a seção de choque macroscópica de espalhamento, que indica a probabilidade de interação do nêutron por unidade de comprimento em sua trajetória, ou seja, indica se o nêutron vai ou não interagir com o meio hospedeiro, viajando na posição \mathbf{r} e direção $\mathbf{\Omega}'$ em um intervalo de direções $d\mathbf{\Omega}$ em torno de $\mathbf{\Omega}$. A fonte externa é representada por $Q(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$ e ∇ representa o operador gradiente.

A integral da equação (2.1) é avaliada em todas as direções Ω na esfera unitária S , sendo que o operador do fluxo angular em coordenadas cartesianas, segundo Lewis e Miller [72], é escrito como

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

As expressões dos eixos x, y, z na direção dos cossenos diretores $\Omega = (\mu, \eta, \xi)$ são, respectivamente,

$$\begin{aligned} \mu &= \sqrt{1 - \xi^2} \cos(\phi) \\ \eta &= \sqrt{1 - \xi^2} \sin(\phi) \\ \xi &= \cos(\theta), \end{aligned} \quad (2.3)$$

onde a seguinte relação é válida, $\mu^2 + \eta^2 + \xi^2 = 1$, sendo que $\theta \in [0, \pi]$ é o ângulo polar e $\phi \in [0, 2\pi]$ é o ângulo azimutal.

No caso do método de ordenadas discretas, o termo integral na equação (2.1) é aproximado por quadraturas numéricas. Dessa forma, nas próximas seções, alguns esquemas de quadraturas, utilizados nesse trabalho, são brevemente discutidos, uma vez que a descrição detalhada encontra-se no trabalho de Tres [106].

2.2 Quadratura simétrica de Nível

A Quadratura Simétrica de Nível (*Level Symmetric Quadrature-LQN*) [40, 72], é uma quadratura totalmente simétrica da forma que, o conjunto dos vetores direção (μ, η, ξ) , que compõem essa quadratura, são invariantes sob qualquer rotação de 90° graus em torno do centro na esfera unitária, dessa forma, o conjunto de coordenadas é simétrico em relação a origem e o conjunto de pontos em cada eixo é o mesmo. Devido a isso, os pontos base determinados sobre a esfera unitária preservam a simetria nos oito octantes, podendo-se então definir os pontos de quadratura em um dos octantes, refletindo-se as direções para os demais, com alterações consistentes de sinais.

Representa-se o conjunto de valores dos cossenos diretores em cada eixo segundo [37], por

$$\mu_p^2 = \mu_1^2 + \frac{(p-1)2(1-3\mu_1^2)}{N-2}, \quad 1 \leq p \leq N/2, \quad (2.4)$$

em que μ_1 é a projeção do primeiro ponto no intervalo $0 \leq \mu_1^2 \leq 1/3$.

De acordo com Lewis e Miller [72], a escolha de μ_1 é arbitrária exceto para a aproximação S_2 , onde deve-se considerar $\mu_1 = 1/\sqrt{3}$. Definida a primeira ordenada, as demais são determinadas pela equação (2.4). Nessa quadratura, o número de direções formado pelos cossenos diretores é $N(N+2)$ em toda a esfera unitária, na qual N deve ser par e representa a ordem de quadratura utilizada. Em cada octante tem-se um total de $N(N+2)/8$ direções, sendo que essas direções são dispostas em um padrão triangular com $N/2$ níveis diferentes e com $N/2 - i + 1$ pontos em cada nível i , conforme mostra a Figura 2.1.

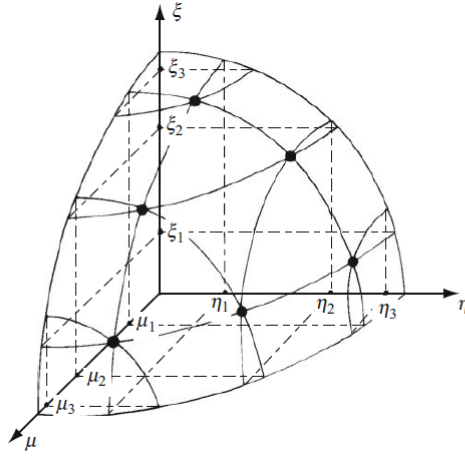


Figura 2.1: Quadratura Nível Simétrica LQ_N , para $N=6$.

Na quadratura LQ_N os pesos em cada octante são normalizados [72] tal que

$$\sum_{k=1}^{N(N+2)/8} \omega_k = 1, \quad (2.5)$$

e assim, por exemplo, para $N = 2$ caso que tem-se somente uma direção para cada octante, conseqüentemente de modo a satisfazer a equação (2.5), tem-se somente um peso e este possui valor $\omega_1 = 1$. Para $N = 4$, obtém-se 3 direções por octante, conseqüentemente para satisfazer a equação (2.5) bem como preservar a simetria, verifica-se pesos iguais $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = 0.33$. Seguindo-se esse mesmo raciocínio para outros valores de N , determina-se os demais pesos. A Figura 2.2 retrata a representação dos diferentes pesos por octante estabelecidos para as direções em cada nível.

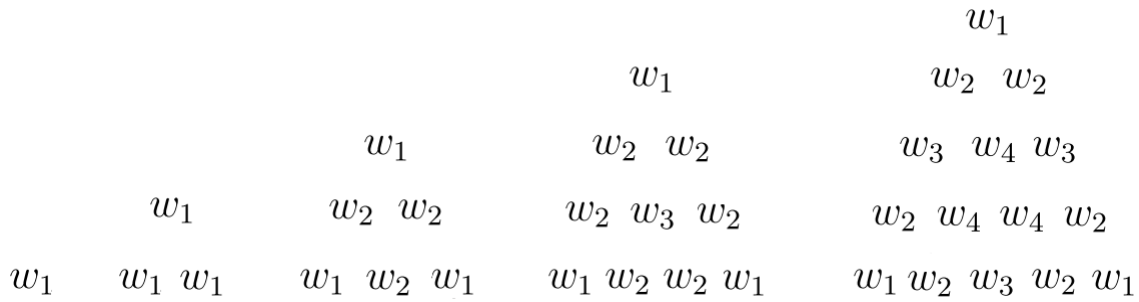


Figura 2.2: Configuração dos pesos por octantes, para $N = 2, 4, 6, 8$ e 10 .

Uma das limitações da quadratura LQ_N é que, a partir de ordens $N > 20$, alguns dos pesos desse conjunto de quadratura decrescem, e tornam-se negativos, podendo levar à soluções fisicamente não possíveis [71].

2.3 Conjuntos de Quadratura Legendre-Chebyshev

Nesta seção apresenta-se dois esquemas de quadratura numéricas Legendre-Chebyshev ($P_N T_N$) [71, 74], que são geradas através do produto de dois conjuntos de quadraturas unidimensionais, um definido na variável polar $\xi = \cos \theta$ e o outro definido na variável azimutal ϕ .

Para o tratamento da variável polar utiliza-se a quadratura de Gauss-Legendre unidimensional e, para o tratamento da variável azimutal utiliza-se a quadratura de Chebyshev de primeira classe. Esses conjuntos de quadraturas não apresentam pesos negativos, o que contorna a restrição da quadratura LQ_N para $N > 20$.

A construção dos conjuntos de quadraturas $P_N T_N$ encontra-se no trabalho de Tres [106], e aqui é reproduzida. Nesse sentido, obtém-se os polinômios de Legendre através da fórmula de recorrência [73, 74]

$$(j+1)P_{j+1}(\xi) = (2j+1)\xi P_j(\xi) - jP_{j-1}(\xi), \quad (2.6)$$

com $P_{-1}(\xi) = 0$ e $P_0(\xi) = 1$, para $-1 < \xi < 1$ e $j = 0, \dots, N$.

As ordenadas $\xi = \cos \theta$ são dadas pelas raízes dos polinômios de Legendre P_N e os pesos associados a cada nível ξ_i , com $i = 1, \dots, N/2$ são determinados pela seguinte fórmula [73, 74]

$$w_i = \frac{2}{(1 - \xi_i^2) \left[\left(\frac{dP_N}{d\xi} \right)_{\xi_i} \right]^2}. \quad (2.7)$$

Por outro lado, para a discretização da variável azimutal faz-se o uso da quadratura de Chebyshev, sendo que, a variável azimutal é definida pelas raízes dos polinômios de Chebyshev T_N de primeira espécie

$$T_l[\cos(\varpi)] = \cos(l\varpi), \quad (2.8)$$

como os polinômios de Chebyshev são ortogonais, devem satisfazer as seguintes condições

$$\int_{-1}^1 T_l(y)T_k(y)(1-y^2)^{-1/2}dy = \begin{cases} 0, & l \neq k \\ \pi, & l = k = 0 \\ \pi/2, & l = k \neq 0 \end{cases} \quad (2.9)$$

com $y = \cos(\varpi)$.

Apresenta-se nas subseções a seguir os dois esquemas de quadratura numérica do tipo $P_N T_N$ obtidas do produto das quadraturas unidimensionais.

2.3.1 Quadratura Legendre-Chebyshev Quadrangular

A quadratura numérica Legendre-Chebyshev Quadrangular ($P_N T_N$) [71] é construída da forma que, ambas as ordens de quadratura de Chebyshev T_N e de Gauss-Legendre P_N devem ser iguais. Portanto, cada nível ξ_i , que é definido como as raízes dos polinômios de Legendre de ordem N , são associados N pontos provenientes da quadratura Chebyshev. Para determinar o conjunto de ângulos azimutais discretizados para cada nível ξ_i , utiliza-se a seguinte relação [37, 74]

$$\varpi_j = \frac{\pi}{2} \left(1 - \frac{N - 2j + 1}{N} \right), \quad j = 1, \dots, N. \quad (2.10)$$

O conjunto de pontos da quadratura produto Legendre-Chebyshev é definido por

$$\mu_{i,j} = \sqrt{1 - \xi_i^2} \cos(\varpi_j), \quad (2.11)$$

em que $i = 1, \dots, N/2$ e $j = 1, \dots, N$ e os pontos $\eta_{i,j}$ para cada nível i , são determinados por

$$\eta_{i,j} = \sqrt{1 - \mu_{i,j}^2 - \xi_i^2}, \quad (2.12)$$

e os pesos da quadratura correspondente são dados em termos dos pesos da quadratura de Gauss-Legendre w_i como [37, 71]

$$w_{i,j} = \frac{w_i}{N}, \quad (2.13)$$

sendo que, para cada nível ξ_i , as direções correspondentes devem ter o mesmo peso.

Conforme Tres [106] a quadratura Legendre-Chebyshev Quadrangular ($P_N T_N$) gera um total de $2(N \times N)$ direções discretas na esfera unitária, onde as $2(N \times N)/8$ direções em cada octante seguem um padrão quadrangular conforme mostra a Figura 2.3.

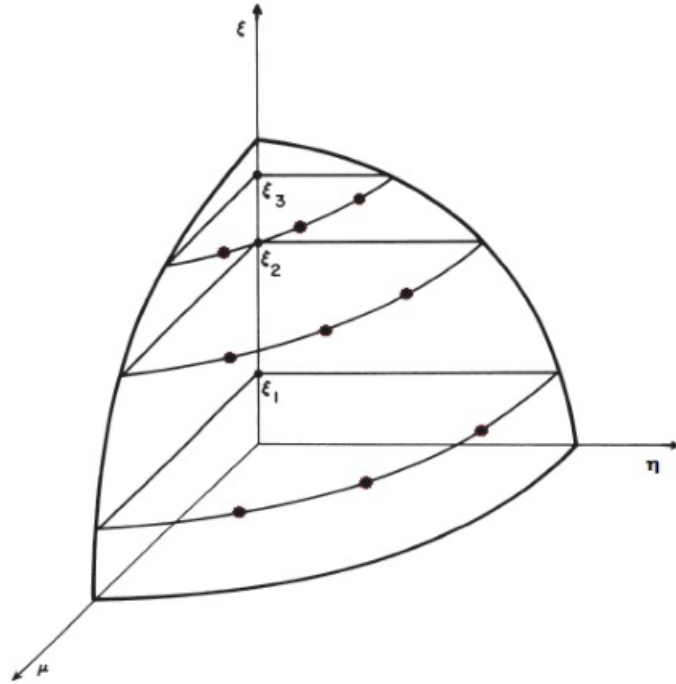


Figura 2.3: Quadratura $P_N T_N$, $N = 6$.

2.3.2 Quadratura Legendre-Chebyshev Triangular

De acordo Tres [106], a quadratura numérica Legendre-Chebyshev Triangular ($P_N T_N S_N$) [74], é construída de forma que as quadraturas unidimensionais de Gauss-Legendre e de Chebyshev são combinadas, ou seja, uma vez definido os níveis ξ_i polares para uma certa ordem N , a discretização da variável angular azimutal é construída de modo que no primeiro nível polar, utiliza-se a quadratura de Chebyshev de ordem $N = 2$, para o segundo nível polar utiliza-se a quadratura de Chebyshev de ordem $N = 4$, para o terceiro nível polar utiliza-se a quadratura de ordem $N = 6$, e assim sucessivamente. Devido a isso, a quadratura resultante irá representar a mesma configuração das direções (μ, η, ξ) apresentadas pela quadratura LQ_N , o que resulta num total de $N(N+2)$ direções

discretas na esfera toda e $N(N+2)/8$ direções discretas por octante, dispostas em um padrão triangular como mostra a Figura 2.4.

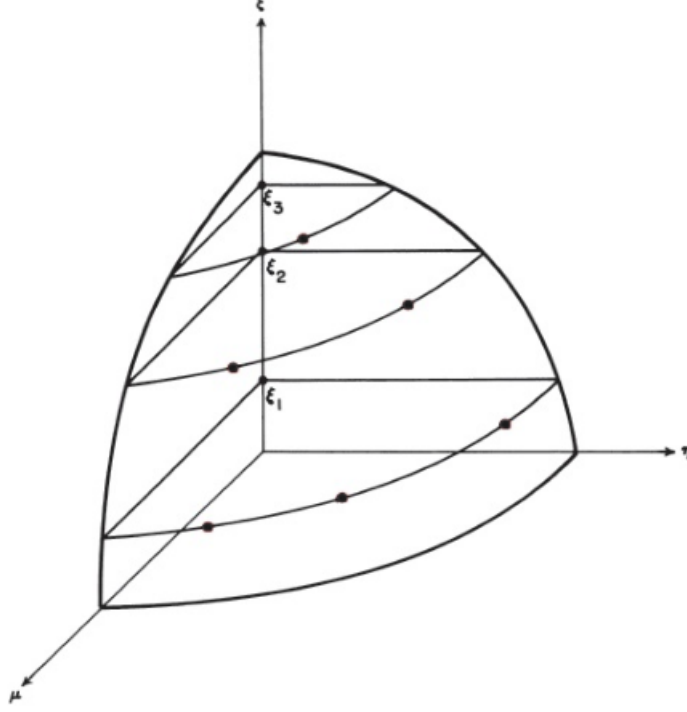


Figura 2.4: Quadratura $P_N T_N S_N$, $N = 6$.

Na quadratura Legendre-Chebyshev Triangular, a determinação do conjunto de ângulos azimutais seguem a relação [37, 71, 74]

$$\varpi_{i,j} = \frac{\pi}{2} \left(1 - \frac{N - 2j - 2i + 3}{N - 2i + 2} \right), \quad \text{com } j = 1, \dots, N - 2i + 2, \quad i = 1, \dots, N/2, \quad (2.14)$$

e os pesos correspondentes à essa quadratura são dados em termos dos pesos da quadratura de Gauss-Legendre w_i da forma

$$w_{i,j} = \frac{w_i}{N - 2i + 2}. \quad (2.15)$$

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

$$\mu_{i,j} = \sqrt{1 - \xi_i^2} \cos(\varpi_{i,j}), \quad (2.16)$$

com $i = 1, \dots, N/2$ e $j = 1, \dots, N - 2i + 2$ e os pontos $\eta_{i,j}$ para cada nível i , são determinados por

$$\eta_{i,j} = \sqrt{1 - \mu_{i,j}^2 - \xi_i^2}. \quad (2.17)$$

2.4 Quadratura Quadruple Range QR

A quadratura Quadruple Range (QR) foi proposta por Abu-Shumays [1, 2], é uma quadratura produto assim como a quadratura Legendre-Chebyshev. De acordo com Tres [106], essa quadratura foi desenvolvida para o tratamento de problemas bidimensionais uma vez que, o ângulo azimutal ϕ é dividido em quatro intervalos. Esses intervalos dividem a parte superior da esfera unitária em quatro quadrantes, onde as coordenadas e os pesos da quadratura são determinados para o intervalo principal $\phi \in [0, \pi/2]$ e consequentemente estendidos para os demais intervalos [2].

Para o tratamento da variável azimutal ϕ , deseja-se aproximar de forma precisa a integral dada pela equação abaixo, cuja dedução dessa equação encontra-se em Tres [106]:

$$\int_0^{\pi/2} (\cos \phi)^l (\sin \phi)^m d\phi = \frac{\Gamma\left(\frac{l+1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{m+1}{2}\right)}{2\Gamma\left(\frac{l+m+2}{2}\right)}, \quad l, m = \text{par} \quad (2.18)$$

sendo que, as coordenadas ϕ_i e w_i são determinadas via solução de um sistema não-linear através do método iterativo de Newton [106] e $\Gamma(l)$ representa a função Gamma [5]. Essa quadratura gera um total de $N_\theta N_\phi$ direções por octante, na qual N_θ representa a ordem da quadratura unidimensional em relação a variável polar θ e N_ϕ em relação à variável azimutal ϕ .

3 FORMULAÇÃO NODAL BIDIMENSIONAL EM ORDENADAS DISCRETAS

O interesse desse trabalho, está em resolver a equação de transporte de nêutrons bidimensional em ordenadas discretas, da forma que, o sistema de equações resultantes da discretização da variável angular, é resolvido através da aplicação das técnicas nodais em conjunto com o método ADO, e isso será abordado nas seções a seguir.

3.1 Equação de Ordenadas Discretas

De acordo com Duderstadt [55], a equação de transporte de nêutrons bidimensional, em geometria cartesiana, a um grupo de energia e com espalhamento isotrópico, caso particular da formulação apresentada no capítulo 2, pode ser escrita da seguinte forma

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

onde, $\sigma_t(x, y)$ e $\sigma_s(x, y)$ são respectivamente, as seções de choque macroscópica total e de espalhamento (nas próximas equações, a dependência espacial das seções de choque será omitida por serem constantes para todos os problemas escolhidos), $\boldsymbol{\Omega} = (\mu, \eta)$ corresponde ao vetor direção de propagação de partículas e $Q(x, y)$ é o termo de fonte isotrópica de nêutrons.

O método de ordenadas discretas desenvolvido por Wick [114] e Chandrasekhar [45], consiste em discretizar a variável angular $\boldsymbol{\Omega} = (\mu, \eta)$ como um conjunto de M direções discretas $\boldsymbol{\Omega}_k = (\mu_k, \eta_k)$ que estão associados aos pesos ω_k , e utilizar um conjunto de quadraturas numéricas para aproximar o termo integral de espalhamento da equação (3.1), da forma

$$\int_S \Psi(x, y, \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' \approx \sum_{k=1}^M \omega_k \Psi(x, y, \boldsymbol{\Omega}_k). \quad (3.2)$$

Desta forma, a equação (3.1) em ordenadas discretas é dada por

$$\begin{aligned} \mu_i \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \boldsymbol{\Omega}_i) + \eta_i \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \boldsymbol{\Omega}_i) + \sigma_t \Psi(x, y, \boldsymbol{\Omega}_i) = \\ = \sigma_s \sum_{k=1}^M \omega_k \Psi(x, y, \boldsymbol{\Omega}_k) + Q(x, y), \end{aligned} \quad (3.3)$$

o fluxo angular médio, resultando num sistema de equações diferenciais ordinárias em termos dos fluxos angulares médios Ψ_y com dependência espacial em x ,

$$\begin{aligned} & \mu_i \frac{d}{dx} \Psi_{yr}(x, \Omega_i) + \sigma_{tr} \Psi_{yr}(x, \Omega_i) = \\ & Q_{yr}(x, \Omega_i) + \sigma_{sr} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_{yr}(x, \Omega_k) + \Psi_{yr}(x, \Omega_{k+M/2})] \end{aligned} \quad (3.4)$$

e

$$\begin{aligned} & -\mu_i \frac{d}{dx} \Psi_{yr}(x, \Omega_{i+M/2}) + \sigma_{tr} \Psi_{yr}(x, \Omega_{i+M/2}) = \\ & Q_{yr}(x, \Omega_{i+M/2}) + \sigma_{sr} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_{yr}(x, \Omega_k) + \Psi_{yr}(x, \Omega_{k+M/2})], \end{aligned} \quad (3.5)$$

para $i = 1, \dots, M/2$ e $r = 1, \dots, R$, sendo que os fluxos angulares médios em cada nodo são definidos por

$$\Psi_{yr}(x, \Omega_i) = \frac{1}{b_m - b_{m-1}} \int_{b_{m-1}}^{b_m} \Psi_r(x, y, \Omega_i) dy, \quad (3.6)$$

e o termo fonte

$$Q_{yr}(x, \Omega_i) = Q_{yr}(x) - \frac{\eta_i}{b_m - b_{m-1}} [\Psi_r(x, b_m, \Omega_i) - \Psi_r(x, b_{m-1}, \Omega_i)] \quad (3.7)$$

com fonte integrada

$$Q_{yr}(x) = \frac{1}{b_m - b_{m-1}} \int_{b_{m-1}}^{b_m} Q_r(x, y) dy. \quad (3.8)$$

Para ordenamento das direções, considera-se o que foi proposto em Barichello et al., 2011 [23], para $i = 1, \dots, M/2$, os vetores Ω_i e $\Omega_{i+M/2}$, representam respectivamente, as direções dos fluxos de entrada e de saída. Desta forma, ordena-se o conjunto de direções do problema integrado em y da forma que, para $i = 1, \dots, M/2$ obtenha-se a coordenada $\mu_i > 0$ e para $i = M/2+1, \dots, M$ coordenada $\mu_i < 0$, conforme representação na Figura 3.2.

De forma análoga, obtém-se um sistema de equações diferenciais ordinárias em termos dos fluxos angulares médios Ψ_x com dependência espacial em y , integrando-se a equação (3.3) em relação a $x \in [a_{m-1}, a_m]$,

$$\begin{aligned} & \eta_i \frac{d}{dy} \Psi_{xr}(y, \Omega_i) + \sigma_{tr} \Psi_{x;r}(y, \Omega_i) = \\ & Q_{xr}(y, \Omega_i) + \sigma_{sr} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_{xr}(y, \Omega_k) + \Psi_{xr}(y, \Omega_{k+M/2})] \end{aligned} \quad (3.9)$$

e

$$-\eta_i \frac{d}{dy} \Psi_{xr}(y, \Omega_{i+M/2}) + \sigma_{tr} \Psi_{xr}(y, \Omega_{i+M/2}) =$$

$$Q_{xr}(y, \Omega_{i+M/2}) + \sigma_{sr} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_{xr}(y, \Omega_k) + \Psi_{xr}(y, \Omega_{k+M/2})], \quad (3.10)$$

para $i = 1, \dots, M/2$, de tal forma que, os fluxos angulares médios são definidos por

$$\Psi_{xr}(y, \Omega_i) = \frac{1}{a_m - a_{m-1}} \int_{a_{m-1}}^{a_m} \Psi_r(x, y, \Omega_i) dx, \quad (3.11)$$

termo fonte

$$Q_{xr}(y, \Omega_i) = Q_{xr}(y) - \frac{\mu_i}{a_m - a_{m-1}} [\Psi_r(a_m, y, \Omega_i) - \Psi_r(a_{m-1}, y, \Omega_i)] \quad (3.12)$$

e fonte integrada

$$Q_{xr}(y) = \frac{1}{a_m - a_{m-1}} \int_{a_{m-1}}^{a_m} Q_r(x, y) dx. \quad (3.13)$$

Para o problema integrado em x , ordena-se as direções da seguinte forma, para $i = 1, \dots, M/2$ a coordenada seja $\eta_i > 0$ e para $i = M/2 + 1, \dots, M$ coordenada $\eta_i < 0$, conforme representação na Figura 3.3.

Nesses processos de integrações relacionados às variáveis espaciais x e y , surgem termos relacionados aos fluxos desconhecidos nos contornos (ou termos de fuga transversais), na abordagem proposta, esses termos são incorporados ao termo fonte, equações (3.7) e (3.12). Visto isso, observa-se que os sistemas de equações em ordenadas discretas nas variáveis espaciais x e y possuem um número maior de incógnitas do que equações, sendo necessário determinar equações auxiliares a fim de tornar os sistemas possíveis e determináveis. No próximo capítulo, são apresentadas as propostas de aproximações para os termos de fuga transversais, utilizadas nesse trabalho.

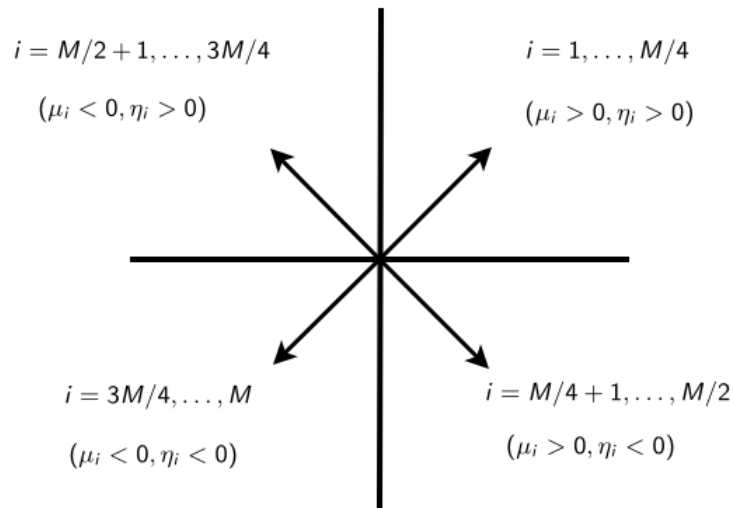


Figura 3.2: Escolha do ordenamento das direções $\Psi_{yr}(x, \Omega_i)$

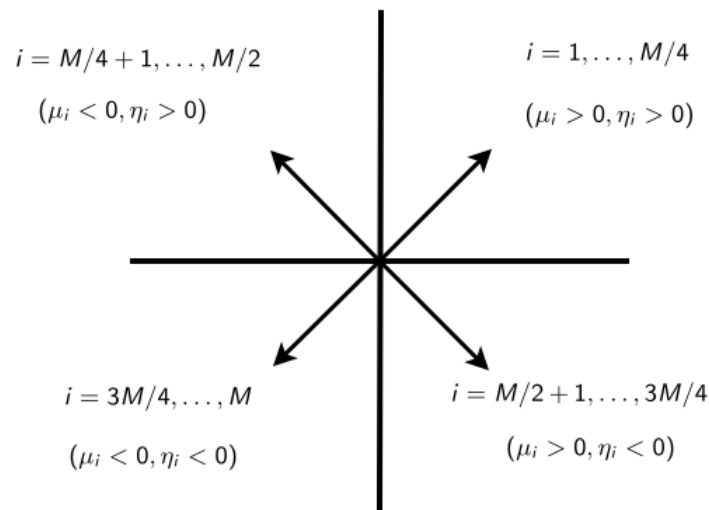
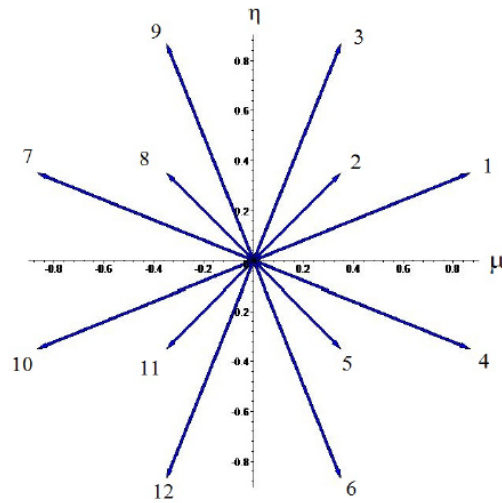
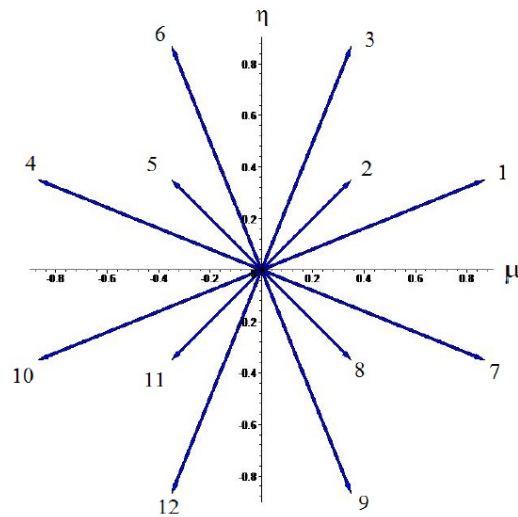


Figura 3.3: Escolha do ordenamento das direções $\Psi_{xr}(y, \Omega_i)$

No caso bidimensional não considera-se a dependência azimutal, dessa forma o número de direções é reduzido pela metade. Os pontos da quadratura considerada são projetados no plano cartesiano x e y e os pontos pertencentes a $z > 0$ coincidem com os pontos pertencentes a $z < 0$ [72], ou seja, desconsidera-se a terceira componente. Abaixo, está a representação das direções da quadratura LQ_N .



(a) Escolha do ordenamento das direções $\Phi_{yr}(x, \Omega_i)$, LQ_N , $N = 4$.



(b) Escolha do ordenamento das direções $\Phi_{xr}(y, \Omega_i)$, LQ_N , $N = 4$.

3.3 Solução Homogênea pelo Método ADO na Região r

A utilização dos métodos nodais no sistema de equações bidimensionais em ordenadas discretas, permitiu a obtenção de um sistema de equações unidimensionais integradas transversalmente, equações (3.4), (3.5), (3.9) e (3.10), que serão resolvidas através da utilização do método ADO.

O método ADO, consiste em construir a solução homogênea do problema associado em termos de constantes de separação e autofunções, que são definidas por expressões que envolvem autovalores e autovetores, dessa forma, a solução é obtida de forma analítica

na variável espacial. Nesse sentido, propõe-se soluções homogêneas para as equações (3.4), (3.5), (3.9) e (3.10) à região r , com $i = 1, \dots, M$, da forma

$$\Psi_{yr}^H(x, \mathbf{\Omega}_i) = \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i)e^{-x/\nu_r}. \quad (3.14)$$

e

$$\Psi_{xr}^H(y, \mathbf{\Omega}_i) = \Phi_{xr}(\gamma_r, \mathbf{\Omega}_i)e^{-y/\gamma_r}, \quad (3.15)$$

em que, $r = 1, \dots, R$, sendo que ν_r , γ_r são as constantes de separação da região r , associadas às autofunções $\Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i)$ e $\Phi_{xr}(\gamma_r, \mathbf{\Omega}_i)$, respectivamente.

Para a construção da solução do problema homogêneo integrado em y , substitui-se a equação (3.14) nas equações (3.4) e (3.5), obtendo-se

$$\begin{aligned} -\frac{\mu_i}{\nu_r}\Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) + \sigma_{tr}\Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) = \\ \sigma_{sr} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_k) + \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})] \end{aligned} \quad (3.16)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\mu_i}{\nu_r}\Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + \sigma_{tr}\Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \\ \sigma_{sr} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_k) + \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})], \end{aligned} \quad (3.17)$$

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

Define-se

$$\mathbf{U}_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) = \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) + \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) \quad (3.18)$$

e

$$\mathbf{V}_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) = \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) - \Phi_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}), \quad (3.19)$$

e adicionando as equações (3.16) e (3.17) e considerando que $\eta_i = \eta_{i+M/2}$ conforme esquema de quadratura utilizado, obtém-se

$$\mathbf{V}_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) = \frac{\nu_r}{\mu_i}\sigma_{tr}\mathbf{U}_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) - \frac{2\sigma_{sr}\nu_r}{\mu_i} \sum_{k=1}^{M/2} w_k \mathbf{U}_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_k), \quad (3.20)$$

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

Por outro lado, agora subtraindo as equações (3.16) e (3.17), e considerando as definições dadas pelas equações (3.18) e (3.19),

$$\mathbf{V}_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i) = \frac{\mu_i}{\nu_r\sigma_{tr}}\mathbf{U}_{yr}(\nu_r, \mathbf{\Omega}_i). \quad (3.21)$$

Finalmente, para obter um problema de autovalores de dimensão $M/2 \times M/2$, substitui-se a equação (3.21) na equação (3.20), resultando em

$$[\mathbf{D}_{yr} - \mathbf{A}_{yr}] \mathbf{U}_{yr} = \lambda_{yr} \mathbf{U}_{yr}, \quad (3.22)$$

com

$$\lambda_{yr} = \frac{1}{\nu_r^2}, \quad (3.23)$$

onde \mathbf{D}_{yr} e \mathbf{A}_{yr} são matrizes de tamanho $M/2 \times M/2$, definidas por

$$\mathbf{D}_{yr} = \text{diag} \left[\left[\frac{\sigma_{tr}}{\mu_1} \right]^2, \dots, \left[\frac{\sigma_{tr}}{\mu_{M/2}} \right]^2 \right] \quad (3.24)$$

e

$$\mathbf{A}_{yr}(i, j) = \frac{2\sigma_{sr}\sigma_{tr}w_j}{\mu_i^2}, \quad (3.25)$$

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

A partir da solução do problema de autovalores dado pela equação (3.20), obtém-se o conjunto $\{\lambda_{jr}, \mathbf{U}_{jr}\}$ com $j = 1, \dots, M/2$ e as constantes de separação ν_{jr} a partir da equação (3.23). Por outro lado, utiliza-se a equação (3.21) para determinar o vetor \mathbf{V}_{yr} para posteriormente, poder determinar as autofunções dadas pela equações

$$\Phi_{yr}(\nu_{jr}, \boldsymbol{\Omega}_i) = \frac{\mathbf{U}_{yr}(\nu_{jr}, \boldsymbol{\Omega}_i) + \mathbf{V}_{yr}(\nu_{jr}, \boldsymbol{\Omega}_i)}{2} \quad (3.26)$$

e

$$\Phi_{yr}(\nu_{jr}, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) = \frac{\mathbf{U}_{yr}(\nu_{jr}, \boldsymbol{\Omega}_i) - \mathbf{V}_{yr}(\nu_{jr}, \boldsymbol{\Omega}_i)}{2}. \quad (3.27)$$

Observa-se que, a partir de um problema que envolvia M equações, chega-se a um problema de autovalores de dimensão $M/2 \times M/2$, devido à escolha do ordenamento das direções feita no capítulo anterior, o que possibilita a construção de um problema de autovalores menor, o qual fornece as constantes de separação aos pares $(\pm\nu_{jr})$. Sendo assim, a solução homogênea do problema para a região r pode ser estabelecida na forma

$$\Psi_{yr}^H(x, \boldsymbol{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^{M/2} [A_{j,r} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \boldsymbol{\Omega}_i) e^{-(x-a_{m-1})/\nu_{jr}} + A_{j+M/2,r} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(a_m-x)/\nu_{jr}}] \quad (3.28)$$

e

$$\Psi_{yr}^H(x, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} [A_{j,r} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(x-a_{m-1})/\nu_{jr}} + A_{j+M/2,r} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \boldsymbol{\Omega}_i) e^{-(a_m-x)/\nu_{jr}}], \quad (3.29)$$

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

Procedimento análogo é feito, para determinar a solução homogênea do problema integrado em x , equações (3.9) e (3.10). Neste sentido, obtém-se o problema de autovalores na forma

$$[\mathbf{D}_{xr} - \mathbf{A}_{xr}] \mathbf{U}_{xr} = \lambda_{xr} \mathbf{U}_{xr} \quad (3.30)$$

com

$$\lambda_{xr} = \frac{1}{\gamma_r^2}, \quad (3.31)$$

onde \mathbf{D}_{xr} e \mathbf{A}_{xr} são matrizes de ordem $M/2 \times M/2$, definidas por

$$\mathbf{D}_{xr} = \text{diag} \left[\left[\frac{\sigma_{tr}}{\eta_1} \right]^2, \dots, \left[\frac{\sigma_{tr}}{\eta_{M/2}} \right]^2 \right] \quad (3.32)$$

e

$$\mathbf{A}_{xr}(i, j) = \frac{2\sigma_{sr}\sigma_{tr}w_j}{\eta_i^2}, \quad (3.33)$$

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

As autofunção são determinadas por

$$\Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \boldsymbol{\Omega}_i) = \frac{\mathbf{U}_{xr}(\gamma_{jr}, \boldsymbol{\Omega}_i) + \mathbf{V}_{xr}(\gamma_{jr}, \boldsymbol{\Omega}_i)}{2} \quad (3.34)$$

e

$$\Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) = \frac{\mathbf{U}_{xr}(\gamma_{jr}, \boldsymbol{\Omega}_i) - \mathbf{V}_{xr}(\gamma_{jr}, \boldsymbol{\Omega}_i)}{2}. \quad (3.35)$$

Sendo assim, escreve-se a solução homogênea para o problema integrado em x na forma

$$\Psi_{xr}^H(y, \boldsymbol{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^{M/2} \left[B_{j,r} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \boldsymbol{\Omega}_i) e^{-(y-b_{m-1})/\gamma_{jr}} + B_{j+M/2,r} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(b_m-y)/\gamma_{jr}} \right], \quad (3.36)$$

$$\Psi_{xr}^H(y, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} \left[B_{j,r} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(y-b_{m-1})/\gamma_{jr}} + B_{j+M/2,r} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \boldsymbol{\Omega}_i) e^{-(b_m-y)/\gamma_{jr}} \right], \quad (3.37)$$

para $i = 1, \dots, M/2$, $y \in [b_{m-1}, b_m]$, onde $B_{j,r}$ e $B_{j+M/2,r}$ são os coeficientes do problema relativos à região r .

Obtidas as soluções homogêneas para os problemas integrados em y e em x , relacionadas à região r , o próximo passo é determinar as soluções particulares. No entanto, observa-se que as soluções particulares possuem termos relacionados à fonte externa, bem como, termos relacionados às fronteiras de cada região r , que não são conhecidos em todas as direções discretas. Esses termos desconhecidos nos contornos, são aproximados por equações auxiliares que serão definidas no próximo capítulo.

4 EQUAÇÕES AUXILIARES: TERMOS DE FUGA TRANSVERSAIS

Como foi mencionado no capítulo 3, nas equações nodais integradas transversalmente, aparecem termos referentes aos contornos ou então fluxos angulares relacionados aos contornos, que eventualmente são conhecidos apenas em algumas direções. Desta forma, é necessário determinar aproximações para os fluxos angulares nas direções não conhecidas, que veremos nesse capítulo.

4.1 Algumas Abordagens Existentes na Literatura

A busca por diferentes aproximações que representam os termos de fuga transversais vêm sendo investigadas por diferentes pesquisadores. Neste sentido, destacam-se na literatura diferentes métodos que propõem algumas abordagens para aproximar esses termos, como o método SGF-CN [27], método SGF-LN [50], método SGF-ExpN [26], método LTS_N2D -DiagExp [34], AHOT-NN [10] e AHOT-CN [8]. Por outro lado, no contexto de abordagens utilizando o método ADO, as seguintes propostas já foram utilizadas para aproximar esses termos de fuga: aproximações por constantes [36, 83, 106]; aproximações relacionadas aos fluxos angulares médios emergentes [36, 83, 22]; aproximações em termos das soluções dos problemas unidimensionais integrados [86]. Abaixo discute-se brevemente, para introduzir um conhecimento preliminar, alguns aspectos das diferentes aproximações.

4.1.1 Método SGF-CN

O método SGF-CN (*Spectro Greens's Function Constant Nodal*), foi desenvolvido por Barros e Larsen, em 1992 [27]. Esse método, pertence a classe dos métodos espectral-nodais, onde as equações S_N integradas transversalmente, no interior de uma célula espacial arbitrária, são resolvidas analiticamente. O termo de fuga transversal é aproximado por polinômios de ordem zero (ou constantes) e o termo fonte de espalhamento é tratado de forma analítica.

4.1.2 Método SGF-LN

O método SGF-LN (*Spectro Greens's Function Linear Nodal*) foi desenvolvido por Domingues, em 2006 [50]. Assim como o anterior, esse método se enquadra na classe dos métodos espectralnodais, as equações S_N integradas transversalmente são resolvidas analiticamente dentro de uma célula espacial. Os termos de fonte de espalhamento são tratados de forma exata e os termos de fuga transversais são aproximados por polinômios de primeira ordem.

4.1.3 Método SGF-ExpN

O método SGF-ExpN (*Spectro Greens's Function Exponential*), desenvolvido por Barros e Larsen, em 1991 [26], assim como os métodos anteriores, se encaixa na classe dos métodos espectralnodais. As equações S_N integradas transversalmente, são resolvidas analiticamente no interior de cada célula ou nodo, assim como o termo fonte. Os termos de fuga transversal, são aproximados por exponenciais simples, as quais estão relacionadas à parâmetros do problema, ou seja, relacionadas à constante de decaimento fixa, e estas identificadas como a seção de choque macroscópica de absorção do meio material considerado.

4.1.4 Método LTS_N2D -DiagExpN

O método LTS_N2D -DiagExpN, apresentado por Biasotto [34], utiliza a transformada de Laplace para resolver problemas S_N , os termos referentes aos contornos são agrupados à fonte. Para aproximação dos termos de fuga transversal Biasotto seguiu os trabalhos de Barros e Larsen [26] e Mello [75], sendo esses aproximados por funções exponenciais relacionadas à constante de decaimento, sendo essa definida como a seção de choque macroscópica de absorção do meio.

4.1.5 Método AHOT

O AHOT é um método nodal para a solução da equação de transporte de nêutrons em ordenadas discretas definida em geometria cartesiana, cujo domínio espacial é dividido em nodos (células). O sistema das equações S_N integradas transversalmente pode ser resolvido localmente em cada célula da malha, utilizando para solução desse sistema métodos nodais polinomiais AHOT-NN [10] ou método das características AHOT-

CN [10]. Utiliza expansão por polinômios de ordem arbitrária para aproximar os fluxos desconhecidos nos contornos, por exemplo, expansão por polinômios de ordem zero (constante), AHOT-N0 [19].

4.1.6 Equações auxiliares: método ADO

Nesta subseção, apresentam-se as diferentes aproximações para os termos de fuga transversais já estudadas via formulação ADO. Nestes trabalhos, utilizaram-se duas formas de representação para o domínio do problema, conforme representação na Figura 4.1. Observa-se que para o Domínio 1, Figura 4.1(a), somente condições de contorno do tipo vácuo foram utilizadas, onde a fonte está localizada no interior do domínio. Por outro lado, considerando o Domínio 2, Figura 4.1(b), observa-se que condições reflexivas foram incorporadas e dessa forma, devido a simetria do problema, representam uma quarta parte da configuração do Domínio 1.

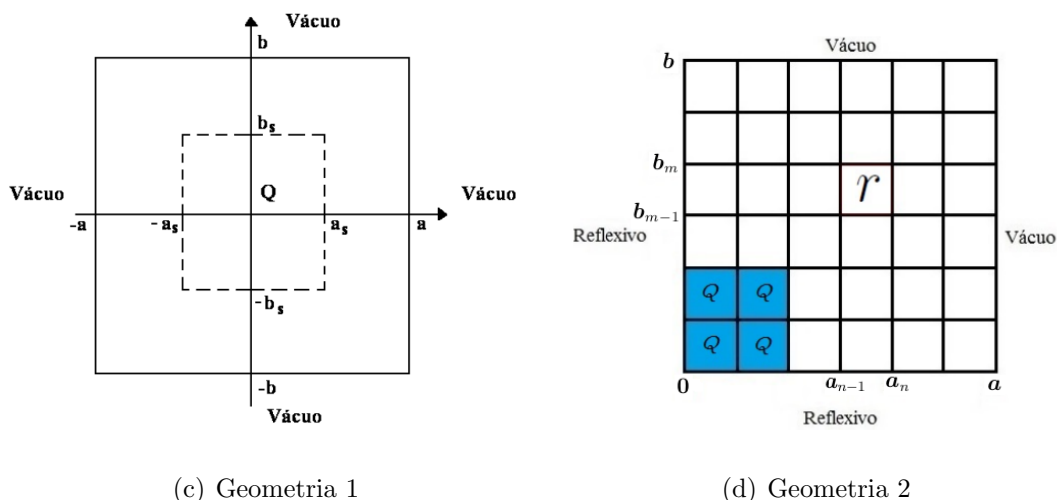


Figura 4.1: Representação dos diferentes domínios.

4.1.6.1 Aproximações em termos dos fluxos médios integrados

A primeira proposta de abordagem para os termos de fuga transversais, foi a de aproximá-los através dos fluxos médios integrados, sendo que para essa proposta, utilizaram-se as duas formas de domínios definidos acima.

No trabalho de Cabrera [36], considerou-se o domínio definido pela Figura 4.1(a), e os termos de fugas transversais foram definidos na forma

$$\begin{aligned}\Psi(x, b, \Omega_i) &\approx k_1 \Psi_y(x, \Omega_i), & i = 1, \dots, M/4, & \quad i = M/2 + 1, \dots, 3M/4 \\ \Psi(x, -b, \Omega_i) &\approx k_2 \Psi_y(x, \Omega_i), & i = M/4 + 1, \dots, M/2, & \quad i = 3M/4 + 1, \dots, M\end{aligned}\quad (4.1)$$

e

$$\begin{aligned}\Psi(a, y, \Omega_i) &\approx k_3 \Psi_x(y, \Omega_i), & i = 1, \dots, M/4, & \quad i = M/2 + 1, \dots, 3M/4 \\ \Psi(-a, y, \Omega_i) &\approx k_4 \Psi_x(y, \Omega_i), & i = M/4 + 1, \dots, M/2, & \quad i = 3M/4 + 1, \dots, M\end{aligned}\quad (4.2)$$

sendo k_1 , k_2 , k_3 e k_4 parâmetros que devem ser definidos *a priori*.

Por outro lado, no trabalho de Picolotto [84], o domínio considerado foi definido pela Figura 4.1(b), considerando somente uma região, ou seja, um nodo, observa-se que este domínio representa 1/4 do domínio definido na figura ao lado. Os termos de fuga transversais são definidos por

$$\begin{aligned}\Psi(x, b, \Omega_i) &\approx \hat{k}_1 \Psi_y(x, \Omega_i), & i = 1, \dots, M/4, & \quad i = M/2 + 1, \dots, 3M/4 \\ \Psi(x, 0, \Omega_i) &\approx \hat{k}_2 \Psi_y(x, \Omega_i), & & \quad i = 1, \dots, M,\end{aligned}\quad (4.3)$$

e

$$\begin{aligned}\Psi(a, y, \Omega_i) &\approx \hat{k}_3 \Psi_x(y, \Omega_i), & i = 1, \dots, M/4, & \quad i = M/2 + 1, \dots, 3M/4 \\ \Psi(0, y, \Omega_i) &\approx \hat{k}_4 \Psi_x(y, \Omega_i), & & \quad i = 1, \dots, M,\end{aligned}\quad (4.4)$$

onde \hat{k}_1 , \hat{k}_2 , \hat{k}_3 e \hat{k}_4 parâmetros que devem ser definidos *a priori*.

Nesse tipo de aproximação os fluxos desconhecidos na fronteira não são introduzidos como modificações no termo fonte, dessa forma tornando a solução particular mais simples de ser resolvida, além disso, o problema derivado na direção y não é acoplado ao problema derivado na direção x .

4.1.6.2 Aproximações em termos das soluções dos problemas unidimensionais integrados

Na formulação apresentada no trabalho de Prolo Filho [86], o problema foi definido conforme representação na Figura 4.1(a). Os termos de fuga transversais, foram introduzidos ao termo fonte do problema e para aproximá-los utilizou-se equações tendo

em vista a forma geral da solução homogênea do problema, por exemplo, com expressões da forma

$$\Psi(x, -b, \Omega_i) = \sum_{k=1}^{M/2} \{E_k \Phi_y(\nu_k, \Omega_i) e^{-(a+x)/\nu_k} + E_{k+M/2} \Phi_y(\nu_k, \Omega_{i+M/2}) e^{-(a-x)/\nu_k}\}, \quad (4.5)$$

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

Esse tipo de aproximação proposta por Prolo Filho [86] não necessita da definição de parâmetros *a priori*, as aproximações propostas permitem obter expressões para as soluções particulares e, juntamente com a formulação das soluções homogêneas, é possível construir um sistema onde todos os coeficientes são determinados. No entanto, essa proposta de aproximação por ser mais geral, torna as soluções particulares mais complexas de serem determinadas, e dessa forma faz-se o uso das funções de Green para poder resolvê-las.

Resultados obtidos por esta formulação apresentaram pequena melhora em comparação com resultados da referência de Tsai e Loyalka [109], no entanto não foram comparados com abordagens nodais.

4.1.6.3 Aproximações por polinômios de ordem zero

Esta aproximação consiste em representar os termos de fugas transversais por polinômios de ordem zero (ou constantes), e estes termos são introduzidos ao termo fonte do problema. Essa aproximação, foi utilizada nas duas formas de representação do domínio denotados na Figura 4.1. De tal forma que, no trabalho de Cabrera [36] utilizou-se o domínio representado pela Figura 4.1(a), por sua vez, em Picolotto [84] e Tres [106], utilizou-se o domínio conforme representação na Figura 4.1(b). Define-se para essa abordagem, as seguintes equações auxiliares

$$\Psi(0, y, \Omega_i) = M_i \quad (4.6)$$

$$\Psi(a, y, \Omega_i) = L_i \quad (4.7)$$

$$\Psi(x, 0, \Omega_i) = J_i \quad (4.8)$$

$$\Psi(x, b, \Omega_i) = I_i, . \quad (4.9)$$

Nesta proposta, não é necessário definir parâmetros *a priori*, as aproximações permitem obter expressões para as soluções particulares, que juntamente com a formulação das soluções homogêneas, é possível construir um sistema onde todos os coeficientes são determinados.

Tendo em vista, a revisão bibliográfica referente às diferentes equações auxiliares já utilizadas para aproximar os termos de fuga transversais, apresenta-se na seção a seguir, as propostas utilizadas nesse trabalho.

4.1.7 Equações Auxiliares: propostas alternativas

Neste trabalho, procurou-se aproximar os fluxos desconhecidos nos contornos através de três abordagens distintas: aproximações por constantes, aproximações lineares e aproximações exponenciais. É importante destacar que, as aproximações lineares e exponenciais apresentadas nesse trabalho, até o momento nunca foram utilizadas em conjunto com o método ADO. Apesar de aproximações constantes já terem sido utilizadas, todos os resultados aqui listados foram novamente implementados em um único programa computacional, o qual possibilita a opção das três alternativas.

No caso das aproximações exponenciais, utilizadas neste trabalho, não são associadas à parâmetros do problema, como é o caso das aproximações SGF-ExpN ou LTS_N2D -ExpN, mas sim considerando o espectro do problema unidimensional integrado.

Como primeira proposta de equações auxiliares, define-se as aproximações por constantes da forma

$$\Psi_r(x, b_m, \mathbf{\Omega}_i) = D_{m,r,i}, \quad (4.10a)$$

$$\Psi_r(x, b_{m-1}, \mathbf{\Omega}_i) = D_{m-1,r,i}, \quad (4.10b)$$

$$\Psi_r(a_m, y, \mathbf{\Omega}_i) = C_{m,r,i}, \quad (4.10c)$$

$$\Psi_r(a_{m-1}, y, \mathbf{\Omega}_i) = C_{m-1,r,i}, \quad (4.10d)$$

tais que, $i = 1, \dots, M$, $r = 1, \dots, R$ e m indica o número de divisões do domínio em cada uma das variáveis espaciais.

Tendo em vista a segunda proposta de abordagem, define-se as seguintes equações como aproximações lineares,

$$\Psi_r(x, b_m, \mathbf{\Omega}_i) = xD_{m,r,i} \quad (4.11a)$$

$$\Psi_r(x, b_{m-1}, \mathbf{\Omega}_i) = xD_{m-1,r,i}, \quad (4.11b)$$

$$\Psi_r(a_m, y, \mathbf{\Omega}_i) = yC_{m,r,i}, \quad (4.11c)$$

$$\Psi_r(a_{m-1}, y, \mathbf{\Omega}_i) = yC_{m-1,r,i}, \quad (4.11d)$$

para $i = 1, \dots, M$ e $r = 1, \dots, R$, sendo que m indica o número de divisões do domínio em cada uma das variáveis espaciais x e y .

Por último, como terceira proposta considera-se as aproximações exponenciais da seguinte forma

$$\Psi_r(x, b_m, \mathbf{\Omega}_i) = D_{m,r,i} e^{\frac{-(a_m - x)}{\nu_{r,max}}}, \quad (4.12a)$$

$$\Psi_r(x, b_{m-1}, \mathbf{\Omega}_i) = D_{m-1,r,i} e^{\frac{-(a_m - x)}{\nu_{r,max}}}, \quad (4.12b)$$

$$\Psi_r(a_m, y, \mathbf{\Omega}_i) = C_{m,r,i} e^{\frac{-(b_m - y)}{\gamma_{r,max}}}, \quad (4.12c)$$

$$\Psi_r(a_{m-1}, y, \mathbf{\Omega}_i) = C_{m-1,r,i} e^{\frac{-(b_m - y)}{\gamma_{r,max}}}, \quad (4.12d)$$

com $i = 1, \dots, M$ e $r = 1, \dots, R$, m indicando o número de divisões no intervalo de definição das variáveis espaciais, $\gamma_{r,max}$ e $\nu_{r,max}$ as constantes de separação máximas de cada região, obtidas da solução do problema de autovalores.

Nas três abordagens propostas, para aproximar os termos de fuga transversais, não se faz necessário definir parâmetros *a priori*, sendo os termos de fuga transversais incorporados ao termo fonte do problema. No próximo capítulo, apresenta-se a proposta de solução particular para tratamento do termo fonte.

5 SOLUÇÃO PARTICULAR

No capítulo anterior as equações auxiliares que aproximam os termos de fuga transversais foram apresentadas, sendo essas equações incorporadas ao termo fonte do problema e este, resolvido através da solução particular.

Nesse sentido, tendo em vista que o termo fonte é representado de forma mais geral, além disso, buscando uma implementação única que resolva o problema utilizando qualquer uma das três aproximações, faz-se necessário o uso das funções de Green para construção da solução particular.

Desta forma, utiliza-se a formulação apresentada por Barichello et al. [24] e faz-se uma adaptação à metodologia utilizada no referido trabalho, onde considera-se o caso dos autovalores repetidos.

5.1 Caracterização do termo fonte

Considera-se nesse trabalho a presença de uma fonte fixa isotrópica de nêutrons na região 1 definida por

$$Q(x, y) = \begin{cases} 1, & \text{para } x \in [0, a_1] \text{ e } y \in [0, b_1] \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (5.1)$$

Substitui-se a equação (5.1) nas equações (3.8) e (3.13), e obtém-se respectivamente

$$Q_{yr}(x) = \begin{cases} 1, & \text{para } r = 1 \\ 0, & \text{para as demais regiões} \end{cases} \quad (5.2)$$

e

$$Q_{xr}(y) = \begin{cases} 1, & \text{para } r = 1 \\ 0, & \text{para as demais regiões.} \end{cases} \quad (5.3)$$

Além disso, observa-se que o termo fonte, presente nas equações (3.4), (3.5), (3.9) e (3.10), ou dado pelas equações (3.7) e (3.12), depende dos valores dos fluxos angulares nos contornos, sendo que, em algumas direções são conhecidos pelas condições de contorno do problema (vácuo e reflexiva). No entanto, para os fluxos angulares nas direções desconhecidas, utiliza-se as equações auxiliares que foram definidas no capítulo anterior, equações (4.10), (4.11) e (4.12). Dessa forma, emprega-se as equações (5.2) e (5.3) e

define-se o termo fonte de uma forma geral para cada uma das aproximações, como é caracterizado a seguir.

Escreve-se termo fonte para as **aproximações constantes**, equações (4.10), da seguinte forma

$$Q_{yr}(x, \Omega_i) = \begin{cases} 1 - \frac{\eta_i}{b_m - b_{m-1}} [D_{m,r,i} - D_{m-1,r,i}], & \text{para } r = 1 \\ -\frac{\eta_i}{b_m - b_{m-1}} [D_{m,r,i} - D_{m-1,r,i}], & \text{para as demais regiões} \end{cases} \quad (5.4)$$

e

$$Q_{xr}(y, \Omega_i) = \begin{cases} 1 - \frac{\mu_i}{a_m - a_{m-1}} [C_{m,r,i} - C_{m-1,r,i}], & \text{para } r = 1 \\ -\frac{\mu_i}{a_m - a_{m-1}} [C_{m,r,i} - C_{m-1,r,i}], & \text{para as demais regiões.} \end{cases} \quad (5.5)$$

Por outro lado, o termo fonte para as **aproximações lineares**, equações (4.11), é dado por

$$Q_{yr}(x, \Omega_i) = \begin{cases} 1 - \frac{\eta_i}{b_m - b_{m-1}} [D_{m,r,i} - D_{m-1,r,i}] x, & \text{para } r = 1 \\ -\frac{\eta_i}{b_m - b_{m-1}} [D_{m,r,i} - D_{m-1,r,i}] x, & \text{para as demais regiões} \end{cases} \quad (5.6)$$

e

$$Q_{xr}(y, \Omega_i) = \begin{cases} 1 - \frac{\mu_i}{a_m - a_{m-1}} [C_{m,r,i} - C_{m-1,r,i}] y, & \text{para } r = 1 \\ -\frac{\mu_i}{a_m - a_{m-1}} [C_{m,r,i} - C_{m-1,r,i}] y, & \text{para as demais regiões.} \end{cases} \quad (5.7)$$

Por último, agora considerando as **aproximações exponenciais**, equações (4.12), define-se o termo fonte da forma

$$Q_{yr}(x, \Omega_i) = \begin{cases} 1 - \frac{\eta_i}{b_m - b_{m-1}} [D_{m,r,i} - D_{m-1,r,i}] e^{\frac{-(a_m - x)}{\nu_{r,max}}}, & \text{para } r = 1 \\ -\frac{\eta_i}{b_m - b_{m-1}} [D_{m,r,i} - D_{m-1,r,i}] e^{\frac{-(a_m - x)}{\nu_{r,max}}}, & \text{para as demais regiões} \end{cases} \quad (5.8)$$

e

$$Q_{xr}(y, \mathbf{\Omega}_i) = \begin{cases} 1 - \frac{\mu_i}{a_m - a_{m-1}} [C_{m,r,i} - C_{m-1,r,i}] e^{-\frac{-(b_m - y)}{\gamma_{r,max}}}, & \text{para } r = 1 \\ -\frac{\mu_i}{a_m - a_{m-1}} [C_{m,r,i} - C_{m-1,r,i}] e^{-\frac{-(b_m - y)}{\gamma_{r,max}}}, & \text{para as demais regiões,} \end{cases} \quad (5.9)$$

em que $i = 1, \dots, M$, $r = 1, \dots, R$. Caracterizados os termos fontes do problema integrado em y e em x , o próximo passo será a dedução da solução particular que será utilizada.

5.2 Solução particular via função de Green

Nesta seção, a proposta de solução particular é mostrada, a qual, seguiu-se o mesmo desenvolvimento apresentado em Barichello et al [24] e Prolo Filho [86]. Apresenta-se neste trabalho a dedução da solução particular para o problema integrado em y , para o problema integrado em x a dedução é análoga.

Considera-se $G_r(x, \mathbf{\Omega}_i : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha)$ como sendo o fluxo angular de nêutrons em $(x, \mathbf{\Omega}_i)$ vindo de τ com direção $\mathbf{\Omega}_\alpha$ em uma região r , e define-se a função de Green como sendo a solução das seguintes equações

$$\mu_i \frac{d}{dx} G_r(x, \mathbf{\Omega}_i : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) + \sigma_{tr} G_r(x, \mathbf{\Omega}_i : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) = \delta(x - \tau) \delta_{i,\alpha} + \sigma_{sr} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [G_r(x, \mathbf{\Omega}_k : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) + G_r(x, \mathbf{\Omega}_{k+M/2} : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha)], \quad (5.10)$$

e

$$-\mu_i \frac{d}{dx} G_r(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2} : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) + \sigma_{tr} G_r(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2} : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) = \delta(x - \tau) \delta_{i+M/2,\alpha} + \sigma_{sr} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [G_r(x, \mathbf{\Omega}_k : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) + G_r(x, \mathbf{\Omega}_{k+M/2} : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha)], \quad (5.11)$$

com $i = 1, \dots, M/2$, $r = 1, \dots, R$, $\alpha = 1, \dots, M$, $\tau \in [a_{m-1}, a_m]$ e $\mathbf{\Omega}_\alpha \in \{\mathbf{\Omega}_i\}$. Os termos $\delta(x - \tau)$ e $\delta_{i,\alpha}$ são, respectivamente, a função delta de Dirac e o delta de Kronecker [63].

Desta forma, quando $x = \tau$ e $\mathbf{\Omega}_i = \mathbf{\Omega}_\alpha$ existe uma descontinuidade (ou salto). Esta *condição de salto* pode ser obtida através da integração das equações (5.10) e (5.11) em relação a $x \in (\tau - \epsilon, \tau + \epsilon)$, que são dadas por

$$\mu_i \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \{G_r(\tau + \epsilon, \mathbf{\Omega}_i : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) - G_r(\tau - \epsilon, \mathbf{\Omega}_i : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha)\} = \delta_{i,\alpha} \quad (5.12)$$

e

$$-\mu_i \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \{G_r(\tau + \epsilon, \mathbf{\Omega}_{i+M/2} : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) - G_r(\tau - \epsilon, \mathbf{\Omega}_{i+M/2} : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha)\} = \delta_{i+M/2, \alpha}, \quad (5.13)$$

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

Combinando as equações de salto com as soluções da equação homogênea, obtidas no capítulo 3, obtém-se as funções de Green

$$G_r(x, \mathbf{\Omega}_i : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) = \sum_{j=1}^{M/2} A_{j,r,\alpha} \Phi_{yr}(\nu_{j,r}, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(x-\tau)/\nu_j r}, \quad x > \tau, \quad (5.14)$$

$$G_r(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2} : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) = \sum_{j=1}^{M/2} A_{j,r,\alpha} \Phi_{yr}(\nu_{j,r}, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(x-\tau)/\nu_j r}, \quad x > \tau \quad (5.15)$$

e

$$G_r(x, \mathbf{\Omega}_i : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) = - \sum_{j=1}^{M/2} A_{j+M/2,r,\alpha} \Phi_{yr}(\nu_{j,r}, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(\tau-x)/\nu_j r}, \quad x < \tau, \quad (5.16)$$

$$G_r(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2} : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) = - \sum_{j=1}^{M/2} A_{j+M/2,r,\alpha} \Phi_{yr}(\nu_{j,r}, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(\tau-x)/\nu_j r}, \quad x < \tau, \quad (5.17)$$

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

Neste ponto, substitui-se as equações (5.14)-(5.17) nas equações (5.12) e (5.13) e tomando $\epsilon \rightarrow 0$, obtém-se

$$\mu_i \sum_{j=1}^{M/2} \{A_{j,r,\alpha} \Phi_{yr}(\nu_{j,r}, \mathbf{\Omega}_i) + A_{j+M/2,r,\alpha} \Phi_{yr}(\nu_{j,r}, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})\} = \delta_{i,\alpha}, \quad (5.18)$$

$$-\mu_i \sum_{j=1}^{M/2} \{A_{j,r,\alpha} \Phi_{yr}(\nu_{j,r}, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + A_{j+M/2,r,\alpha} \Phi_{yr}(\nu_{j,r}, \mathbf{\Omega}_i)\} = \delta_{i+M/2,\alpha}. \quad (5.19)$$

Os coeficientes $A_{j,r,\alpha}$ e $A_{j+M/2,r,\alpha}$ dados nas equações (5.18) e (5.19), podem ser escritos através de uma matriz em blocos, da forma

$$\begin{bmatrix} [A_{j,r,\alpha}] \\ [A_{j+M/2,r,\alpha}] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [\mu_i \Phi_{yr}(\nu_{j,r}, \mathbf{\Omega}_i)] & [\mu_i \Phi_{yr}(\nu_{j,r}, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})] \\ [-\mu_i \Phi_{yr}(\nu_{j,r}, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})] & [-\mu_i \Phi_{yr}(\nu_{j,r}, \mathbf{\Omega}_i)] \end{bmatrix}^{-1}, \quad (5.20)$$

e são determinados via solução de sistema linear, onde $i = 1, \dots, M/2$, $j = 1, \dots, M/2$, $\alpha = 1, \dots, M$ e $r = 1, \dots, R$.

Determinados os coeficientes $A_{j,r,\alpha}$ e $A_{j+M/2,r,\alpha}$, pode-se calcular as equações (5.14) à (5.17) e expressar a solução particular para o problema integrado em y como

$$\Psi_{yr}^p(x, \mathbf{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^{M/2} \{A_{j,r}(x) \Phi_{yr}(\nu_{j,r}, \mathbf{\Omega}_i) + A_{j+M/2,r}(x) \Phi_{yr}(\nu_{j,r}, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})\} \quad (5.21)$$

e

$$\Psi_{yr}^p(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} \{A_{j,r}(x)\Phi_{yr}(\nu_{jr}, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + A_{j+M/2,r}(x)\Phi_{yr}(\nu_{jr}, \mathbf{\Omega}_i)\}, \quad (5.22)$$

onde

$$A_{j,r}(x) = \int_{a_{m-1}}^x \left\{ \sum_{\alpha=1}^M Q_{yr}(\tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) A_{j,r,\alpha} \right\} e^{\frac{-(x-\tau)}{\nu_{jr}}} d\tau \quad (5.23)$$

e

$$A_{j+M/2,r}(x) = - \int_x^{a_m} \left\{ \sum_{\alpha=1}^M Q_{yr}(\tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) A_{j+M/2,r,\alpha} \right\} e^{\frac{-(\tau-x)}{\nu_{jr}}} d\tau. \quad (5.24)$$

com $i = 1, \dots, M/2$, $j = 1, \dots, M/2$, $r = 1, \dots, R$, sendo $Q_{yr}(\tau, \mathbf{\Omega}_\alpha)$ determinado pelas equações (5.4), (5.6) ou (5.8), dependendo de qual aproximação está se considerando.

De forma análoga encontra-se as funções de Green para o problema integrado em x , de tal forma que, a proposta de solução particular é dada por

$$\Psi_{xr}^p(y, \mathbf{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^{M/2} \{B_{j,r}(y)\Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \mathbf{\Omega}_i) + B_{j+M/2,r}(y)\Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})\} \quad (5.25)$$

e

$$\Psi_{xr}^p(y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} \{B_{j,r}(y)\Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + B_{j+M/2,r}(y)\Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \mathbf{\Omega}_i)\}, \quad (5.26)$$

com

$$B_{j,r}(y) = \int_{b_{m-1}}^y \left\{ \sum_{\alpha=1}^M Q_{xr}(\tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) B_{j,r,\alpha} \right\} e^{\frac{-(y-\tau)}{\gamma_{jr}}} d\tau \quad (5.27)$$

e

$$B_{j+M/2,r}(y) = - \int_y^{b_m} \left\{ \sum_{\alpha=1}^M Q_{xr}(\tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) B_{j+M/2,r,\alpha} \right\} e^{\frac{-(\tau-y)}{\gamma_{jr}}} d\tau, \quad (5.28)$$

onde os coeficientes $B_{j,r,\alpha}$ e $B_{j+M/2,r,\alpha}$ são determinados através da resolução do sistema linear, sendo a matriz em blocos definida por

$$\begin{bmatrix} [B_{j,r,\alpha}] \\ [B_{j+M/2,r,\alpha}] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [\eta_i \Phi_{xr}(\gamma_{j,r}, \mathbf{\Omega}_i)] & [\eta_i \Phi_{xr}(\gamma_{j,r}, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})] \\ [-\eta_i \Phi_{xr}(\gamma_{j,r}, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})] & [-\eta_i \Phi_{xr}(\gamma_{j,r}, \mathbf{\Omega}_i)] \end{bmatrix}^{-1}, \quad (5.29)$$

para $i = 1, \dots, M/2$, $j = 1, \dots, M/2$, $r = 1, \dots, R$ e $\alpha = 1, \dots, M$ e o termo fonte, $Q_{xr}(\tau, \mathbf{\Omega}_\alpha)$ é definido pelas equações (5.5), (5.7) ou (5.9), dependendo de qual aproximação está se considerando.

Estabelecida a solução particular, pode-se determinar a solução geral do problema, a qual é dada pela soma da solução homogênea com a solução particular e, será definida na próxima seção.

5.3 Solução geral do problema

Uma vez definidas as expressões para as soluções homogêneas e particulares, as soluções gerais dos problemas integrados em y e em x para uma região r , respectivamente, são dadas por

$$\Psi_{yr}(x, \Omega_i) = \Psi_{yr}^h(x, \Omega_i) + \Psi_{yr}^p(x, \Omega_i) \quad (5.30)$$

e

$$\Psi_{xr}(y, \Omega_i) = \Psi_{xr}^h(y, \Omega_i) + \Psi_{xr}^p(y, \Omega_i), \quad (5.31)$$

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

$$\begin{aligned} \Psi_{yr}(x, \Omega_i) = & \sum_{j=1}^{M/2} [A_{j,r} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \Omega_i) e^{-(x-a_{m-1})/\nu_{jr}} \\ & + A_{j+M/2} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \Omega_{i+M/2}) e^{-(a_m-x)/\nu_{jr}}] + \Psi_{yr}^p(x, \Omega_i), \end{aligned} \quad (5.32)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{yr}(x, \Omega_{i+M/2}) = & \sum_{j=1}^{M/2} [A_{j,r} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \Omega_{i+M/2}) e^{-(x-a_{m-1})/\nu_{jr}} \\ & + A_{j+M/2} \Phi_{yr}(\nu_{jr}, \Omega_i) e^{-(a_m-x)/\nu_{jr}}] + \Psi_{yr}^p(x, \Omega_{i+M/2}) \end{aligned} \quad (5.33)$$

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

$$\begin{aligned} \Psi_{xr}(y, \Omega_i) = & \sum_{j=1}^{M/2} [B_{j,r} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \Omega_i) e^{-(y-b_{m-1})/\gamma_{jr}} \\ & + B_{j+M/2} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \Omega_{i+M/2}) e^{-(b_m-y)/\gamma_{jr}}] + \Psi_{xr}^p(y, \Omega_i), \end{aligned} \quad (5.34)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{xr}(y, \Omega_{i+M/2}) = & \sum_{j=1}^{M/2} [B_{j,r} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \Omega_{i+M/2}) e^{-(y-b_{m-1})/\gamma_{jr}} \\ & + B_{j+M/2} \Phi_{xr}(\gamma_{jr}, \Omega_i) e^{-(b_m-y)/\gamma_{jr}}] + \Psi_{xr}^p(y, \Omega_{i+M/2}), \end{aligned} \quad (5.35)$$

para $y \in [b_{m-1}, b_m]$, sendo $i = 1, \dots, M/2$ e $r = 1, \dots, R$.

No entanto, observa-se que nas expressões da solução homogênea e nas expressões da solução particular, aparecem coeficientes que ainda não foram determinados. Desta forma, para estabelecer essa solução geral e determinar todos os coeficientes desconhecidos, é necessário resolver um sistema linear, o qual é construído utilizando as condições de contorno conhecidas (reflexivo e vácuo) e a condição de continuidade entre as interfaces de cada região em conjuntos com as equações (5.32) à (5.35).

Para isso, precisa-se das condições de contorno na sua forma integrada. Primeiramente, define-se as condições de contorno com dependência espacial em x e em y , respectivamente, por

$$\begin{aligned} \Psi_r(x, b, \mathbf{\Omega}_i) = 0, & \quad \text{para } i = M/4 + 1, \dots, M/2 \\ & \quad \text{e } i = 3M/4 + 1, \dots, M, \end{aligned} \quad (5.36)$$

$$\begin{aligned} \Psi_r(x, 0, \mathbf{\Omega}_i) = \Psi_r(x, 0, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) & \quad \text{para } i = 1, \dots, M/4 \\ \text{e } i = M/2 + 1, \dots, 3M/4, & \end{aligned} \quad (5.37)$$

e

$$\begin{aligned} \Psi_r(a, y, \mathbf{\Omega}_i) = 0, & \quad \text{para } i = M/4 + 1, \dots, M/2 \\ & \quad \text{e } i = 3M/4 + 1, \dots, M, \end{aligned} \quad (5.38)$$

$$\begin{aligned} \Psi_r(0, y, \mathbf{\Omega}_i) = \Psi_r(0, y, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) & \quad \text{para } i = 1, \dots, M/4 \\ \text{e } i = M/2 + 1, \dots, 3M/4. & \end{aligned} \quad (5.39)$$

Agora, integrando-se as equações (5.36) e (5.37) em x e as equações (5.38) e (5.39) em y , obtém-se respectivamente,

$$\begin{aligned} \Psi_{xr}(b, \mathbf{\Omega}_i) = 0, & \quad \text{para } i = M/4 + 1, \dots, M/2 \\ & \quad \text{e } i = 3M/4 + 1, \dots, M, \end{aligned} \quad (5.40)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{xr}(0, \mathbf{\Omega}_i) = \Psi_{xr}(0, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) & \quad \text{para } i = 1, \dots, M/4 \\ \text{e } i = M/2 + 1, \dots, 3M/4 & \end{aligned} \quad (5.41)$$

que seguem o ordenamento da Figura 3.3,

$$\begin{aligned} \Psi_{yr}(a, \mathbf{\Omega}_i) = 0, & \quad \text{para } i = M/4 + 1, \dots, M/2 \\ & \quad \text{e } i = 3M/4 + 1, \dots, M, \end{aligned} \quad (5.42)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{yr}(0, \mathbf{\Omega}_i) = \Psi_{yr}(0, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) & \quad \text{para } i = 1, \dots, M/4 \\ \text{e } i = M/2 + 1, \dots, 3M/4, & \end{aligned} \quad (5.43)$$

que seguem o ordenamento da Figura 3.2.

Neste ponto, observa-se que a ordem do sistema linear está relacionado a quantidade de nodos que o domínio está dividido. Para escrever o sistema linear, substitui-se as soluções gerais dadas pelas equações (5.32) à (5.35), nas equações de contorno na sua forma integrada, equações (5.40) à (5.43) e nas condições de continuidade entre as interfaces de cada região.

Dessa forma, para domínio com 4 nodos obtém-se um sistema linear de ordem $20M \times 20M$ e domínio com 16 nodos um sistema linear de ordem $88M \times 88M$, como é descrito a seguir:

- **Domínio com 4 nodos**, malha (2×2) :

- Cada nodo possui um total de $6M$ coeficientes, sendo que: $2M$ provém da solução homogênea e $4M$ provém dos coeficientes dos contornos que estão incorporados à solução particular.
- Com isso, tem-se um total de $6M \times 4 = 24M$ coeficientes nesse domínio.
- Desconta-se $M/2$ coeficientes de cada lado dos nodos que estão em contato com as condições de contorno (vácuo e reflexivo), na qual obtém-se $24M - 8(M/2) = 20M$ coeficientes a determinar.

- **Domínio com 16 nodos**, malha (4×4) :

- Cada nodo possui um total de $6M$ coeficientes, sendo que: $2M$ provém da solução homogênea e $4M$ provém dos coeficientes dos contornos que estão incorporados à solução particular.
- Tem-se um total de $6M \times 16 = 96M$ coeficientes nesse domínio.
- Desconta-se $M/2$ coeficientes de cada lado dos nodos que estão em contato com as condições de contorno (vácuo e reflexivo), obtendo-se $96M - 16(M/2) = 88M$ coeficientes a determinar.

6 RESULTADOS NUMÉRICOS

Nos capítulos anteriores apresentou-se uma proposta de solução para a equação de transporte de nêutrons em geometria cartesiana bidimensional, através da utilização de métodos nodais juntamente com a abordagem do método ADO e com diferentes aproximações para os termos de fuga transversal. Neste capítulo apresentam-se os resultados obtidos através da implementação da metodologia proposta para alguns problemas bidimensionais de transporte considerados de referência em meios homogêneos e heterogêneos com espalhamento isotrópico. Para implementação dos resultados numéricos, utilizou-se a linguagem de programação computacional FORTRAN, onde fez-se uso de subrotinas do pacote LAPACK [4] (subrotina DGEEV para o cálculo dos autovalores e autovetores, subrotinas DGETRF e DGETRS para a resolução de sistemas lineares), em um computador Intel Core i7, 6GB(RAM), HD 1TB.

A quantidade de interesse a ser calculada é o fluxo escalar médio na região r que, de acordo com a formulação desenvolvida nesse trabalho, é definido como

$$\overline{\phi}_r = \frac{1}{(a_m - a_{m-1})} \int_{a_{m-1}}^{a_m} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_{yr}(x, \Omega_k) + \Psi_{yr}(x, \Omega_{k+M/2})] dx \quad (6.1)$$

ou

$$\overline{\phi}_r = \frac{1}{(b_m - b_{m-1})} \int_{b_{m-1}}^{b_m} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_{xr}(y, \Omega_k) + \Psi_{xr}(y, \Omega_{k+M/2})] dy, \quad (6.2)$$

onde $r = 1, \dots, R$ representa o número de regiões retangulares, definidas para $x \in [a_{r-1}, a_r]$ e $y \in [b_{r-1}, b_r]$, com $0 \leq a_{m-1} < a_m \leq a$ e $0 \leq b_{m-1} < b_m \leq b$. Em todos os casos testes apresentados os resultados obtidos via equações (6.1) e (6.2) foram coincidentes, os quais são apresentados nas seções seguintes.

6.1 Meio Homogêneo: Fluxo Escalar Médio

Com o objetivo de analisar o comportamento das diferentes aproximações para os fluxos desconhecidos nos contornos apresentadas nesse trabalho (aproximações por constantes, aproximações lineares e aproximações por exponenciais), em diferentes problemas, buscou-se aqui comparações entre resultados obtidos com a utilização do método ADO e do código computacional fornecido pelo Prof. Dr. Y. Azmy AHOT [7].

6.1.1 Caso teste 1

Como primeiro caso teste, considera-se um problema homogêneo, com espalhamento isotrópico definido em um domínio retangular $a = b = 1.0 \text{ cm}$. Para este problema, o interesse é avaliar o fluxo escalar médio em quatro regiões, sendo que a região I contém uma fonte fixa isotrópica $Q(x, y) = 1.0$ localizada em $[0, 0.5] \times [0, 0.5]$, conforme representação na Figura 6.1. A seção de choque macroscópica total é $\sigma_t = 1.0 \text{ cm}^{-1}$ e seção de choque de espalhamento $\sigma_s = 0.5 \text{ cm}^{-1}$, nas quatro regiões.

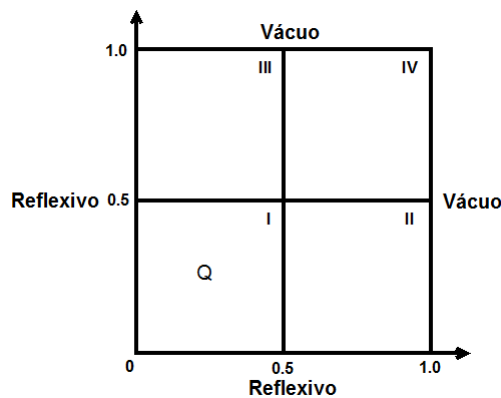


Figura 6.1: Representação do domínio do problema, caso teste 1.

A quantidade de interesse a ser analisada é o fluxo escalar médio determinado através das equações (6.1) e (6.2). Utilizou-se para aproximar os fluxos desconhecidos nos contornos três aproximações: constantes, lineares e exponenciais, respectivamente denotadas por: ADO-C, ADO-L e ADO-E. Os resultados encontrados são comparados com os obtidos pelo código AHOT [7] baseado em aproximações constantes e lineares, denotados respectivamente por: AHOT-C [7] e AHOT-L [7].

Na Tabela 6.1 apresenta-se os resultados obtidos por ambos os métodos, ADO e AHOT.

Tabela 6.1: Fluxo escalar médio, caso teste 1

Quadratura Simétrica de Nível LQ_N													
R ^a	D ^b	AHOT [7]			AHOT [7]			ADO		ADO		ADO	
		Constante			Linear			Constante		Linear		Exponencial	
		2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4
I	1	0.5220	0.5392	0.5455	0.5444	0.5514	0.5467	0.5357	0.5433	0.5925	0.5570	0.5530	0.5475
	3	0.5648	0.5752	0.5795	0.5711	0.5777	0.5797	0.5809	0.5799	0.6432	0.5936	0.5956	0.5833
	6	0.5710	0.5806	0.5849	0.5773	0.5832	0.5850	0.5869	0.5854	0.6489	0.5979	0.6013	0.5886
	10	0.5743	0.5840	0.5882	0.5806	0.5862	0.5883	0.5900	0.5888	0.6507	0.6003	0.6040	0.5919
	21	0.5767	0.5862	0.5904	0.5830	0.5883	0.5904	0.5918	0.5911	0.6506	0.6018	0.6054	0.5941
	36	0.5777	0.5872	0.5913	0.5842	0.5893	0.5913	0.5926	0.5920	0.6500	0.6025	0.6059	0.5950
II	1	0.2073	0.1986	0.1953	0.1953	0.1928	0.1947	0.2073	0.1980	0.1799	0.1915	0.2041	0.1973
	3	0.2132	0.2077	0.2053	0.2008	0.2017	0.2049	0.2137	0.2074	0.1803	0.2017	0.2092	0.2064
	6	0.2124	0.2070	0.2052	0.2014	0.2021	0.2049	0.2130	0.2067	0.1798	0.2026	0.2083	0.2058
III	10	0.2116	0.2064	0.2051	0.2014	0.2022	0.2047	0.2123	0.2060	0.1800	0.2028	0.2077	0.2052
	21	0.2109	0.2061	0.2049	0.2014	0.2022	0.2046	0.2116	0.2057	0.1810	0.2028	0.2073	0.2049
	36	0.2107	0.2060	0.2048	0.2014	0.2022	0.2045	0.2113	0.2057	0.1817	0.2027	0.2072	0.2049
IV	1	0.1583	0.1695	0.1732	0.1453	0.1634	0.1729	0.1612	0.1709	0.2152	0.1824	0.1759	0.1745
	3	0.1275	0.1284	0.1278	0.1083	0.1199	0.1273	0.1280	0.1286	0.1702	0.1308	0.1364	0.1298
	6	0.1184	0.1195	0.1182	0.1027	0.1127	0.1180	0.1183	0.1195	0.1547	0.1189	0.1253	0.1203
	10	0.1145	0.1158	0.1144	0.0994	0.1089	0.1142	0.1142	0.1156	0.1476	0.1147	0.1206	0.1163
	21	0.1117	0.1128	0.1118	0.0969	0.1060	0.1115	0.1113	0.1125	0.1428	0.1124	0.1174	0.1132
	36	0.1107	0.1116	0.1109	0.0960	0.1050	0.1105	0.1103	0.1113	0.1413	0.1118	0.1163	0.1121

^a Região^b Direções por octante

Primeiramente, faz-se uma análise para cada método observando o comportamento dos resultados obtidos para cada uma das aproximações em cada região, em seguida, uma análise comparativa entre os dois métodos.

A seguir, discute-se resultados obtidos com as aproximações AHOT-C e AHOT-L.

- Para uma análise inicial, fixa-se a ordem de quadratura e compara-se os resultados entre as diferentes malhas em cada aproximação. Verificou-se para as aproximações AHOT-C e AHOT-L de um a dois dígitos de concordância nas quatro regiões, quando faz-se a comparação entre as malhas.
- Observou-se que fixada a malha para as diferentes aproximações, AHOT-C e AHOT-L, os fluxos escalares médios de cada região conforme o aumento da ordem de quadratura estão convergindo de dois a três dígitos para os mesmos valores.
- Quando compara-se o método AHOT-C com o método AHOT-L, para uma mesma malha, observa-se na região I, uma concordância de dois a três dígitos significativos entre os fluxos escalares médios com as malhas 4×4 e 50×50 , por outro lado, com a malha 2×2 , obteve-se um dígito de concordância. Na regiões II e III, obteve-se para essa mesma comparação até dois dígitos de concordância com as malhas 2×2 e 4×4 , e até três dígitos com a malha 50×50 . No entanto, com a região IV, essa concordância foi melhor somente com a malha 50×50 , onde obteve-se dois dígitos de concordância.

Seguindo essa mesma linha de comparações, apresenta-se a seguir as análises obtidas com as aproximações ADO-C, ADO-L e ADO-E.

- Observa-se para cada região, quando compara-se os fluxos escalares médios entre as malhas (2×2 e 4×4) para cada uma das aproximações, as seguintes análises. Na região I, obtém-se até dois dígitos de concordância entre os resultados com as aproximações ADO-C e ADO-E, e um dígito com a aproximação ADO-L. Nessa mesma análise, agora para as regiões II e III, com a aproximação ADO-E a concordância está em dois dígitos significativos e com as aproximações ADO-C e ADO-L um dígito. Na região IV, obtém-se até dois dígitos significativos com as aproximações ADO-C e ADO-E e um dígito com a aproximação ADO-L.
- Como segunda análise, fixada a malha para cada uma das três aproximações, observa-se para as quatro regiões uma convergência de dois a três dígitos significativos nos fluxos escalares médios conforme o aumento da ordem de quadratura.

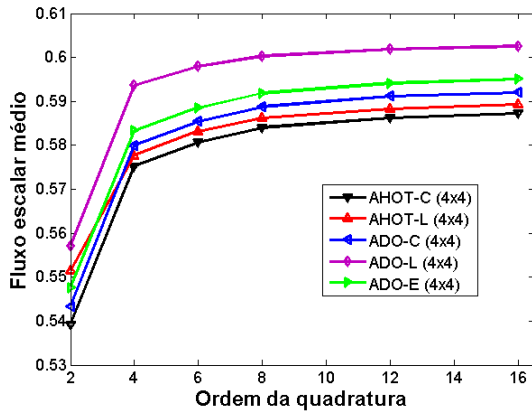
- Como terceira análise, faz-se uma comparação entre as três aproximações. Observa-se entre ADO-C e ADO-L até dois dígitos de concordância nos fluxos escalares médios com a malha 4×4 nas quatro regiões e, com a malha 2×2 consegue-se até um dígito, mesma quantidade de dígitos obtida quando compara-se a aproximação ADO-E com a ADO-L. Observa-se uma melhora de até um dígito na comparação entre as aproximações ADO-C e ADO-E, onde obtém-se dois dígitos de concordância entre os fluxos escalares médios com a malha 4×4 nas quatro regiões e um a dois dígitos com a malha 2×2 .

Como próxima análise, faz-se uma comparação entre os dois métodos, ADO e AHOT, onde observa-se em quais malhas os dois métodos estão obtendo valores próximos um do outro.

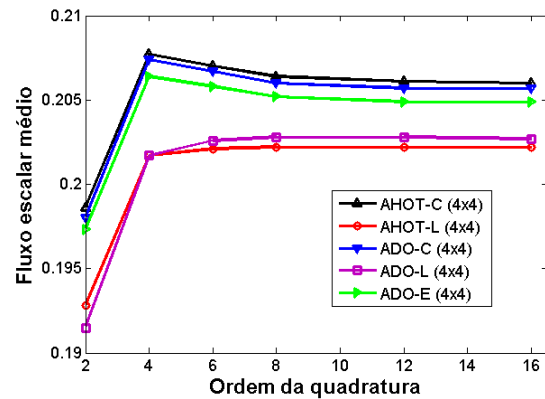
- Na região I, com as aproximações ADO-C malha 4×4 e AHOT-C malha 50×50 , conseguiu-se até dois dígitos significativos entre os fluxos escalares médios, onde o erro relativo é inferior a 0.4%. Para as demais regiões, conseguiu-se um dígito significativo entre ADO-C malha 4×4 e AHOT-C malha 4×4 , sendo que, nas regiões II e III o erro relativo é inferior a 0.3% e na região IV inferior a 0.8%.
- Observa-se que, nas regiões I e IV, a comparação entre as aproximações ADO-L malha 4×4 e AHOT-L malha 50×50 , fornecem um dígito significativo entre os fluxos médios, sendo que, na região I o erro relativo entre cada método é inferior a 2.0% e na região IV inferior a 5.0%. No entanto, nas regiões II e III, consegue-se um dígito significativo entre ADO-L 4×4 e AHOT-L 4×4 e o erro relativo é inferior a 0.6%.
- Entre as aproximações ADO-E malha 4×4 e AHOT-C malha 50×50 , obteve-se de dois a três dígitos de concordância entre os fluxos escalares médios em todas as regiões, sendo que na região I o erro relativo entre as duas aproximações é inferior a 0.6%, nas regiões II e III é inferior a 1.0% e na região IV inferior a 1.7%.

De forma geral, pode-se concluir que os resultados obtidos para este problema teste utilizando o método ADO aplicado as diferentes aproximações para os fluxos desconhecidos nos contornos, foram satisfatórios e seguiram comportamento similar aos resultados

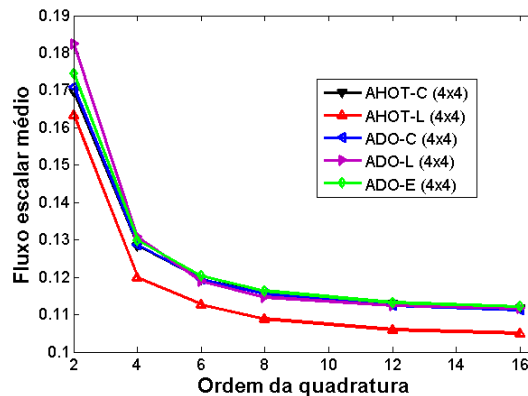
obtidos pelo código AHOT, aplicado as suas diferentes aproximações. Esse comportamento pode ser melhor observado na Figura 6.2, que representa graficamente os fluxos escalares médios malha 4×4 obtidos em cada região.



(a) região I



(b) regiões II e III



(c) região IV

Figura 6.2: Representação do fluxo escalar médio para cada região

6.1.2 Caso teste 2

Para o caso teste 2, para efeito de comparação com resultados apresentados em Tres [106], considera-se o mesmo problema descrito anteriormente, os parâmetros agora definidos por seção de choque macroscópica total $\sigma_t = 1.0 \text{ cm}^{-1}$ e seção de choque de espalhamento $\sigma_s = 0.3 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0.9 \text{ cm}^{-1}$ nas quatro regiões.

A grandeza de interesse a ser calculada é o fluxo escalar médio em cada região e, nesse caso teste, utilizou-se quatro diferentes quadraturas, Quadratura Simétrica de Nível LQ_N , Quadratura Legendre-Chebyshev Triangular $P_N T_N S_N$, Quadratura Legendre-Chebyshev Quadrangular $P_N T_N$ e Quadratura Quadruple Range QR . Nas Tabelas 6.2 - 6.4

estão representados os valores dos fluxos escalares médios considerando $\sigma_s = 0.9 \text{ cm}^{-1}$ e nas Tabelas 6.5 - 6.7 considerando $\sigma_s = 0.3 \text{ cm}^{-1}$.

Primeiramente, faz-se a análise das Tabelas 6.2 - 6.4 observando os resultados e comportamento de cada método, utilizando-se a mesma linha de comparações do caso teste anterior.

Com as aproximações AHOT-C e AHOT-L, faz-se as seguintes análises:

- Como uma primeira análise, fixa-se o número de direções e faz-se a comparação entre os fluxos escalares médios das diferentes malhas, nas quatro diferentes quadraturas. Observou-se que nas regiões I e IV, a aproximação AHOT-C seguiu comportamento análogo ao verificado no caso teste 1, no entanto, nas regiões II e III essa comparação melhorou, sendo que agora até três dígitos de concordância nos resultados entre as malhas 2×2 , 4×4 e 50×50 podem ser obtidos. A análise obtida da aproximação AHOT-L é análoga ao caso teste 1.
- Na segunda análise, na qual fixa-se a malha e faz-se uma comparação entre os fluxos escalares médios obtidos, verificou-se os seguintes aspectos para as duas aproximações. Na região I, observa-se uma convergência de dois dígitos conforme aumento do número de direções com as quadraturas LQ_N , $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$ e, com a quadratura QR a convergência está em três dígitos. Nas regiões II e III, observa-se uma melhora na convergência dos fluxos em relação ao caso teste 1, chegando a obter até quatro dígitos de convergência com a quadratura QR . Na região IV a convergência está em um a dois dígitos para ambas as aproximações e quadraturas.
- Na terceira análise, compara-se os resultados obtidos entre as aproximações AHOT-C e AHOT-L considerando as mesmas malhas. A concordância em números de dígitos diminuiu para a região I em relação ao que se obteve com o caso teste 1, sendo que agora obtém-se até dois dígitos de concordância, com as quatro quadraturas. Nas regiões II, III e IV, diferentemente do outro caso teste, consegue-se de dois a três dígitos de concordância entre os resultados com a malha 50×50 . Com as demais malhas consegue-se apenas um dígito de concordância, isso é verificado em todas as quadraturas.

A seguir, apresentam-se as análises baseadas nas comparações dos resultados obtidos com as aproximações ADO-C, ADO-L e ADO-E.

- Os seguintes pontos foram verificados quando analisa-se os fluxos escalares médios entre as diferentes malhas para cada uma das aproximações. Com base nos resultados obtidos para a região I, verificou-se concordâncias análogas ao caso teste anterior para a aproximação ADO-C, no entanto, com as demais aproximações obteve-se perdas em dígitos, ou seja, com a aproximação ADO-E, obteve-se um dígito de concordância entre as duas malhas e com a aproximação ADO-L nenhum dígito. Nas regiões II e III, obteve-se um dígito significativo nessa comparação para as três aproximações. Na região IV, observou-se comparações análogas ao caso teste 1.
- Convergências análogas ao caso teste anterior, foram obtidas na análise em que fixa-se a malha em cada uma das aproximações e faz-se uma comparação nos resultados de acordo com o aumento do número de direções. Observou-se que, com a quadratura QR essa convergência está melhor representada.
- Na análise entre as diferentes aproximações com malhas iguais. Entre as aproximações, ADO-C com ADO-L e ADO-E com ADO-L, na região I consegue-se no máximo um dígito de concordância entre os fluxos escalares médios e, nas demais regiões até dois dígitos. Por outro lado, quando compara-se a aproximação ADO-C com a aproximação ADO-E, um a dois dígitos são obtidos em todas as regiões, o mesmo obtido com o caso teste anterior.

Como última análise, faz-se comparações entre os métodos, AHOT e ADO.

- Observa-se para a região I, dois dígitos significativos entre os resultados das aproximações ADO-C malha 4×4 e AHOT-C malha 50×50 , onde o erro relativo é inferior a 0.4% nas quadraturas LQ_N e $P_N T_N S_N$ e inferior a 0.6% nas quadraturas $P_N T_N$ e QR . Nas regiões II, III e IV verificou-se dois dígitos de concordância entre as aproximações ADO-C malha 4×4 e AHOT-C malha 4×4 , sendo que para as regiões II e III, o erro relativo é inferior a 0.5% em todas as quadraturas e, na região IV, com as quadraturas LQ_N , $P_N T_N S_N$

e $P_N T_N$ o erro relativo é inferior a 1.8% com a primeira direção e com as demais direções inferior a 0.7%, no entanto, com a quadratura QR o erro relativo é inferior a 0.2% em todas as direções.

- Nas regiões I, II e III, obteve-se até dois dígitos significativos entre as aproximações ADO-L malha 4×4 e AHOT-L malha 50×50 , sendo que, na região I o erro relativo é inferior a 3.6% nas quatro quadraturas e, nas regiões II e III, o erro relativo é inferior a 0.9% nas quadraturas LQ_N , $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$ e inferior a 0.5% na quadratura QR . Para a região IV, observou-se até dois dígitos significativos entre as aproximações ADO-L malha 4×4 e AHOT-C malha 4×4 , com erro relativo igual a 8.0% nas duas primeiras direções, no entanto, a partir da terceira direção a porcentagem de erro diminui, ficando inferior a 1.0%, isso é observado em todas as quadraturas.
- Entre as aproximações ADO-E malha 4×4 e AHOT-C malha 50×50 , verificou-se na região I até dois dígitos de concordância entre os fluxos escalares médios, sendo que nas quadraturas LQ_N e $P_N T_N S_N$ o erro relativo é inferior a 0.8% e nas quadraturas $P_N T_N$ e QR inferior a 1.0%. Por outro lado, nas regiões II, III e IV, obteve-se até dois dígitos significativos comparando-se as aproximações ADO-E malha 4×4 e AHOT-C malha 4×4 , sendo que, nas regiões II e III o erro relativo é inferior a 0.4% nas quatro quadraturas e, na região IV, inferior a 2.7% com a primeira direção e com as demais direções inferior a 1.0%, isso para as quadraturas LQ_N , $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$, no entanto, com a quadratura QR o erro relativo é inferior a 0.6% em todas as direções.

Tabela 6.2: Fluxo escalar médio, caso teste 2 - região I, $\sigma_s = 0.9$

Quadratura simétrica de nível LQ_N												
D ^a	AHOT [7] Constante			AHOT [7] Linear			ADO Constante		ADO Linear		ADO Exponencial	
	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4
1	0.7542	0.7959	0.8124	0.7819	0.8108	0.8140	0.8003	0.8100	0.9020	0.8350	0.8148	0.8136
3	0.8276	0.8589	0.8712	0.8258	0.8530	0.8705	0.8835	0.8749	1.0008	0.9007	0.8990	0.8785
6	0.8362	0.8659	0.8783	0.8363	0.8613	0.8775	0.8924	0.8822	1.0097	0.9063	0.9077	0.8857
10	0.8410	0.8704	0.8829	0.8417	0.8658	0.8821	0.8967	0.8869	1.0123	0.9096	0.9119	0.8903
21	0.8442	0.8731	0.8854	0.8457	0.8686	0.8846	0.8985	0.8894	1.0112	0.9110	0.9134	0.8928
Quadratura $P_N T_N S_N$												
D ^a	AHOT [7] Constante			AHOT [7] Linear			ADO Constante		ADO Linear		ADO Exponencial	
	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4
1	0.7542	0.7959	0.8124	0.7819	0.8108	0.8140	0.8003	0.8100	0.9020	0.8350	0.8148	0.8136
3	0.8251	0.8570	0.8695	0.8242	0.8516	0.8688	0.8808	0.8730	0.9974	0.8989	0.8962	0.8765
6	0.8379	0.8680	0.8804	0.8380	0.8632	0.8797	0.8942	0.8844	1.0113	0.9084	0.9096	0.8879
10	0.8419	0.8714	0.8838	0.8424	0.8662	0.8829	0.8975	0.8878	1.0127	0.9105	0.9126	0.8912
21	0.8452	0.8739	0.8862	0.8471	0.8695	0.8853	0.8990	0.8902	1.0106	0.9116	0.9137	0.8936
36	0.8469	0.8750	0.8872	0.8491	0.8710	0.8864	0.8994	0.8912	1.0088	0.9122	0.9139	0.8945
Quadratura $P_N T_N$												
D ^a	AHOT [7] Constante			AHOT [7] Linear			ADO Constante		ADO Linear		ADO Exponencial	
	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4
1	0.7542	0.7959	0.8124	0.7819	0.8108	0.8140	0.8003	0.8100	0.9020	0.8350	0.8148	0.8136
4	0.8295	0.8566	0.8678	0.8225	0.8455	0.8661	0.8841	0.8723	1.0016	0.8977	0.8995	0.8759
9	0.8422	0.8704	0.8828	0.8465	0.8689	0.8822	0.8960	0.8865	1.0098	0.9087	0.9110	0.8899
16	0.8460	0.8740	0.8861	0.8469	0.8689	0.8851	0.8987	0.8901	1.0096	0.9112	0.9133	0.8934
36	0.8485	0.8760	0.8879	0.8502	0.8718	0.8870	0.8997	0.8918	1.0077	0.9126	0.9140	0.8951
Quadratura QR												
D ^a	AHOT [7] Constante			AHOT [7] Linear			ADO Constante		ADO Linear		ADO Exponencial	
	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4
2	0.8027	0.8240	0.8333	0.7949	0.8139	0.8317	0.8530	0.8382	0.9728	0.8621	0.8693	0.8418
8	0.8510	0.8786	0.8903	0.8510	0.8727	0.8892	0.9019	0.8944	1.0076	0.9151	0.9161	0.8977
18	0.8505	0.8775	0.8891	0.8517	0.8730	0.8882	0.9003	0.8930	1.0061	0.9144	0.9144	0.8962
32	0.8503	0.8771	0.8887	0.8518	0.8730	0.8879	0.8998	0.8925	1.0058	0.9137	0.9139	0.8957

^a Direções por octante

Tabela 6.3: Fluxo escalar médio, caso teste 2 - regiões II e III, $\sigma_s = 0.9$

Quadratura simétrica de nível LQ_N												
D ^a	AHOT [7]			AHOT [7]			ADO		ADO		ADO	
	Constante			Linear			Constante		Linear		Exponencial	
	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4
1	0.3504	0.3443	0.3409	0.3377	0.3385	0.3404	0.3573	0.3447	0.3332	0.3381	0.3583	0.3449
3	0.3737	0.3728	0.3717	0.3541	0.3622	0.3709	0.3840	0.3746	0.3459	0.3676	0.3830	0.3743
6	0.3741	0.3733	0.3729	0.3569	0.3644	0.3722	0.3846	0.3751	0.3445	0.3702	0.3832	0.3748
10	0.3738	0.3733	0.3734	0.3578	0.3652	0.3727	0.3844	0.3749	0.3448	0.3714	0.3829	0.3747
21	0.3734	0.3732	0.3735	0.3585	0.3656	0.3729	0.3839	0.3748	0.3461	0.3719	0.3825	0.3746
Quadratura $P_N T_N S_N$												
D ^a	AHOT [7]			AHOT [7]			ADO		ADO		ADO	
	Constante			Linear			Constante		Linear		Exponencial	
	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4
1	0.3504	0.3443	0.3409	0.3377	0.3385	0.3404	0.3573	0.3447	0.3332	0.3381	0.3583	0.3449
3	0.3732	0.3722	0.3710	0.3536	0.3616	0.3702	0.3834	0.3739	0.3461	0.3668	0.3825	0.3737
6	0.3741	0.3734	0.3729	0.3569	0.3644	0.3722	0.3846	0.3751	0.3447	0.3702	0.3832	0.3748
10	0.3736	0.3732	0.3733	0.3576	0.3650	0.3726	0.3842	0.3749	0.3448	0.3712	0.3827	0.3746
21	0.3733	0.3731	0.3734	0.3587	0.3657	0.3728	0.3836	0.3748	0.3466	0.3717	0.3823	0.3746
36	0.3733	0.3733	0.3736	0.3591	0.3660	0.3729	0.3834	0.3750	0.3479	0.3717	0.3822	0.3747
Quadratura $P_N T_N$												
D ^a	AHOT [7]			AHOT [7]			ADO		ADO		ADO	
	Constante			Linear			Constante		Linear		Exponencial	
	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4
1	0.3504	0.3443	0.3409	0.3377	0.3385	0.3404	0.3573	0.3447	0.3332	0.3381	0.3583	0.3449
4	0.3735	0.3736	0.3727	0.3548	0.3632	0.3720	0.3841	0.3755	0.3443	0.3689	0.3827	0.3751
9	0.3740	0.3734	0.3736	0.3600	0.3665	0.3731	0.3845	0.3751	0.3459	0.3723	0.3831	0.3749
16	0.3737	0.3734	0.3741	0.3590	0.3661	0.3734	0.3840	0.3751	0.3473	0.3726	0.3827	0.3749
36	0.3736	0.3735	0.3738	0.3594	0.3662	0.3732	0.3835	0.3752	0.3488	0.3719	0.3824	0.3750
Quadratura QR												
D ^a	AHOT [7]			AHOT [7]			ADO		ADO		ADO	
	Constante			Linear			Constante		Linear		Exponencial	
	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4
2	0.3703	0.3699	0.3691	0.3528	0.3605	0.3685	0.3810	0.3717	0.3384	0.3675	0.3790	0.3713
8	0.3758	0.3763	0.3767	0.3612	0.3685	0.3760	0.3858	0.3781	0.3527	0.3741	0.3848	0.3779
18	0.3738	0.3736	0.3739	0.3595	0.3664	0.3733	0.3834	0.3753	0.3495	0.3714	0.3823	0.3751
32	0.3738	0.3736	0.3738	0.3596	0.3664	0.3732	0.3834	0.3753	0.3494	0.3715	0.3823	0.3751

^a Direções por octante

Tabela 6.4: Fluxo escalar médio, caso teste 2 - região IV, $\sigma_s = 0.9$

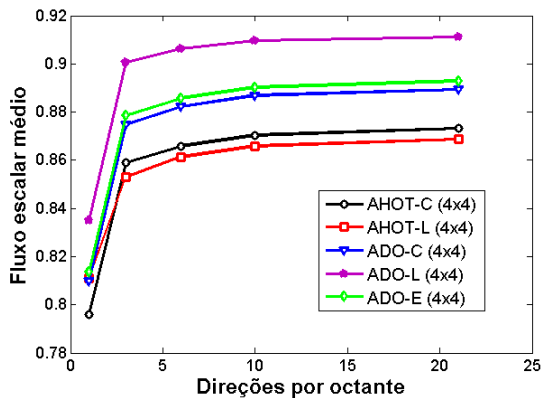
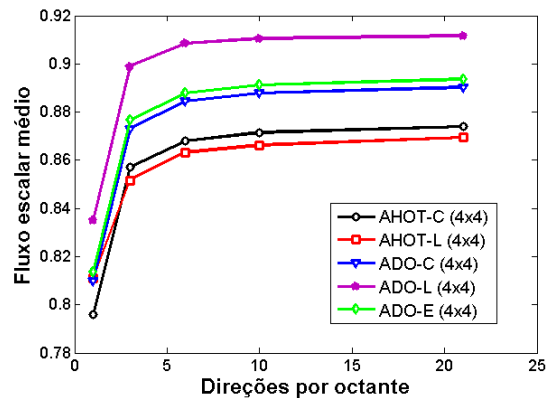
Quadratura simétrica de nível LQ_N												
D ^a	AHOT [7]			AHOT [7]			ADO		ADO		ADO	
	Constante			Linear			Constante		Linear		Exponencial	
	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4
1	0.2634	0.2834	0.2917	0.2498	0.2773	0.2915	0.2752	0.2885	0.3563	0.3067	0.2848	0.2910
3	0.2354	0.2379	0.2375	0.2104	0.2269	0.2369	0.2414	0.2395	0.3078	0.2435	0.2484	0.2405
6	0.2255	0.2278	0.2263	0.2048	0.2192	0.2262	0.2296	0.2288	0.2872	0.2281	0.2357	0.2295
10	0.2215	0.2240	0.2224	0.2013	0.2151	0.2221	0.2250	0.2247	0.2780	0.2234	0.2306	0.2254
21	0.2187	0.2209	0.2197	0.1987	0.2120	0.2193	0.2220	0.2214	0.2719	0.2212	0.2273	0.2220
Quadratura $P_N T_N S_N$												
D ^a	AHOT [7]			AHOT [7]			ADO		ADO		ADO	
	Constante			Linear			Constante		Linear		Exponencial	
	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4
1	0.2634	0.2834	0.2917	0.2498	0.2773	0.2915	0.2752	0.2885	0.3563	0.3067	0.2848	0.2910
3	0.2377	0.2408	0.2408	0.2125	0.2296	0.2401	0.2441	0.2425	0.3121	0.2477	0.2513	0.2437
6	0.2260	0.2284	0.2272	0.2051	0.2196	0.2269	0.2302	0.2294	0.2881	0.2294	0.2363	0.2302
10	0.2214	0.2236	0.2221	0.2008	0.2145	0.2218	0.2249	0.2243	0.2779	0.2237	0.2305	0.2250
21	0.2183	0.2204	0.2193	0.1984	0.2115	0.2189	0.2216	0.2209	0.2716	0.2213	0.2269	0.2215
36	0.2173	0.2195	0.2185	0.1975	0.2105	0.2181	0.2206	0.2199	0.2703	0.2210	0.2259	0.2206
Quadratura $P_N T_N$												
D ^a	AHOT [7]			AHOT [7]			ADO		ADO		ADO	
	Constante			Linear			Constante		Linear		Exponencial	
	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4
1	0.2634	0.2834	0.2917	0.2498	0.2773	0.2915	0.2752	0.2885	0.3563	0.3067	0.2848	0.2910
4	0.2239	0.2226	0.2206	0.1977	0.2107	0.2198	0.2278	0.2233	0.2875	0.2232	0.2340	0.2241
9	0.2188	0.2214	0.2198	0.2020	0.2149	0.2199	0.2220	0.2221	0.2722	0.2193	0.2273	0.2226
16	0.2175	0.2195	0.2182	0.1967	0.2096	0.2177	0.2207	0.2199	0.2691	0.2198	0.2259	0.2206
36	0.2167	0.2189	0.2180	0.1964	0.2093	0.2174	0.2200	0.2192	0.2690	0.2207	0.2253	0.2199
Quadratura QR												
D ^a	AHOT [7]			AHOT [7]			ADO		ADO		ADO	
	Constante			Linear			Constante		Linear		Exponencial	
	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4
2	0.2116	0.2087	0.2049	0.1882	0.1988	0.2047	0.2134	0.2088	0.2619	0.2014	0.2186	0.2090
8	0.2167	0.2184	0.2178	0.1948	0.2077	0.2170	0.2202	0.2187	0.2697	0.2224	0.2256	0.2195
18	0.2159	0.2184	0.2170	0.1952	0.2081	0.2165	0.2195	0.2189	0.2698	0.2204	0.2249	0.2197
32	0.2161	0.2185	0.2175	0.1957	0.2086	0.2170	0.2197	0.2190	0.2697	0.2207	0.2251	0.2196

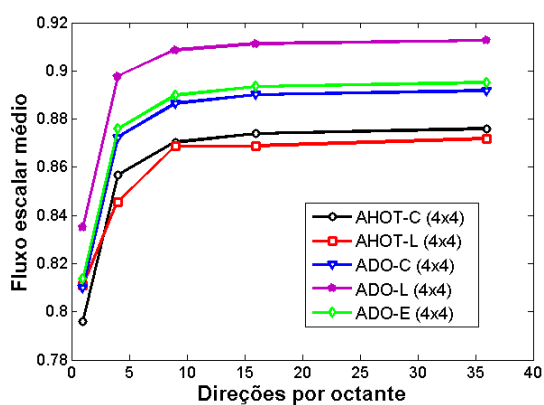
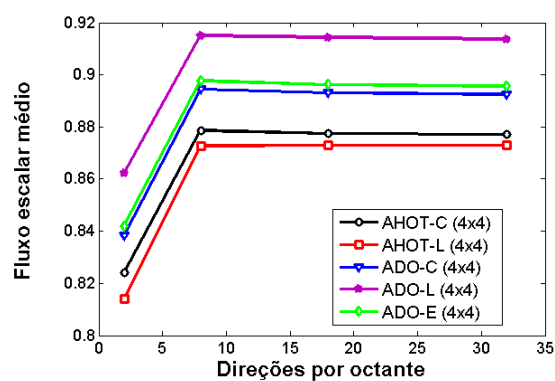
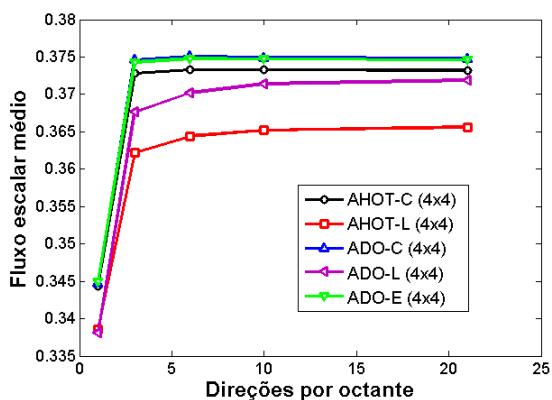
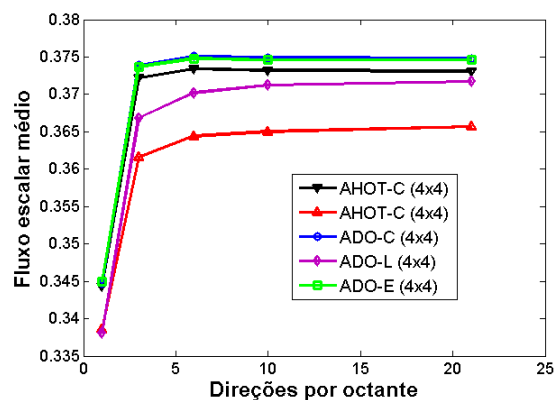
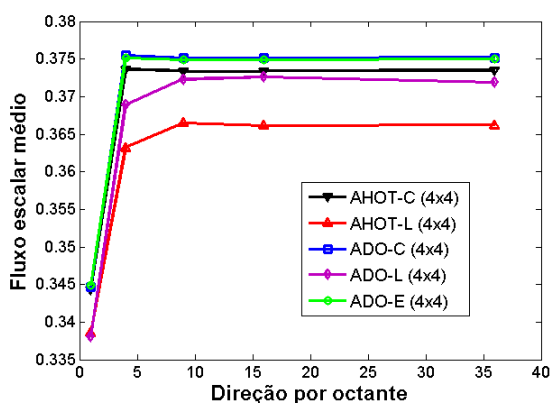
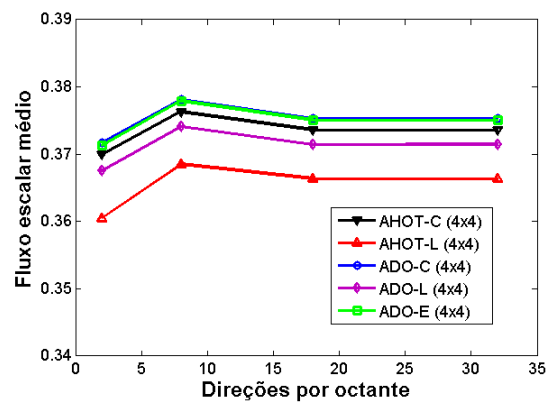
^a Direções por octante

De acordo com os resultados e as análises apresentadas acima, cabe enfatizar que em Tres [106], as comparações foram realizadas entre as diferentes quadraturas utilizadas, e não entre as aproximações para os fluxos desconhecidos nos contornos utilizados pelos diferentes métodos (ADO e AHOT), que é o objetivo desse estudo.

Dessa forma, entre todas as comparações realizadas por ambos os trabalhos, a única que se assemelha e que inclusive obteve as mesmas conclusões, corresponde à análise entre os fluxos escalares médios considerando o aumento do número de direções para uma malha fixada. S, conclui-se para essa análise que os resultados obtidos com as aproximações ADO-L e ADO-E não alteram as comparações que já se obteve com a aproximação ADO-C, ou seja, mantiveram-se as mesmas comparações. No entanto, para as demais análises, as quais são diferentes, não se pode chegar à essas conclusões para as aproximações ADO-L e ADO-E.

Nas Figuras 6.3, 6.4 e 6.5, encontram-se as representações gráficas dos fluxos escalares médios das regiões I, II, III e IV, respectivamente, utilizando as diferentes quadraturas. Conforme já verificado no caso teste anterior, observa-se para esse caso teste, resultados satisfatórios, bem como, comportamento semelhante das aproximações ADO-C, ADO-L e ADO-E às aproximações AHOT-C e AHOT-L.

(a) Quadratura LQ_N (b) Quadratura $P_N T_N S_N$

(c) Quadratura $P_N T_N$ (d) Quadratura Q_R Figura 6.3: Representação do fluxo escalar médio para a região I, $\sigma_s = 0.9$ (a) Quadratura $L Q_N$ (b) Quadratura $P_N T_N S_N$ (c) Quadratura $P_N T_N$ (d) Quadratura Q_R Figura 6.4: Representação do fluxo escalar médio para a regiões II e III, $\sigma_s = 0.9$

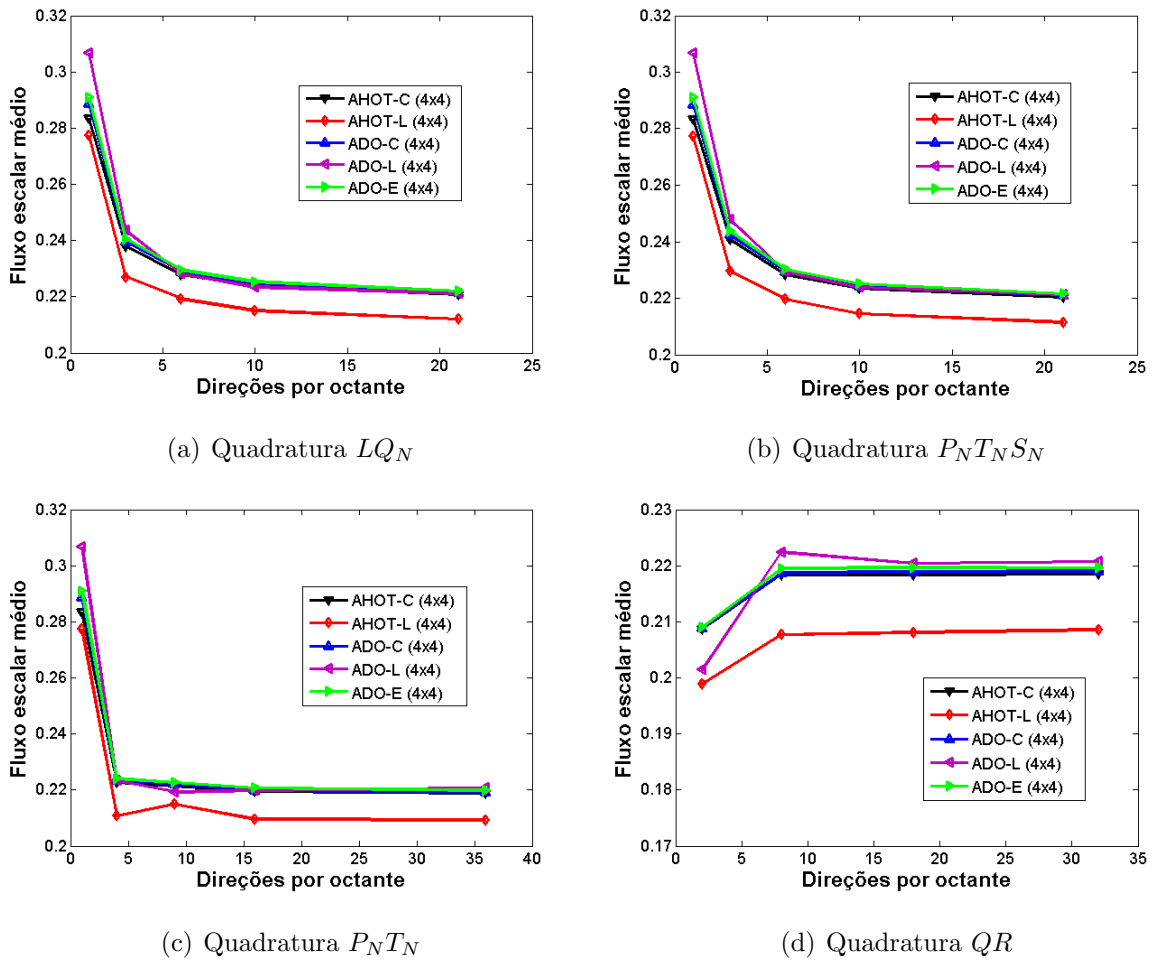


Figura 6.5: Representação do fluxo escalar médio para a região IV, $\sigma_s = 0.9$

A seguir, apresentam-se as análises obtidas nas Tabelas 6.5 - 6.7 onde a seção de choque de espalhamento considerada é $\sigma_s = 0.3 \text{ cm}^{-1}$.

- Verificou-se para as diferentes linhas de comparações com as aproximações AHOT-C e AHOT-L, conclusões análogas às obtidas com o caso teste 1.
- Na análise em que fixa-se o número de direções e faz-se uma comparação nos fluxos escalares médios entre as diferentes malhas, verificou-se conclusões análogas ao caso teste 1 em relação à aproximação ADO-L. No entanto, verifica-se uma melhora nos resultados com as aproximações ADO-C e ADO-E, tendo-se conseguido até dois dígitos significativos entre os resultados para as quatro regiões.
- Convergências análogas são obtidas em relação ao caso teste 1, na análise em que a malha é fixada em cada aproximação e faz-se uma comparação entre

os fluxos escalares médios de acordo com o aumento do número de direções. Conclusões análogas ao caso teste 1, também foram obtidas quando faz-se as comparações entre as aproximações ADO-C, ADO-L e ADO-E.

- Na comparação entre os dois métodos, ADO e AHOT, verificou-se as seguintes análises.
 - Na região I, obteve-se até três dígitos significativos entre as aproximações ADO-C malha 4×4 e AHOT-C malha 50×50 , com erro relativo inferior a 0.4% nas quadraturas LQ_N , $P_N T_N S_N$, $P_N T_N$ e inferior a 0.02% na quadratura QR . Nas regiões II, III e IV, até três dígitos significativos são obtidos entre as aproximações ADO-C malha 4×4 e AHOT-C malha 4×4 , sendo que nas regiões II e III, o erro relativo é inferior a 0.3% em todas as quadraturas e, na região IV é inferior a 0.4% nas quadraturas LQ_N , $P_N T_N S_N$, $P_N T_N$ e na quadratura QR , inferior a 0.2%.
 - Diferentemente do que se obteve para o caso teste 1, observou-se para esse valor de σ resultados mais próximos entre as aproximações ADO-L malha 4×4 e AHOT-L malha 4×4 , sendo que, na região I obteve-se até dois dígitos de concordância, com erro relativo inferior a 1.8% nas quadraturas LQ_N , $P_N T_N S_N$ e inferior a 2.2% nas quadraturas $P_N T_N$ e QR . Nas regiões II e III, até três dígitos, com erro relativo inferior a 0.6% nas quadraturas LQ_N , $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$ e na quadratura QR inferior a 0.2%. Na região IV, obteve-se até dois dígitos significativos entre as aproximações ADO-L malha 4×4 e AHOT-C malha 4×4 , com erro relativo inferior a 7.0% nas duas primeiras direções e, a partir da terceira direção a porcentagem de erro relativo decai, sendo inferior a 1.0%.
 - Na comparação entre as aproximações ADO-E malha 4×4 e AHOT-C malha 50×50 , também obteve-se uma melhora em relação ao que se obtinha com o caso teste 1, sendo que, na região I verificou-se até dois dígitos de concordância, com erro relativo inferior a 0.5% nas quadraturas LQ_N , $P_N T_N S_N$ e nas quadraturas $P_N T_N$ e QR inferior a 0.6%, nas regiões II e III, obteve-se até três dígitos de concordância, onde, nas

quadraturas LQ_N , $P_N T_N S_N$, $P_N T_N$ o erro relativo é inferior a 0.9% e na quadratura QR inferior a 0.1%. Na região IV, verificou-se dois dígitos significativos, sendo que nas quadraturas LQ_N , $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$ o erro relativo para a primeira direção é inferior a 3.0% e nas demais direções é inferior a 1.0%, no entanto, com a quadratura QR o erro relativo é inferior a 0.8% em todas as direções.

Tabela 6.5: Fluxo escalar médio, caso teste 2 - região I, $\sigma_s = 0.3$

Quadratura simétrica de nível LQ_N												
D ^a	AHOT [7]			AHOT [7]			ADO		ADO		ADO	
	Constante			Linear			Constante		Linear		Exponencial	
	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4
1	0.4562	0.4677	0.4716	0.4768	0.4791	0.4727	0.4627	0.4697	0.5088	0.4806	0.4792	0.4736
3	0.4921	0.4979	0.5004	0.4993	0.5019	0.5007	0.4996	0.5001	0.5494	0.5110	0.5123	0.5031
6	0.4975	0.5029	0.5054	0.5044	0.5067	0.5057	0.5050	0.5051	0.5542	0.5150	0.5171	0.5078
10	0.5004	0.5059	0.5084	0.5072	0.5093	0.5086	0.5078	0.5082	0.5559	0.5172	0.5194	0.5108
21	0.5025	0.5080	0.5104	0.5092	0.5112	0.5106	0.5096	0.5103	0.5560	0.5186	0.5207	0.5128
Quadratura $P_N T_N S_N$												
D ^a	AHOT [7]			AHOT [7]			ADO		ADO		ADO	
	Constante			Linear			Constante		Linear		Exponencial	
	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4
1	0.4562	0.4677	0.4716	0.4767	0.4791	0.4727	0.4628	0.4697	0.5088	0.4806	0.4792	0.4736
3	0.4907	0.4968	0.4993	0.4984	0.5010	0.4997	0.4982	0.4990	0.5478	0.5100	0.5109	0.5020
6	0.4983	0.5038	0.5063	0.5053	0.5075	0.5066	0.5058	0.5061	0.5549	0.5158	0.5178	0.5087
10	0.5010	0.5065	0.5089	0.5076	0.5097	0.5091	0.5083	0.5088	0.5561	0.5177	0.5198	0.5113
21	0.5031	0.5086	0.5110	0.5099	0.5118	0.5112	0.5102	0.5109	0.5559	0.5192	0.5211	0.5134
36	0.5031	0.5086	0.5110	0.5099	0.5118	0.5112	0.5109	0.5118	0.5553	0.5199	0.5215	0.5142
Quadratura $P_N T_N$												
D ^a	AHOT [7]			AHOT [7]			ADO		ADO		ADO	
	Constante			Linear			Constante		Linear		Exponencial	
	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4
1	0.4562	0.4677	0.4716	0.4768	0.4790	0.4727	0.4628	0.4697	0.5088	0.4806	0.4792	0.4736
4	0.4943	0.4988	0.5010	0.4985	0.5005	0.5010	0.5016	0.5010	0.5512	0.5117	0.5143	0.5039
9	0.5013	0.5066	0.5092	0.5090	0.5108	0.5094	0.5084	0.5089	0.5555	0.5175	0.5198	0.5114
16	0.5035	0.5089	0.5112	0.5099	0.5117	0.5113	0.5103	0.5112	0.5557	0.5192	0.5213	0.5137
36	0.5049	0.5102	0.5125	0.5114	0.5132	0.5127	0.5115	0.5124	0.5552	0.5204	0.5219	0.5149
Quadratura QR												
D ^a	AHOT [7]			AHOT [7]			ADO		ADO		ADO	
	Constante			Linear			Constante		Linear		Exponencial	
	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4
2	0.4825	0.4857	0.4878	0.4856	0.4872	0.4877	0.4894	0.4878	0.5409	0.4978	0.5043	0.4910
8	0.5055	0.5108	0.5129	0.5114	0.5132	0.5130	0.5120	0.5130	0.5543	0.5210	0.5228	0.5155
18	0.5059	0.5111	0.5133	0.5122	0.5139	0.5135	0.5123	0.5132	0.5546	0.5216	0.5227	0.5157
32	0.5058	0.5110	0.5132	0.5122	0.5139	0.5134	0.5121	0.5131	0.5545	0.5213	0.5224	0.5155

^a Direções por octante

Tabela 6.6: Fluxo escalar médio, caso teste 2 - regiões II e III, $\sigma_s = 0.3$

Quadratura simétrica de nível LQ_N												
D ^a	AHOT [7]			AHOT [7]			ADO		ADO		ADO	
	Constante			Linear			Constante		Linear		Exponencial	
	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4
1	0.1687	0.1607	0.1579	0.1577	0.1553	0.1574	0.1685	0.1603	0.1428	0.1544	0.1640	0.1593
3	0.1717	0.1662	0.1640	0.1612	0.1612	0.1637	0.1716	0.1660	0.1419	0.1610	0.1667	0.1649
6	0.1708	0.1654	0.1637	0.1615	0.1614	0.1634	0.1708	0.1651	0.1415	0.1616	0.1659	0.1642
10	0.1701	0.1648	0.1635	0.1614	0.1613	0.1632	0.1700	0.1645	0.1418	0.1617	0.1654	0.1636
21	0.1694	0.1644	0.1633	0.1613	0.1613	0.1631	0.1694	0.1641	0.1427	0.1616	0.1651	0.1633
Quadratura $P_N T_N S_N$												
D ^a	AHOT [7]			AHOT [7]			ADO		ADO		ADO	
	Constante			Linear			Constante		Linear		Exponencial	
	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4
1	0.1689	0.1607	0.1579	0.1577	0.1553	0.1575	0.1685	0.1603	0.1428	0.1544	0.1640	0.1593
3	0.1717	0.1662	0.1639	0.1612	0.1611	0.1635	0.1716	0.1659	0.1420	0.1607	0.1668	0.1648
6	0.1706	0.1652	0.1635	0.1613	0.1612	0.1632	0.1705	0.1649	0.1414	0.1613	0.1658	0.1640
10	0.1698	0.1646	0.1633	0.1612	0.1612	0.1631	0.1698	0.1643	0.1418	0.1614	0.1652	0.1634
21	0.1692	0.1643	0.1631	0.1612	0.1612	0.1629	0.1691	0.1640	0.1429	0.1613	0.1649	0.1632
36	0.1692	0.1643	0.1631	0.1612	0.1612	0.1629	0.1689	0.1640	0.1436	0.1612	0.1649	0.1632
Quadratura $P_N T_N$												
D ^a	AHOT [7]			AHOT [7]			ADO		ADO		ADO	
	Constante			Linear			Constante		Linear		Exponencial	
	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4
1	0.1689	0.1607	0.1579	0.1577	0.1553	0.1575	0.1685	0.1603	0.1428	0.1544	0.1640	0.1593
4	0.1715	0.1668	0.1647	0.1624	0.1628	0.1645	0.1714	0.1665	0.1419	0.1620	0.1663	0.1654
9	0.1700	0.1648	0.1636	0.1620	0.1617	0.1633	0.1700	0.1645	0.1426	0.1622	0.1655	0.1636
16	0.1693	0.1645	0.1636	0.1615	0.1616	0.1633	0.1693	0.1642	0.1434	0.1618	0.1651	0.1634
36	0.1689	0.1644	0.1631	0.1613	0.1613	0.1629	0.1689	0.1641	0.1441	0.1613	0.1649	0.1633
Quadratura QR												
D ^a	AHOT [7]			AHOT [7]			ADO		ADO		ADO	
	Constante			Linear			Constante		Linear		Exponencial	
	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	50 × 50	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4	2 × 2	4 × 4
2	0.1734	0.1687	0.1671	0.1651	0.1655	0.1669	0.1736	0.1685	0.1433	0.1656	0.1674	0.1673
8	0.1699	0.1657	0.1645	0.1623	0.1624	0.1642	0.1699	0.1655	0.1459	0.1621	0.1658	0.1646
18	0.1688	0.1643	0.1632	0.1612	0.1612	0.1629	0.1687	0.1640	0.1445	0.1609	0.1648	0.1632
32	0.1688	0.1643	0.1631	0.1612	0.1612	0.1628	0.1687	0.1640	0.1445	0.1610	0.1649	0.1632

^a Direções por octante

Tabela 6.7: Fluxo escalar médio, caso teste 2 - região IV, $\sigma_s = 0.3$

Quadratura simétrica de nível LQ_N												
D ^a	AHOT [7]			AHOT [7]			ADO		ADO		ADO	
	Constante			Linear			Constante		Linear		Exponencial	
	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4
1	0.1299	0.1390	0.1417	0.1176	0.1332	0.1414	0.1312	0.1396	0.1773	0.1493	0.1462	0.1432
3	0.1003	0.1014	0.1010	0.0834	0.0937	0.1005	0.1004	0.1014	0.1358	0.1033	0.1081	0.1026
6	0.0918	0.0932	0.0922	0.0780	0.0869	0.0920	0.0916	0.0932	0.1221	0.0927	0.0979	0.0939
10	0.0882	0.0898	0.0887	0.0750	0.0835	0.0885	0.0879	0.0897	0.1159	0.0889	0.0936	0.0903
21	0.0856	0.0869	0.0863	0.0727	0.0808	0.0859	0.0853	0.0867	0.1116	0.0867	0.0906	0.0874
Quadratura $P_N T_N S_N$												
D ^a	AHOT [7]			AHOT [7]			ADO		ADO		ADO	
	Constante			Linear			Constante		Linear		Exponencial	
	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4
1	0.1299	0.1390	0.1417	0.1176	0.1332	0.1414	0.1312	0.1396	0.1773	0.1493	0.1462	0.1432
3	0.1022	0.1035	0.1034	0.0851	0.0957	0.1028	0.1024	0.1036	0.1387	0.1061	0.1103	0.1049
6	0.0920	0.0935	0.0926	0.0781	0.0871	0.0924	0.0918	0.0934	0.1225	0.0933	0.0981	0.0942
10	0.0880	0.0894	0.0885	0.0746	0.0830	0.0882	0.0877	0.0893	0.1157	0.0890	0.0933	0.0899
21	0.0852	0.0864	0.0859	0.0723	0.0803	0.0855	0.0848	0.0862	0.1111	0.0865	0.0901	0.0869
36	0.0852	0.0864	0.0859	0.0723	0.0803	0.0855	0.0839	0.0853	0.1098	0.0859	0.0891	0.0860
Quadratura $P_N T_N$												
D ^a	AHOT [7]			AHOT [7]			ADO		ADO		ADO	
	Constante			Linear			Constante		Linear		Exponencial	
	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4
1	0.1299	0.1390	0.1417	0.1176	0.1332	0.1414	0.1311	0.1396	0.1773	0.1493	0.1462	0.1432
4	0.0913	0.0906	0.0895	0.0740	0.0823	0.0889	0.0910	0.0905	0.1229	0.0903	0.0978	0.0912
9	0.0859	0.0876	0.0865	0.0746	0.0826	0.0864	0.0855	0.0875	0.1121	0.0859	0.0910	0.0880
16	0.0845	0.0856	0.0848	0.0710	0.0790	0.0845	0.0841	0.0855	0.1096	0.0854	0.0893	0.0861
36	0.0836	0.0847	0.0844	0.0705	0.0784	0.0840	0.0833	0.0846	0.1088	0.0855	0.0884	0.0853
Quadratura QR												
D ^a	AHOT [7]			AHOT [7]			ADO		ADO		ADO	
	Constante			Linear			Constante		Linear		Exponencial	
	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	50×50	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4
2	0.0840	0.0827	0.0804	0.0684	0.0754	0.0802	0.0834	0.0825	0.1102	0.0785	0.0898	0.0827
8	0.0830	0.0838	0.0837	0.0691	0.0769	0.0832	0.0828	0.0836	0.1084	0.0858	0.0883	0.0845
18	0.0828	0.0842	0.0833	0.0695	0.0774	0.0830	0.0826	0.0841	0.1086	0.0850	0.0880	0.0849
32	0.0890	0.0843	0.0837	0.0698	0.0777	0.0833	0.0828	0.0841	0.1087	0.0851	0.0881	0.0849

^a Direções por octante

Nas Figuras 6.6, 6.7 e 6.8, encontra-se a representação gráfica dos resultados numéricos obtidos para $\sigma_s = 0.3 \text{ cm}^{-1}$ em todas as quadraturas. Gráficamente pode-se analisar melhor o desempenho do método ADO e verificar que o comportamento das aproximações ADO-C, ADO-L e ADO-E, seguem mesmo comportamento das aproximações AHOT-C e AHOT-L.

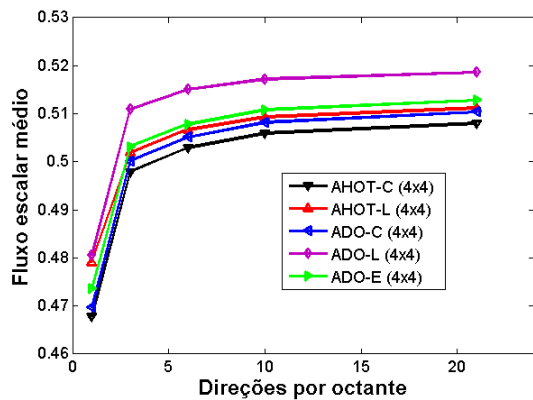
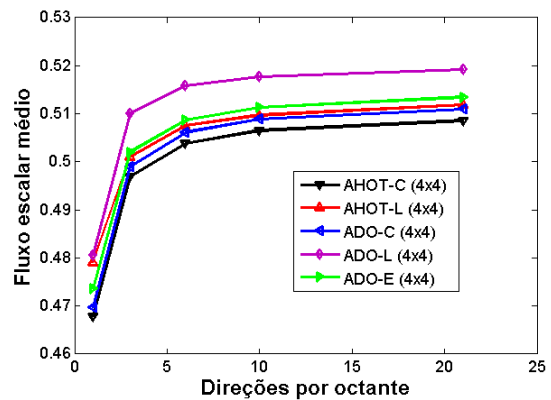
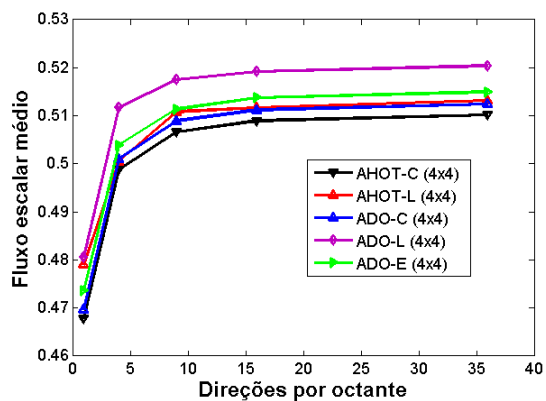
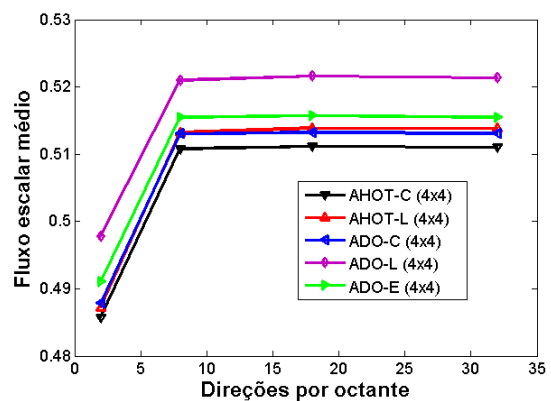
(a) Quadratura LQ_N (b) Quadratura $P_N T_N S_N$ (c) Quadratura $P_N T_N$ (d) Quadratura QR

Figura 6.6: Representação do fluxo escalar médio para a região I, $\sigma_s = 0.3$

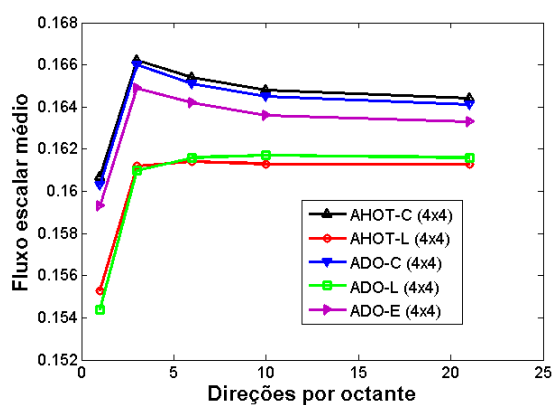
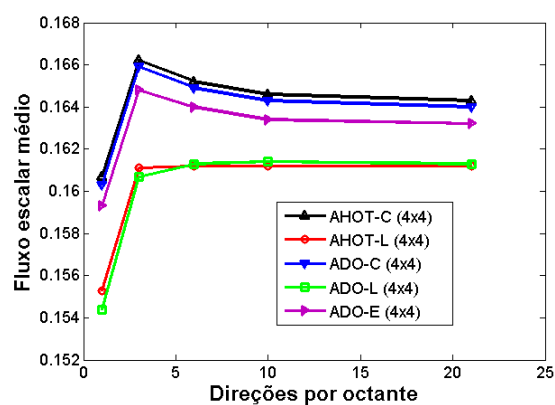
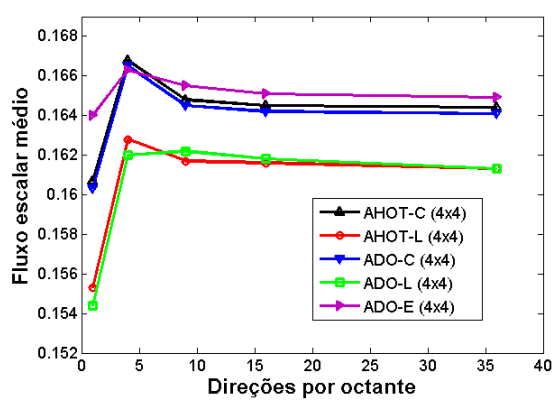
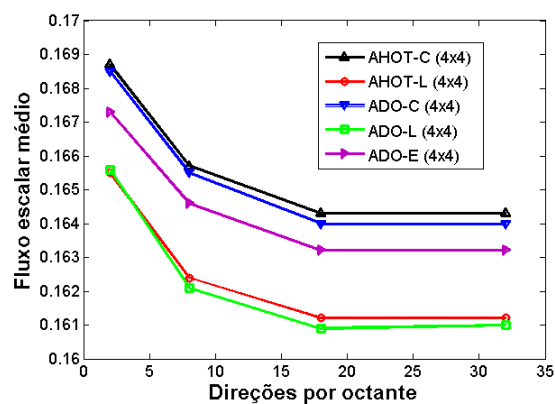
(a) Quadratura LQ_N (b) Quadratura $P_N T_N S_N$ (c) Quadratura $P_N T_N$ (d) Quadratura QR

Figura 6.7: Representação do fluxo escalar médio para a regiões II e III, $\sigma_s = 0.3$

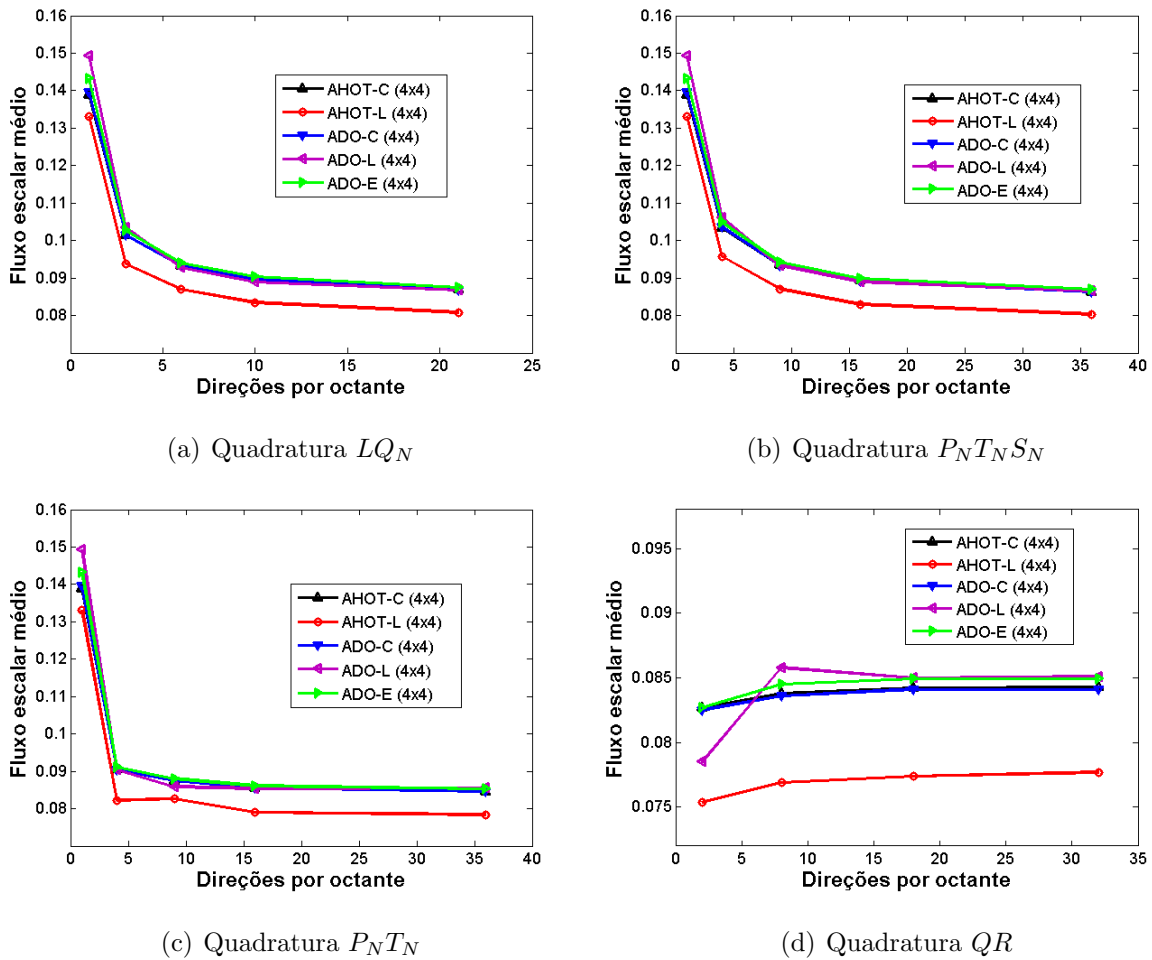


Figura 6.8: Representação do fluxo escalar médio para a região IV, $\sigma_s = 0.3$

De forma geral, as três aproximações, ADO-C, ADO-L e ADO-E, produziram resultados satisfatórios e comportamento análogo às aproximações AHOT-C e AHOT-L, para os dois casos testes. Com $\sigma_s = 0.3 \text{ cm}^{-1}$, obteve-se para as aproximações ADO-L e ADO-E, resultados com porcentagens de erro relativos menores do que as obtidas com $\sigma_s = 0.9 \text{ cm}^{-1}$, bem como, comparações melhores para cada uma das aproximações.

Analisou-se também, que utilizando malhas menos refinadas (4×4), conseguiu-se com o método ADO resultados que o código AHOT obtém com malhas bem mais refinadas (50×50). Além disso, observou-se que com mais divisões no domínio, os fluxos escalares médios obtidos através do método ADO, possibilitam uma melhor comparação entre as diferentes aproximações, principalmente ADO-L e ADO-E.

Diferentemente do problema apresentado no apêndice, verificou-se que, comparações entre grandezas iguais representam análises mais significativas e proporcionam uma redução

do erro relativo entre os resultados. Espera-se que comparações ainda mais similares podem ser obtidas a partir da geração de resultados para malhas mais refinadas.

6.2 Meio Heterogêneo: Fluxo Escalar Médio

Nesta seção verifica-se o comportamento dos fluxos escalares médios obtidos pelas aproximações constantes, lineares e exponenciais utilizando o método ADO, em problemas heterogêneos.

6.2.1 Caso teste 3

Como terceiro caso teste, considera-se um meio heterogêneo com espalhamento isotrópico conforme proposto por Azmy [9], o domínio é definido no intervalo $a = b = 10.0 \text{ cm}$, com presença de fonte fixa isotrópica $Q(x, y) = 1.0$ na região $[0, 5.0] \times [0, 5.0]$ conforme representação na Figura 6.9. Na região I a seção de choque macroscópica total é $\sigma_t = 1.0 \text{ cm}^{-1}$ e a seção de choque de espalhamento é $\sigma_s = 0.5 \text{ cm}^{-1}$, nas demais regiões $\sigma_t = 2.0 \text{ cm}^{-1}$ e meios mais absorvedores $\sigma_s = 0.1 \text{ cm}^{-1}$.

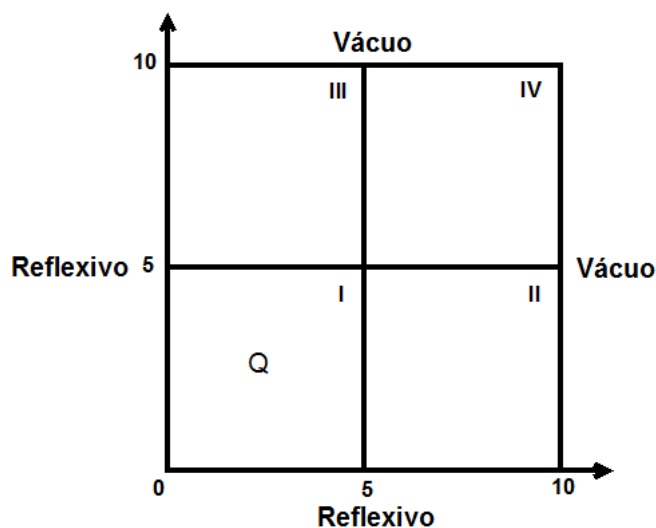


Figura 6.9: Configuração do domínio do problema, caso teste 3.

A quantidade de interesse a ser analisada é o fluxo escalar médio determinado pelas equações 6.1 - 6.2. Utilizou-se para aproximar os fluxos desconhecidos nos contornos as três aproximações estudadas nesse trabalho, constantes, lineares e exponenciais, bem como, as quatro diferentes quadraturas, LQ_N , $P_N T_N S_N$, $P_N T_N$ e QR . Cabe lembrar que, no trabalho de Picoloto [84] esse mesmo problema teste foi resolvido utilizando a

aproximação por constantes em conjunto com a quadratura LQ_N , e nesse trabalho essa aproximação foi reproduzida com essa quadratura e os resultados encontrados conferem em todas as casas decimais.

A fim de analisar o comportamento dos resultados encontrados para esse caso teste, buscou-se comparações com dois métodos, código AHOT [7] aplicado à aproximações constantes e lineares, respectivamente AHOT-C e AHOT-L, e método SGF [49] aplicado à aproximações constantes e exponenciais, respectivamente, SGF-CN e SGF-ExpN.

Nas Tabelas 6.8 - 6.10 encontram-se os resultados numéricos para os três métodos ADO, AHOT e SGF. A análise é feita por região, na qual observa-se o comportamento de cada método separadamente e em seguida faz-se uma comparação entre eles.

Com as aproximações AHOT-C e AHOT-L obteve-se as seguintes conclusões:

- Como primeira análise, fixa-se o número de direções da quadratura e faz-se uma comparação entre os fluxos escalares médios das diferentes malhas, em cada aproximação. Na região I, verificou-se dois dígitos de concordância entre os fluxos escalares médios para ambas as aproximações, AHOT-C e AHOT-L. Nas regiões II e III, consegue-se um dígito e, na região IV no máximo um dígito.
- Na segunda análise, fixa-se a malha e faz-se uma comparação entre os resultados para os diferentes valores da ordem de quadratura. Observou-se para ambas as aproximações, uma convergência de três a quatro dígitos significativos para a região I e, para as regiões II, III e IV essa convergência decaiu, conseguindo no máximo até dois dígitos significativos.
- Como terceira análise, faz-se uma comparação entre as duas aproximações, AHOT-C e AHOT-L, na qual considerou-se malhas e direções iguais. Verificou-se para a região I, até quatro dígitos de concordância entre os fluxos escalares médios, no entanto, para as demais regiões, essa concordância decaiu, conseguindo no máximo até dois dígitos significativos.

As comparações entre as aproximações do método SGF, resultaram nas seguintes análises.

- Quando faz-se a comparação dos fluxos escalares médios entre as diferentes malhas em cada aproximação, verificou-se tanto para aproximação SGF-CN

quanto para SGF-ExpN, uma concordância de quatro dígitos na região I. No entanto, obteve-se uma redução dessa concordância para as demais regiões, sendo que, nas regiões II e III consegue-se com SGF-CN até dois dígitos e com SGF-ExpN até três dígitos de concordância e, na região IV, consegue-se até um dígito com ambas as aproximações.

- Na comparação entre as aproximações SGF-CN e SGF-ExpN considerando malhas iguais, observa-se para a região I, quatro dígitos significativos entre os fluxos escalares médios. Nas regiões II e III, verificou-se com a malha 10×10 até dois dígitos de concordância e com as demais malhas a concordância está em três dígitos. Por último, na região IV, obteve-se um dígito de concordância com a malha 10×10 e com as demais malhas não consegue-se concordância entre os resultados.

Seguindo essa mesma linha de comparações para o método ADO, obteve-se as seguintes conclusões.

- Na primeira análise em que compara-se os fluxos escalares médios entre as malhas 2×2 e 4×4 para cada uma das aproximações, observou-se que, para a região I, a concordância está em dois a três dígitos. Nas regiões II e III, obteve-se com a aproximação ADO-C até três dígitos significativos e com as aproximações ADO-L e ADO-E um dígito significativo. No entanto, na região IV, observa-se que somente com a aproximação ADO-C é possível obter um dígito significativo, com as demais aproximações não consegue-se dígitos de concordância. As conclusões dessas análises são verificadas para as quatro quadraturas.
- Na segunda análise, onde fixa-se a malha para cada uma das aproximações e faz uma comparação entre os fluxos obtidos com as diferentes ordens de quadratura, verifica-se na região I, uma convergência de três a quatro dígitos significativos para ambas as aproximações, essa análise é observada nas quatro quadraturas, sendo que com a quadratura QR a convergência de 4 dígitos é alcançada mais rapidamente. Nas regiões II e III, observa-se para as aproximações ADO-C e ADO-L uma convergência de até dois dígitos nos fluxos escalares médios com as quadraturas LQ_N , $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$ e com a qua-

dratura QR , uma convergência de até quatro dígitos. No entanto com a aproximação ADO-E, obtém-se com as quatro quadraturas uma convergência de até dois dígitos. Na região IV, observa-se das aproximações ADO-C e ADO-L, uma convergência de até dois dígitos nos fluxos escalares médios com as quadraturas LQ_N , $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$, com a quadratura QR essa convergência aumenta para quatro dígitos. Por outro lado, com a aproximação ADO-E, consegue-se uma convergência de até dois dígitos com as quatro quadraturas.

- Como última análise, em que compara-se as três aproximações levando em consideração as quatro quadraturas, observou-se para a região I, um a dois dígitos significativos entre os fluxos escalares médios com a malha 2×2 e com a malha 4×4 dois a três dígitos. Por outro lado, considerando agora as regiões II e III, verificou-se até um dígito significativo entre as aproximações ADO-C e ADO-L malha 4×4 nas quadraturas LQ_N , $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$ e, entre as aproximações ADO-L e ADO-E, até um dígito significativo com as duas malhas e com as quatro quadraturas e, entre ADO-C e ADO-E não obteve-se dígitos significativos. Na região IV, quando compara-se a aproximação ADO-C com a aproximação ADO-L malha 4×4 , consegue-se no máximo um dígito significativo, com as quatro quadraturas. No entanto, com a aproximação ADO-E não obteve-se dígitos de concordância com as demais aproximações, sendo que, somente com a malha 4×4 pode-se obter a mesma ordem de magnitude das demais aproximações.

A seguir, apresenta-se as análises obtidas da comparação entre os três métodos.

- Quando compara-se a aproximação AHOT-C com ambas as aproximações do método SGF, verifica-se para a região I até três dígitos de concordância entre os fluxos escalares médios com a malha 40×40 e com a malha 10×10 até dois dígitos. Nas regiões II e III, quando compara-se as aproximações AHOT-C e SGF-CN, verifica-se até três dígitos com a malha 10×10 e dois dígitos significativos com a malha 40×40 e, entre AHOT-C e SGF-ExpN, verificou-se somente dois dígitos de concordância com a malha 40×40 . Na região IV, observa-se entre AHOT-C e SGF-CN malha 10×10 um dígito

de concordância e com a malha 40×40 até três dígitos, no entanto, entre AHOT-C e SGF-ExpN, conseguiu-se dígitos significativos, somente com as malhas 40×40 e 10×10 respectivamente.

- Na comparação da aproximação AHOT-L com ambas as aproximações do método SGF, verificou-se para a região I, dois dígitos de concordância com as malhas 10×10 e três dígitos com a malha 40×40 . No entanto, nas regiões II e III observa-se que essa concordância entre os resultados decai em um dígito, sendo que, com a malha 40×40 obteve-se dois dígitos significativos e com a malha 10×10 um dígito. Na região IV, observa-se até dois dígitos significativos entre AHOT-L e SGF-CN malha 40×40 e, até dois dígitos entre AHOT-L malha 40×40 e SGF-ExpN malha 10×10 .
- Seguindo essa linha de comparações, quando compara-se a aproximação ADO-C malha 4×4 com as aproximações dos métodos AHOT e SGF, verificou-se para a região I, até três dígitos significativos com a malha 40×40 do AHOT e malha 10×10 do SGF. Nas regiões II e III, observou-se até dois dígitos de concordância com as malhas 40×40 dos métodos AHOT e SGF. Por último, quando compara-se os resultados obtidos para a região IV, observa-se até dois dígitos de concordância com a aproximação AHOT-C malha 10×10 e com as aproximações do método SGF no máximo um dígito de concordância.
- Com a aproximação ADO-L malha 4×4 , observou-se na região I até três dígitos de concordância com as aproximações AHOT-C e AHOT-L malha 40×40 e dois dígitos com as aproximações SGF-CN e SGF-ExpN qualquer malha. Nas regiões II e III conseguiu-se até um dígito de concordância com as aproximações dos métodos SGF e AHOT em qualquer malha. No entanto, na região IV verificou-se um dígito de concordância com as aproximações AHOT-C e AHOT-L malhas 2×2 e 4×4 e, um dígito com as aproximações SGF-CN e SGF-ExpN malha 10×10 .
- Como última análise, agora considerando a aproximação ADO-E, verificou-se para a região I dois dígitos de concordância com as aproximações dos métodos AHOT e SGF, qualquer malha, no entanto, nas demais regiões,

não conseguiu-se dígitos significativos entre as diferentes aproximações desses dois métodos. No entanto, observou-se que com malhas mais refinadas, os resultados alcançados com a aproximação ADO-E são mais comparáveis com os demais métodos.

Tabela 6.8: Fluxo escalar médio, caso teste 3 - região I

Código AHOT - Quadratura LQ_N [7]								
D ^a	AHOT-C				AHOT-L			
	2×2	4×4	10×10	40×40	2×2	4×4	10×10	40×40
1	1.608	1.622	1.642	1.652	1.608	1.620	1.639	1.651
3	1.638	1.649	1.665	1.675	1.638	1.648	1.663	1.673
6	1.643	1.654	1.670	1.679	1.643	1.653	1.668	1.677
10	1.646	1.657	1.672	1.681	1.646	1.656	1.670	1.679
21	1.648	1.659	1.673	1.682	1.648	1.658	1.672	1.681
36	1.649	1.659	1.674	1.683	1.649	1.659	1.672	1.681
Método SGF - Quadratura LQ_N [49]								
D	Método SGF-CN			Método SGF-ExpN				
	10×10	20×20	40×40	10×10	20×20	40×40		
3	1.676	1.676	1.676	1.676	1.676	1.676		
Método ADO-Quadratura LQ_N								
D	ADO-C		ADO-L		ADO-E			
	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4		
1	1.656	1.655	1.678	1.660	1.724	1.677		
3	1.679	1.678	1.696	1.682	1.726	1.693		
6	1.682	1.682	1.699	1.686	1.727	1.696		
10	1.684	1.683	1.701	1.687	1.727	1.697		
21	1.685	1.685	1.702	1.688	1.728	1.698		
36	1.686	1.685	1.702	1.689	1.728	1.698		
Método ADO-Quadratura $P_N T_N S_N$								
D	ADO-C		ADO-L		ADO-E			
	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4		
1	1.656	1.655	1.678	1.660	1.724	1.677		
3	1.677	1.677	1.696	1.681	1.725	1.692		
6	1.682	1.682	1.699	1.686	1.727	1.696		
10	1.684	1.683	1.701	1.687	1.727	1.697		
21	1.686	1.685	1.702	1.689	1.728	1.698		
36	1.686	1.685	1.702	1.689	1.728	1.699		
Método ADO-Quadratura $P_N T_N$								
D	ADO-C		ADO-L		ADO-E			
	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4		
1	1.656	1.655	1.678	1.660	1.724	1.677		
4	1.681	1.680	1.699	1.685	1.727	1.695		
9	1.685	1.684	1.701	1.688	1.728	1.698		
16	1.686	1.685	1.702	1.689	1.728	1.698		
36	1.686	1.686	1.703	1.690	1.728	1.699		
64	1.687		1.703		1.728			
Método ADO-Quadratura QR								
D	ADO-C		ADO-L		ADO-E			
	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4		
2	1.689	1.688	1.704	1.692	1.734	1.703		
8	1.687	1.686	1.703	1.690	1.729	1.700		
18	1.687	1.686	1.703	1.690	1.729	1.699		
32	1.687	1.686	1.703	1.690	1.728	1.699		
50	1.687		1.703		1.728			
72	1.687		1.703		1.728			

^a Direções por octante

Tabela 6.9: Fluxo escalar médio, caso teste 3 - regiões II e III

Código AHOT - Quadratura LQ_N [7]								
D ^a	AHOT-C				AHOT-L			
	2×2	4×4	10×10	40×40	2×2	4×4	10×10	40×40
1	4.995-2 ^b	4.824-2	4.564-2	4.437-2	4.975-2	4.835-2	4.593-2	4.446-2
3	4.645-2	4.506-2	4.297-2	4.173-2	4.631-2	4.513-2	4.328-2	4.196-2
6	4.579-2	4.443-2	4.247-2	4.128-2	4.565-2	4.449-2	4.270-2	4.148-2
10	4.547-2	4.412-2	4.221-2	4.106-2	4.533-2	4.418-2	4.243-2	4.126-2
21	4.521-2	4.388-2	4.201-2	4.090-2	4.508-2	4.394-2	4.222-2	4.109-2
36	4.510-2	4.378-2	4.192-2	4.084-2	4.497-2	4.384-2	4.212-2	4.101-2
Método SGF - Quadratura LQ_N [49]								
D	Método SGF-CN			Método SGF-ExpN				
	10×10	20×20	40×40	10×10	20×20	40×40		
3	4.290-2	4.165-2	4.163-2	4.169-2	4.161-2	4.161-2		
Método ADO-Quadratura LQ_N								
D	ADO-C		ADO-L		ADO-E			
	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4		
1	4.390-2	4.397-2	3.975-2	4.293-2	2.797-2	3.622-2		
3	4.129-2	4.134-2	3.806-2	4.051-2	3.067-2	3.660-2		
6	4.085-2	4.090-2	3.778-2	4.011-2	3.100-2	3.658-2		
10	4.064-2	4.069-2	3.764-2	3.993-2	3.113-2	3.656-2		
21	4.049-2	4.054-2	3.753-2	3.979-2	3.122-2	3.654-2		
36	4.043-2	4.048-2	3.749-2	3.973-2	3.126-2	3.654-2		
Método ADO-Quadratura $P_N T_N S_N$								
D	ADO-C		ADO-L		ADO-E			
	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4		
1	4.390-2	4.397-2	3.975-2	4.293-2	2.797-2	3.622-2		
3	4.140-2	4.146-2	3.813-2	4.062-2	3.062-2	3.664-2		
6	4.084-2	4.090-2	3.777-2	4.011-2	3.103-2	3.660-2		
10	4.063-2	4.068-2	3.762-2	3.990-2	3.117-2	3.658-2		
21	4.046-2	4.050-2	3.751-2	3.975-2	3.126-2	3.656-2		
36	4.039-2	4.044-2	3.746-2	3.970-2	3.129-2	3.654-2		
Método ADO-Quadratura $P_N T_N$								
D	ADO-C		ADO-L		ADO-E			
	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4		
1	4.390-2	4.397-2	3.975-2	4.293-2	2.797-2	3.622-2		
4	4.097-2	4.102-2	3.784-2	4.022-2	3.069-2	3.643-2		
9	4.056-2	4.061-2	3.756-2	3.984-2	3.107-2	3.647-2		
16	4.044-2	4.048-2	3.748-2	3.973-2	3.119-2	3.649-2		
36	4.036-2	4.040-2	3.743-2	3.966-2	3.127-2	3.650-2		
64	4.033-2		3.742-2					
Método ADO-Quadratura QR								
D	ADO-C		ADO-L		ADO-E			
	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4		
2	4.017-2	4.023-2	3.742-2	3.952-2	3.014-2	3.564-2		
8	4.029-2	4.034-2	3.739-2	3.960-2	3.101-2	3.629-2		
18	4.030-2	4.035-2	3.740-2	3.961-2	3.120-2	3.642-2		
32	4.030-2	4.035-2	3.740-2	3.961-2	3.126-2	3.646-2		
50	4.030-2		3.740-2		3.129-2			
72	4.030-2		3.740-2		3.130-2			

^a Direções por octante^b Lê-se 4.995×10^{-2}

Tabela 6.10: Fluxo escalar médio, caso teste 3 - região IV

Código AHOT - Quadratura LQ_N [7]								
D ^a	AHOT-C				AHOT-L			
	2×2	4×4	10×10	40×40	2×2	4×4	10×10	40×40
1	3.111-3 ^b	3.097-3	2.833-3	2.728-3	3.094-3	3.150-3	3.023-3	2.881-3
3	2.311-3	2.309-3	2.115-3	2.003-3	2.301-3	2.336-3	2.197-3	2.071-3
6	2.184-3	2.185-3	2.008-3	1.903-3	2.173-3	2.212-3	2.096-3	1.973-3
10	2.126-3	2.129-3	1.959-3	1.859-3	2.115-3	2.155-3	2.043-3	1.924-3
21	2.082-3	2.086-3	1.922-3	1.826-3	2.071-3	2.112-3	2.004-3	1.888-3
36	2.063-3	2.068-3	1.906-3	1.813-3	2.053-3	2.094-3	1.988-3	1.874-3
Método SGF - Quadratura LQ_N [49]								
D	Método SGF-CN			Método SGF-ExpN				
	10×10	20×20	40×40	10×10	20×20	40×40		
3	2.850-3	2.019-3	2.000-3	2.000-3	1.995-3	1.993-3		
Método ADO-Quadratura LQ_N								
D	ADO-C		ADO-L		ADO-E			
	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4		
1	2.746-3	2.864-3	5.140-3	3.590-3	2.229-2	1.288-2		
3	2.031-3	2.117-3	3.795-3	2.657-3	1.248-2	7.685-3		
6	1.926-3	2.009-3	3.594-3	2.517-3	1.134-2	6.976-3		
10	1.879-3	1.960-3	3.504-3	2.454-3	1.086-2	6.672-3		
21	1.844-3	1.924-3	3.437-3	2.408-3	1.050-2	6.441-3		
36	1.830-3	1.909-3	3.410-3	2.388-3	1.036-2	6.344-3		
Método ADO-Quadratura $P_N T_N S_N$								
D	ADO-C		ADO-L		ADO-E			
	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4		
1	2.746-3	2.864-3	5.139-3	3.590-3	2.229-2	1.288-2		
3	2.073-3	2.162-3	3.794-3	2.713-3	1.275-2	7.832-3		
6	1.930-3	2.013-3	3.593-3	2.521-3	1.128-2	6.931-3		
10	1.876-3	1.957-3	3.504-3	2.450-3	1.076-2	6.602-3		
21	1.836-3	1.915-3	3.437-3	2.396-3	1.038-2	6.356-3		
36	1.821-3	1.900-3	3.409-3	2.376-3	1.024-2	6.265-3		
Método ADO-Quadratura $P_N T_N$								
D	ADO-C		ADO-L		ADO-E			
	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4		
1	2.746-3	2.864-3	5.140-3	3.590-3	2.229-2	1.288-2		
4	1.973-3	2.058-3	3.681-3	2.580-3	1.204-2	7.429-3		
9	1.872-3	1.954-3	3.490-3	2.445-3	1.088-2	6.693-3		
16	1.840-3	1.920-3	3.428-3	2.401-3	1.051-2	6.448-3		
36	1.817-3	1.897-3	3.385-3	2.371-3	1.025-2	6.276-3		
64	1.810-3		3.371-3		1.016-2			
Método ADO-Quadratura QR								
D	ADO-C		ADO-L		ADO-E			
	2×2	4×4	2×2	4×4	2×2	4×4		
2	1.609-3	1.665-3	3.021-3	2.100-3	1.110-2	6.956-3		
8	1.800-3	1.879-3	3.352-3	2.348-3	1.065-2	6.517-3		
18	1.800-3	1.879-3	3.352-3	2.348-3	1.035-2	6.329-3		
32	1.800-3	1.879-3	3.352-3	2.348-3	1.023-2	6.255-3		
50	1.800-3		3.352-3		1.017-2			
72	1.800-3		3.352-3		1.014-2			

^a Direções por octante^b Lê-se 3.111×10^{-3}

A representação gráfica dos fluxos escalares médios das aproximações dos métodos ADO e AHOT, malha 4×4 e quadratura LQ_N para a região I, encontra-se na Figura 6.10, nela pode-se observar que ambas as aproximações do método ADO comportam-se de forma semelhante às aproximações do método AHOT.

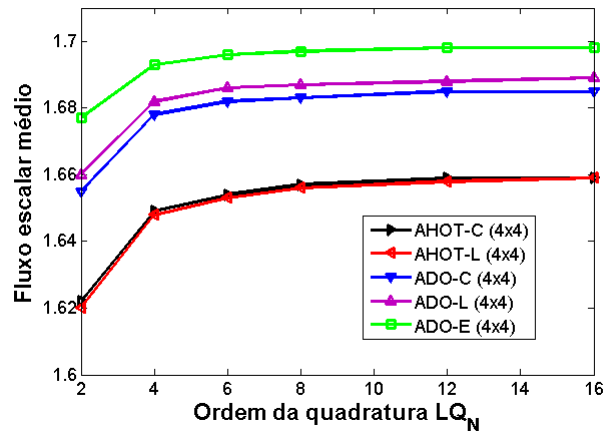


Figura 6.10: Representação do fluxo escalar médio da região I, quadratura LQ_N .

Já na Figura 6.11, estão representados os fluxos escalares médios obtidos com os métodos ADO e AHOT malha 4×4 para as regiões II e III. Com base na análise dessa Figura, pode-se verificar graficamente que as aproximações utilizadas pelo método ADO estão se comportando de forma análoga às aproximações utilizadas pelo método AHOT.

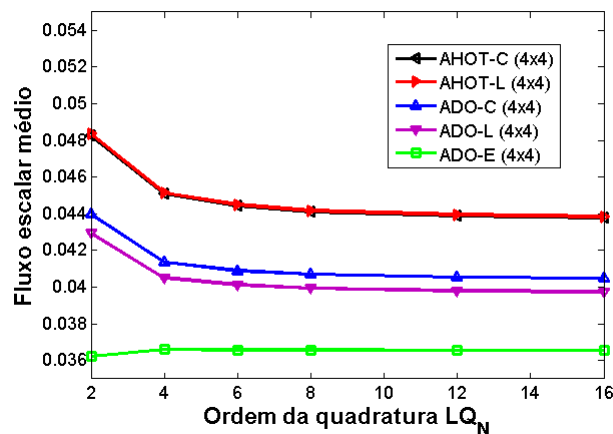


Figura 6.11: Representação do fluxo escalar médio das regiões II e III, quadratura LQ_N .

Por último, os fluxos escalares médios obtidos com os métodos ADO e AHOT malha 4×4 para a região IV, estão representados na Figura 6.12. Com base na análise dessa figura, pode-se observar graficamente que as aproximações do método ADO seguem mesmo comportamento das aproximações utilizadas pelo código AHOT, observa-se também que os resultados obtidos pelas aproximações ADO-C e ADO-L estão próximos aos resultados obtidos pelas aproximações do código AHOT.

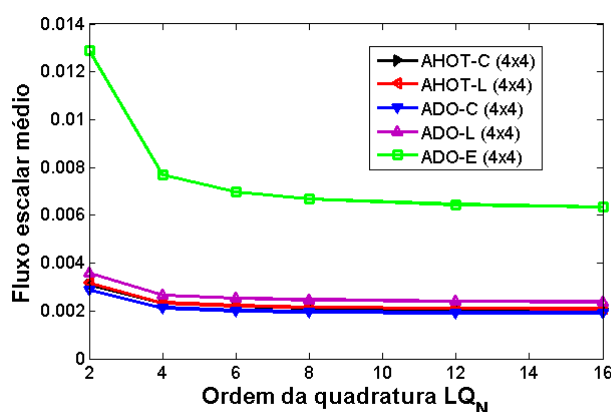


Figura 6.12: Representação do fluxo escalar médio da região IV, quadratura LQ_N .

Das análises obtidas para esse caso teste, verificou-se que as aproximações utilizadas nesse trabalho, ADO-C, ADO-L e ADO-E, seguiram mesmo comportamento das aproximações utilizadas pelos métodos AHOT e SGF em todas as regiões. Observou-se também que, com malhas menos refinadas conseguiu-se resultados que os demais métodos só conseguem com maior refinamento. Além disso, verificou-se que com malhas mais refinadas foi possível obter melhores comparações entre as três aproximações do ADO bem como entre os diferentes métodos, principalmente para as aproximações ADO-L e ADO-E.

Apesar das quadraturas $P_N T_N S_N$, $P_N T_N$ e QR possibilitarem uso de maiores valores para N , verificou-se mesmas quantidades de dígitos significativos que já se obtinham com a quadratura LQ_N , ou seja, não obteve-se ganho significativos em dígitos utilizando outras quadraturas.

Diferentemente das análises obtidas com o problema homogêneo, observou-se para problemas heterogêneos com domínio maiores, que a aproximação ADO-E não foi possível obter resultados para as regiões II, III e IV, comparáveis com as aproximações ADO-C e ADO-L, bem como com as aproximações dos métodos AHOT e SGF. Espera-se que

com malhas mais refinadas do que as utilizadas por esse trabalho, essas diferenças de resultados serão contornadas. No entanto, assim como foi observado nesse trabalho, bem como em outras análises [83], o comportamento das diferentes aproximações na região da fonte é melhor em geral para todos os métodos, ou seja, na região da fonte verifica-se uma coincidência de dígitos maiores do que das demais regiões que não têm fonte, essas consequências são influenciadas pelo efeito raio [106], que nesse trabalho não foi objeto de estudo.

6.2.2 Caso teste 4

No caso teste 4 o intuito de investigar o comportamento das três aproximações apresentadas nesse trabalho, em domínios maiores do que no caso teste anterior, bem como representação da fonte em uma região menor do domínio. Considera-se como caso teste 4 um problema heterogêneo com espalhamento isotrópico definido no domínio $a = b = 30.0 \text{ cm}$, com presença de fonte fixa isotrópica $Q(x, y) = 1.0$ na região $[0, 10.0] \times [0, 10.0]$, conforme representação na Figura 6.13. Os materiais são os mesmos utilizados no caso teste anterior, ou seja, na região I a seção de choque macroscópica total é $\sigma_t = 1.0 \text{ cm}^{-1}$ e a seção de choque de espalhamento é $\sigma_s = 0.5 \text{ cm}^{-1}$, nas demais regiões $\sigma_t = 2.0 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0.1 \text{ cm}^{-1}$.

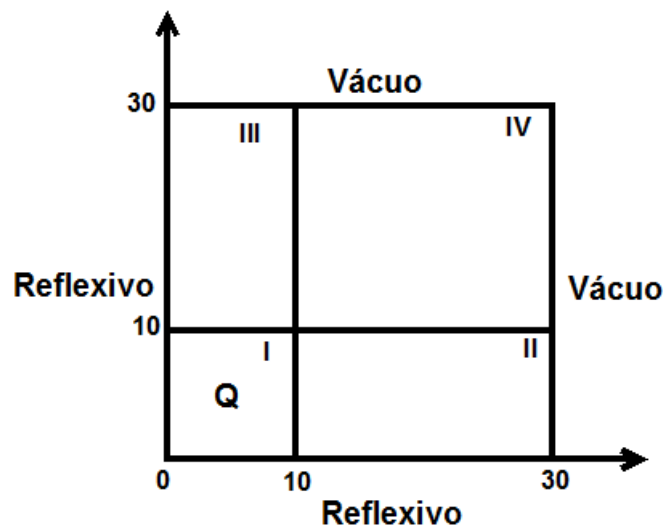


Figura 6.13: Configuração do domínio do problema, caso teste 4.

A quantidade de interesse a ser analisada é o fluxo escalar médio, definido através das equações 6.1 e 6.2. Assim como na seção anterior, utilizou-se aqui três aproximações

para os fluxos desconhecidos nos contornos, aproximação constante, aproximação linear e aproximação exponencial.

Na tabela 6.11 são apresentados os fluxos escalares médios obtidos com a quadratura LQ_N . A comparação dos resultados segue o padrão das análises anteriores.

Com as aproximações AHOT-C e AHOT-L, obteve-se as seguintes análises:

- Conclusões análogas ao caso teste anterior foram obtidas na primeira análise, em que fixa-se a ordem de quadratura e faz-se a comparação entre os resultados obtidos em cada malha e em cada aproximação.
- Na segunda análise, faz-se uma comparação entre os fluxos escalares médios de acordo com a malha fixada em cada aproximação. Observou-se uma convergência de até três dígitos na região I, nas demais regiões a convergência está em até dois dígitos, assim como no caso teste anterior, essas análises são verificadas para ambas as aproximações.
- Quando compara-se as aproximações AHOT-C e AHOT-L, considerando malhas iguais, verifica-se até quatro dígitos de concordância entre os fluxos escalares médios para a região I, mesma precisão obtida pelo caso teste anterior. Nas regiões II e III, observou-se para a malha 3×3 , 4 dígitos de concordância, e para as demais malhas até três dígitos. Na região IV a concordância está em até três dígitos significativos.

Com as aproximações ADO-C, ADO-L e ADO-E obteve-se as seguintes análises:

- Diferentemente do que se obteve com o caso teste 1, na análise em que fixa-se a ordem de quadratura e faz-se uma comparação entre as diferentes malhas, obteve-se com a aproximação ADO-C até quatro dígitos de concordância entre os resultados na região I, nas regiões II e III, verificou-se até três dígitos de concordância e na região IV dois dígitos. Com a aproximação ADO-L observou-se dois dígitos nas regiões I, II e III, e na região IV não obteve-se concordância. No entanto com a aproximação ADO-E, só foi possível obter dígitos de concordância entre os fluxos escalares médios na região I.
- Fixada a malha em cada aproximação, observa-se para a região I três a quatro dígitos de convergência de acordo com o aumento da ordem de quadratura

nas três aproximações. Nas regiões II e III, com as aproximações ADO-C e ADO-L verifica-se até três dígitos de convergência e com a aproximação ADO-E dois dígitos. Por último, na Região IV verificou-se dois dígitos de convergência com as aproximações ADO-C e ADO-L e, com a aproximação ADO-E até um dígito.

- Observou-se na comparação entre as três aproximações, diferentes análises das obtidas ao caso teste 1. Na região I, obteve-se até três dígitos significativos entre as aproximações ADO-C, ADO-L e ADO-E. Nas demais regiões, conseguiu-se somente concordância entre as aproximações ADO-C e ADO-L, sendo até dois dígitos nas regiões II e III e um dígito na região IV.

Como última análise, faz-se uma comparação entre os métodos ADO e AHOT.

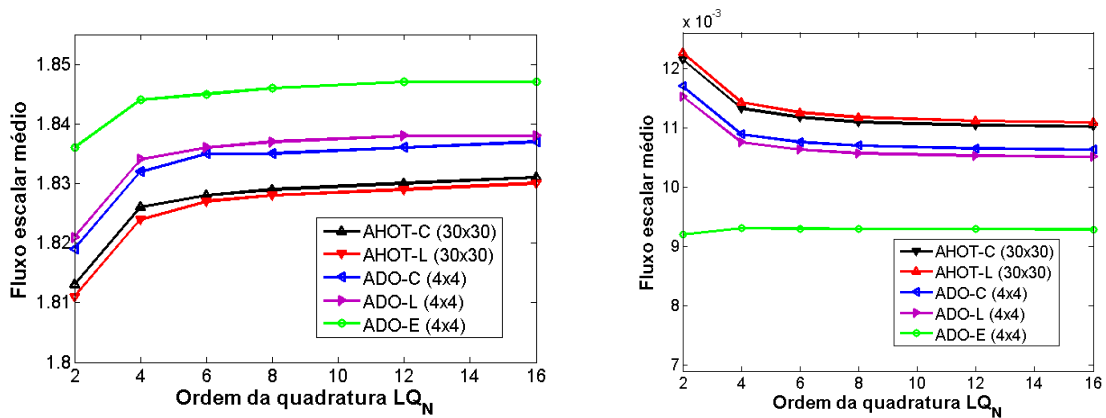
- Quando comparou-se a aproximação ADO-C malha 4×4 com as aproximações AHOT-C e AHOT-L malha 30×30 , obteve-se até três dígitos significativos na região I e, com as demais regiões obteve-se até dois dígitos significativos.
- Verifica-se até três dígitos de concordância, nas comparações da aproximação ADO-L malha 4×4 com as aproximações AHOT-C e AHOT-L malha 30×30 e, com as demais regiões um dígito significativo considerando essa mesma comparação.
- Nas comparações da aproximação ADO-E malha 4×4 com as aproximações AHOT-C e AHOT-L malha 30×30 , verifica-se dois dígitos de concordância nos fluxos escalares médios na região I, ma nas demais regiões não conseguiu-se dígitos significativos.

Tabela 6.11: Fluxo escalar médio, caso teste 4.

Quadratura Simétrica de Nível LQ_N										
		região I			regiões II e III			região IV		
AHOT Constante	D ^a	3 × 3	6 × 6	30 × 30	3 × 3	6 × 6	30 × 30	3 × 3	6 × 6	30 × 30
	1	1.788	1.793	1.813	1.374-2 ^b	1.344-2	1.215-2	2.175-4	2.080-4	1.771-4
	3	1.806	1.810	1.826	1.262-2	1.236-2	1.133-2	1.607-4	1.542-4	1.322-4
	6	1.809	1.813	1.828	1.241-2	1.216-2	1.118-2	1.519-4	1.458-4	1.255-4
	10	1.811	1.814	1.829	1.231-2	1.206-2	1.110-2	1.478-4	1.420-4	1.225-4
	21	1.812	1.816	1.830	1.223-2	1.199-2	1.104-2	1.447-4	1.391-4	1.201-4
	36	1.812	1.816	1.831	1.220-2	1.196-2	1.102-2	1.436-4	1.378-4	1.191-4
AHOT Linear	D	3 × 3	6 × 6	30 × 30	3 × 3	6 × 6	30 × 30	3 × 3	6 × 6	30 × 30
	1	1.788	1.792	1.811	1.374-2	1.345-2	1.227-2	2.176-4	2.091-4	1.890-4
	3	1.806	1.810	1.824	1.262-2	1.237-2	1.143-2	1.608-4	1.548-4	1.374-4
	6	1.809	1.813	1.827	1.241-2	1.217-2	1.126-2	1.519-4	1.464-4	1.310-4
	10	1.811	1.814	1.828	1.231-2	1.207-2	1.118-2	1.479-4	1.426-4	1.277-4
	21	1.812	1.816	1.829	1.223-2	1.199-2	1.112-2	1.448-4	1.397-4	1.253-4
	36	1.812	1.816	1.830	1.220-2	1.196-2	1.109-2	1.435-4	1.384-4	1.243-4
ADO Constante	D	2 × 2	4 × 4		2 × 2	4 × 4		2 × 2	4 × 4	
	1	1.820	1.819		1.169-2	1.170-2		1.804-4	1.816-4	
	3	1.833	1.832		1.088-2	1.089-2		1.336-4	1.344-4	
	6	1.835	1.835		1.075-2	1.076-2		1.268-4	1.276-4	
	10	1.836	1.835		1.069-2	1.070-2		1.237-4	1.245-4	
	21	1.836	1.836		1.065-2	1.065-2		1.214-4	1.222-4	
	36	1.837	1.837		1.063-2	1.063-2		1.205-4	1.213-4	
ADO Linear	D	2 × 2	4 × 4		2 × 2	4 × 4		2 × 2	4 × 4	
	1	1.827	1.821		1.106-2	1.153-2		3.474-4	2.344-4	
	3	1.838	1.834		1.039-2	1.075-2		2.572-4	1.735-4	
	6	1.840	1.836		1.028-2	1.063-2		2.439-4	1.645-4	
	10	1.841	1.837		1.022-2	1.057-2		2.380-4	1.605-4	
	21	1.842	1.838		1.019-2	1.053-2		2.335-4	1.575-4	
	36	1.842	1.838		1.017-2	1.051-2		2.317-4	1.563-4	
ADO Exponencial	D	2 × 2	4 × 4		2 × 2	4 × 4		2 × 2	4 × 4	
	1	1.862	1.836		6.995-3	9.200-3		2.788-3	1.615-3	
	3	1.863	1.844		7.681-3	9.308-3		1.564-3	9.617-4	
	6	1.863	1.845		7.763-3	9.303-3		1.420-3	8.719-4	
	10	1.863	1.846		7.796-3	9.296-3		1.360-3	8.334-4	
	21	1.864	1.847		7.819-3	9.291-3		1.315-3	8.039-4	
	36	1.864	1.847		7.829-3	9.289-3		1.297-3	7.916-4	

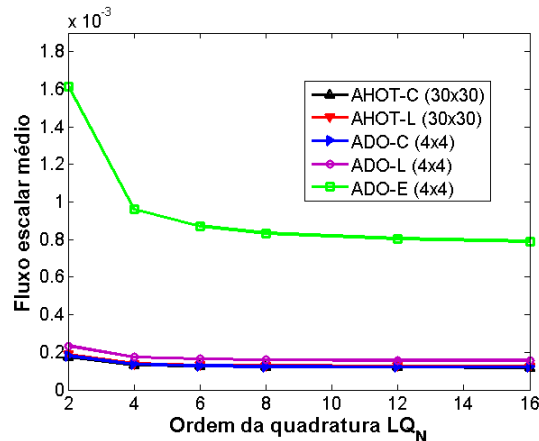
^a Direções por octante^b Lê-se 1.374×10^{-2}

A Figura 6.14, representa graficamente os fluxos escalares médios para as quatro regiões. Pode-se observar que na Região I, Figura 6.14(a), as três aproximações utilizadas pelo método ADO seguiram o mesmo comportamento das utilizadas pelo código AHOT. Nas regiões II e III, Figura 6.14(b), e região IV, Figura 6.14(c), observa-se graficamente as análises já verificadas anteriormente, ou seja, nessas regiões as aproximações ADO-C e ADO-L produziram resultados mais próximos entre elas e, além disso, com o mesmo comportamento das aproximações do método AHOT.



(a) região I.

(b) regiões II e III.



(c) região IV.

Figura 6.14: Representação do fluxo escalar médio na região, quadratura LQ_N .

Assim como observado no caso teste anterior, obteve-se com esse caso teste, resultados satisfatórios em comparações aos encontrados na literatura, ou seja, em geral a precisão dos resultados encontrados por esse trabalho com malhas maiores são comparáveis a resultados de outros métodos obtidos com malhas mais refinadas.

O enfoque desse trabalho está no estudo e análise do efeito do uso das diferentes aproximações nos contornos. Em geral, verificou-se que as diferentes aproximações utili-

zadas pelo método ADO para calcular o fluxo escalar médio em meios homogêneos e heterogêneos, seguiram mesmo comportamento das aproximações utilizadas pelos métodos AHOT e SGF como mostra a representação gráfica dos resultados.

Dentre as análises feitas, observa-se também que as diferentes aproximações influenciam muito nos resultados dos problemas estudados. Sendo que para os problemas heterogêneos, nas comparações entre as aproximações, obteve-se resultados com maior quantidade de dígitos significativos a partir do uso de malhas mais refinadas, bem como na região com a presença de fonte de nêutrons, como é observado nas outras abordagens.

Além disso, verificou-se com base nos casos testes realizados para diferentes domínios, que obteve-se melhores comparações com os resultados obtidos pela aproximação ADO-E considerando maiores divisões do domínio, ou seja, a variação da malha 2×2 para 4×4 é muito maior do que a variação que se observa para as aproximações ADO-C e ADO-L. Porém, até onde foi possível chegar, observou-se que a aproximação ADO-E não demonstrou resultados que desde já caracterizem esta como uma melhor aproximação, principalmente considerando o extenso trabalho e dificuldade de derivação nas deduções analíticas, ou seja, toda a exaustiva dedução analítica, assim como o custo de tempo computacional, não parecem trazer ganhos significativos em relação à aproximação constante, por exemplo. Espera-se que somente através da generalização do código, que até o momento não foi possível, poderia-se ter uma conclusão geral e mais eficiente do uso da aproximação exponencial.

Observa-se das análises obtidas por esse trabalho, relacionadas às diferentes aproximações, semelhanças em relação à outras metodologias. Apesar do trabalho analítico e computacional relacionado às aproximações lineares e exponenciais, o ganho em precisão de dígitos é inferior em comparação com as aproximações constantes. Ao que tudo indica, o uso da aproximação constante no contorno mostra-se sempre ser dominante, particularmente se associada ao uso de malhas mais refinadas.

Com relação à informações de tempo computacional entende-se que uma otimização do código bem como análise mais detalhada precisa ser feita. Contudo, uma observação inicial indica que o aumento das divisões do domínio pode implicar de forma mais relevante no tempo computacional do que o uso de quadraturas de mais alta ordem. No entanto, para dar ideia nesta questão, tomamos um caso teste e quando compara-se as quadraturas LQ_N e $P_N T_N S_N$, Tabela 6.8, malha 4×4 , o tempo computacional para

gerar o fluxo escalar médio da região I via método ADO-C utilizando uma direção por octante (1.655), está em torno de 0.02 segundos, para gerar o fluxo utilizando 21 direções por octante (1.685) o tempo é de aproximadamente 9.5 segundos.

Além disso, salienta-se que a escolha do número de regiões foi limitada nesse trabalho, pois não obteve-se a generalização do código computacional para qualquer número de regiões do domínio. A ordem das diferentes quadraturas utilizadas também está limitada à resolução do sistema linear por métodos diretos e não iterativos, o que já vem sendo usado em outros trabalhos [48].

Os resultados obtidos neste trabalho, apresentados nas diversas tabelas, foram obtidos a partir de um único código computacional. Apesar de realizar uma série de testes internos, para efeitos de verificação de erros, espera-se que eles ainda possam ser passíveis de verificações mais refinadas ou mesmo comparações com implementações independentes.

7 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Neste trabalho, um problema de transporte de nêutrons bidimensional para meios homogêneos e heterogêneos, com espalhamento isotrópico e com presença de fonte fixa, foi abordado utilizando o método ADO em associação à esquemas nodais. Verificou-se que o uso do método ADO é uma boa alternativa no tratamento desses problemas, visto que, possibilitou a utilização de diferentes esquemas numéricos de quadratura de alta ordem, mantendo uma característica importante de redução de ordem do problema de autovalores associados. Além disso, ressalta-se que o procedimento diferentemente dos métodos mais comuns nesta área não envolve nenhum esquema de varredura numérica entre as células, e as soluções obtidas são para fluxos angulares médios em apenas uma das variáveis.

O objetivo foi analisar o efeito do uso de diferentes aproximações nos fluxos desconhecidos no contorno (ou termos de fuga transversal). Para tanto, foram analisadas três abordagens: aproximações contantes, aproximações lineares (as quais estavam relacionadas às variáveis espaciais de cada problema) e aproximações exponenciais (as quais utilizaram as variáveis espaciais e as constantes de separação de cada problema integrado).

É importante destacar, que até o momento aproximações lineares e aproximações exponenciais tais como aqui propostas, não haviam sido utilizadas em conjunto com o método ADO. Dentre as análises feitas, observou-se que essas aproximações tiveram maior influência nos resultados quando foram tratados problemas heterogêneos, e que a maior concordância em dígitos significativos entre as diferentes aproximações aconteceu na região em que havia presença de fonte. Nas demais regiões, observou-se que essa concordância começou a ser maior a partir do refinamento da malha.

Adicionalmente, diferentes esquemas de quadraturas numéricas foram aplicados às equações em ordenadas discretas: quadratura simétrica de nível LQ_N , quadratura Legendre-Chebyshev $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$ e a quadratura *quadruple range* QR , de forma que como já observado no caso de problemas homogêneos, foi possível contornar o problema de pesos negativos encontrado pela quadratura simétrica de nível, e utilizar ordens superiores em esquemas de quadratura. No entanto, observou-se que o aumento do número de direções discretas não apresentou, para os problemas aqui abordados, contribuição relevante no que diz respeito a precisão dos resultados.

Neste trabalho, utilizou-se uma solução particular construída a partir da função de Green para tratamento do termo de fonte do problema, que é gerado não só pela fonte fixa do problema físico mas também pelos termos advindos das aproximações do contorno. Para as aproximações lineares e exponenciais, estas expressões envolveram incógnitas que foram incluídas no sistema linear geral da formulação, criando uma dificuldade adicional significativa ao caso das aproximações constantes.

Considera-se que os objetivos desse trabalho foram alcançados, no sentido de que uma análise mais geral das aproximações nos fluxos nos contornos foram estabelecidas, tanto para problemas homogêneos como para heterogêneos, através da utilização do método ADO em conjunto com métodos nodais. Além disso, foram incorporados diferentes esquemas numéricos de quadratura, que possibilitaram a utilização de altas ordens de quadratura. Destaca-se aqui, que essas análises gerais, até o momento não haviam sido feitas, nesse sentido estende-se a aplicabilidade bem como desenvolvimento do método ADO para tratamento de problemas envolvendo diferentes metodologias no que diz respeito ao tratamento dos termos de fuga transversais.

Neste estudo, foi gerado extensa quantidade de dados que podem guiar uma análise preliminar e seguem no caminho de validação e desenvolvimento da formulação ADO. De tal forma que, agora inclui a análise de diferentes aproximações dos fluxos no contorno, que parecem determinar diferenças nos resultados, nos métodos nodais e que são também dependentes dos problemas abordados. Questões de comportamento físico esperado, como regiões mais suscetíveis ao efeito raio [72], também surgem nos resultados obtidos, sendo que, nesse trabalho não foram objeto de estudo.

A análise dos resultados confirma a viabilidade da proposta das equações auxiliares alternativas, mantendo a eficiência computacional já verificada em outras abordagens do método ADO. No entanto, indica que estudos complementares necessitam ser realizados para caracterizar vantagens adicionais no uso de tais propostas, dentre eles, a construção do código geral, o qual permitirá caracterizar as vantagens relacionadas ao uso de malhas mais refinadas.

Além disso, destaca-se que os resultados obtidos por esse trabalho são novos e a implementação é única, dessa forma, não considera-se que os resultados numéricos apresentados tem caráter conclusivo, fato que ocasiona incentivo à continuidade desse trabalho.

Referências Bibliográficas

- [1] ABU-SHUMAYS, I. K. Compatible product angular quadrature for neutron transport in xy geometry. *Nuclear Science and Engineering* 64, 2 (1977), 299 – 316.
- [2] ABU-SHUMAYS, I. K. Angular quadratures for improved transport computations. *Transport Theory and Statistical Physics* 30, 2-3 (2001), 169 – 204.
- [3] ADAMS, M. L., AND LARSEN, E. W. Fast iterative methods for discrete-ordinates particle transport calculations. *Progress in Nuclear Energy* 40 (2002), 3 – 159.
- [4] ANDERSON, E., BAI, Z., BISCHOF, C., BLACKFORD, S., DEMMEL, J., DONGARRA, J., DU CROZ, J., GREENBAUM, A., HAMMARLING, S., MCKENNEY, A., AND SORENSEN, D. *LAPACK Users' guide*. SIAM, Philadelphia, 1999.
- [5] ARTIN, E. *The gamma function*. Courier Dover Publications, 2015.
- [6] AZMY, Y. The weighted diamond-difference form of nodal transport methods. *Science Engineering* 98 (1988), 29 – 40.
- [7] AZMY, Y. Private communication. (2014).
- [8] AZMY, Y., AND BARNETT, D. Arbitrarily high order transport method of the characteristic type for tetrahedral grids. In *Proceedings of ANS International Meeting on Mathematical Methods for Nuclear Applications* (2001), pp. 9 – 13.
- [9] 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.
- [10] AZMY, Y. Y. Arbitrarily high order characteristic methods for solving the neutron transport equation. *Annals of Nuclear Energy* 19, 10 (1992), 593 – 606.

- [11] AZMY, Y. Y., GALLMEIER, F. X., AND LILLIE, D. A. {TORT} solutions for the 3d radiation transport benchmarks for simple geometries with void region. *Progress in Nuclear Energy* 39, 2 (2001), 155 – 166.
- [12] AZMY, Y. Y., GEHIN, J. C., AND ORSI, R. Dort solutions to the two-dimensional {C5G7MOXbenchmark} problem. *Progress in Nuclear Energy* 45, 2?4 (2004), 215 – 231.
- [13] AZMY, Y. Y., AND ZAMONSKY, O. Thin-cell limit for the spatial weights of the arbitrarily high order transport-nodal method. *Transactions of the American Nuclear Society* 78 (1998).
- [14] BADRUZZAMAN, A. Performance of three-dimensional nodal discrete ordinates methods. *Progress in Nuclear Energy* 18 (1986), 137 – 144.
- [15] BADRUZZAMAN, A. Nodal methods in transport theory. *Advances in Nuclear Science and Technology* 21 (1990), 293 – 331.
- [16] BADRUZZAMAN, A., AND CHIARAMONTE, J. *Application of nodal S_N methods to radiation transport nuclear well logging*. Proc. Intl. Topical Mtg. on Advances in Physics, Mathematics and Computation, Paris, 1987.
- [17] BARICHELLO, L., DA CUNHA, R., PICOLOTO, C., AND TRES, A. An analytical approach for a nodal formulation of a two-dimensional fixed-source neutron transport problem in heterogeneous medium. *Kerntechnik* 80, 2 (2015), 167 – 173.
- [18] BARICHELLO, L., AND SIEWERT, C. A discrete-ordinates solution for a non-grey model with complete frequency redistribution. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 62, 6 (1999), 665 – 675.
- [19] BARICHELLO, L., TRES, A., PICOLOTO, C. B., AND AZMY, Y. A. Recent studies on the asymptotic convergence of the spatial discretization for two-dimensional discrete ordinates solutions. *Journal of Computational and Theoretical Transport* (2016).

- [20] BARICHELO, L. B. *Formulação analítica para soluções do problema de ordenada discreta unidimensional*. Doutorado, Tese de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, 1992.
- [21] BARICHELO, L. B., CABRERA, L. C., AND PROLO FILHO, J. F. An analytical discrete ordinates solution for two dimensional problems based on nodal schemes. *International Nuclear Atlantic Conference, Rio de Janeiro* (2009).
- [22] BARICHELO, L. B., CABRERA, L. C., AND PROLO FILHO, J. F. An analytical approach for a nodal scheme of two-dimensional neutron transport problems. *Annals of Nuclear Energy* 38 (2011), 1310 – 1317.
- [23] BARICHELO, L. B., CABRERA, L. D. C., AND PROLO FILHO, J. F. An analytical approach for a nodal scheme of two-dimensional neutron transport problems. *Annals of Nuclear Energy* 38, 6 (2011), 1310 – 1317.
- [24] BARICHELO, L. B., GARCIA, R. D. M., AND SIEWERT, C. E. Particular solutions for the discrete-ordinates method, 2000.
- [25] BARROS, R., DA SILVA, F. C., AND ALVES FILHO, H. Recent advances in spectral nodal method for x,y-geometry discrete ordinates deep penetration and eigenvalue problems. *Progress in Nuclear Energy* 35 (1999), 293 – 331.
- [26] BARROS, R., AND LARSEN, E. W. A spectral nodal method for the solution of the s_N equations in x,y geometry for highly absorbing deep penetration problems. *VIII Encontro Nacional de Física de Reatores e Termo-hidráulica 1* (1991), 423 – 428.
- [27] BARROS, R., AND LARSEN, E. W. A spectral nodal method for one-group X,Y - geometry discrete ordinates problems. *Nuclear Science and Engineering* 11 (1992), 34 – 45.
- [28] BARROS, R. C. *A Spectral-Nodal Method for the Solution of Discrete Ordinates Problems in One and Two-Dimensional Cartesian Geometry*. PhD thesis, The University of Michigan, Ann Arbor, Michigan, 1990.

- [29] BARROS, R. C., FILHO, H. A., ORELLANA, E. T. V., DA SILVA, F. C., DO COUTO, N., DOMINGUEZ, D. S., AND HERNANDEZ, C. R. The application of spectral nodal methods to discrete ordinates and diffusion problems in cartesian geometry for neutron multiplying systems. *Progress in Nuclear Energy* 42, 4 (2003), 385 – 426.
- [30] BARROS, R. C., FILHO, H. A., PLATT, G. M., OLIVEIRA, F. B. S., AND MILITÃO, D. S. Analytical reconstruction scheme for the coarse-mesh solution generated by the spectral nodal method for neutral particle discrete ordinates transport model in slab geometry. *Annals of Nuclear Energy* 37, 11 (2010), 1461 – 1466.
- [31] BARROS, R. C., YAVUZ, M., DE ABREU, M. P., FILHO, H. A., AND MELLO, J. A. M. Progress in spectral nodal methods applied to discrete ordinates transport problems. *Progress in Nuclear Energy* 33 (1998), 117 – 154.
- [32] BEKAR, K. B., AND AZMY, Y. Y. Tort solutions to the nea suite of benchmarks for 3d transport methods and codes over a range in parameter space. *Annals of Nuclear Energy* 36, 3 (2009), 368 – 374.
- [33] BELL, G., AND GLASSTONE, S. *Nuclear reactor theory*. Van Nostrand Reinhold Co., 1970.
- [34] BIASOTTO, E. *Estudo e Solução da Equação de Transporte de Neutrons Bidimensional pelo Método LTSN para elevadas ordens de quadraturas angulares: LTSN2D-Diag e LTSN2D-DiagExp*. Doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica - UFRGS - Porto Alegre, 2002.
- [35] BOLTZMANN, L. Weitere studien über das wärmeleichgewicht unter gas molekülen. *Sitzungsberichte Akademie der Wissenschaften* 60 (1872), 275 – 376.
- [36] CABRERA, L. C. *Solução espectral para modelos bidimensionais da equação linear de Boltzmann*. Doutorado, Programa de Pós-Graduação em Matemática - UFRGS - Porto Alegre, 2009.
- [37] CACUCI, D. G. *Handbook of nuclear engineering*. Springer, New York, 2010.

- [38] CAMARGO, M. D. *Soluções unificadas para modelos com frequência de colisão variável da dinâmica de gases rarefeitos*. Doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica - UFRGS - Porto Alegre, 2003.
- [39] CAPILLA, M., TALAVERA, C., GINESTAR, D., AND VERDÚ, G. Application of a nodal collocation approximation for the multidimensional p_l equations to the 3d takeda benchmark problems. *Annals of Nuclear Energy* 40, 1 (2012), 1 – 13.
- [40] CARLSON, B. G., L. C. E. *Mechanical Quadrature and the Transport Equation*. Los Alamos Scientific Laboratory, 1961.
- [41] CERCIGNANI, C. *Theory and application of the Boltzmann equation*. Elsevier, New York, 1975.
- [42] CERCIGNANI, C. *The Boltzmann Equation and Its Applications*. Springer New York, 1987.
- [43] CHALHOUB, E., AND GARCIA, R. On the solution of azimuthally dependent transport problems with the {ANISN} code. *Annals of Nuclear Energy* 24, 13 (1997), 1069 – 1084.
- [44] CHALHOUB, E. S., ET AL. *O método das ordenadas discretas na solução da equação de transporte em geometria plana com dependência azimutal*. PhD thesis, PhD thesis, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, USP, São Paulo, 1997.
- [45] CHANDRASEKHAR, S. *Radiative transfer*. Oxford University Press, London, 1950.
- [46] CLARO, L. H., ONO, S., NASCIMENTO, J. A., VIEIRA, W. J., CALDEIRA, A. D., AND DIAS, A. F. Cálculo de criticalidade de um problema-padrão tipo placa com diferentes programas computacionais. *International Nuclear Atlantic Conference, Santos - São Paulo* (2005).
- [47] COTTA, R. M., AND BARICHELLO, L. B. Explicit formulations for radiative transfer problems. In *Thermal Measurements and Inverse Techniques*. CRC Press, 2011, pp. 541 – 562.

- [48] DA CUNHA, R. D., TRES, A., AND BARICHELLO, L. B. A study on the parallel, iterative solution of systems of linear equations appearing on analytical nodal schemes for two-dimensional cartesian geometry discrete ordinates problems. In *Joint International Conference on Mathematics and Computation (M&C), Nashville, Tennessee, pages CD-ROM* (2015).
- [49] DE MELLO, J. A. M., AND BARROS, R. C. An exponential spectral nodal method for one-speed x,y-geometry deep penetration discrete ordinates problems. *Annals of Nuclear Energy* 29, 15 (2002), 1855 – 1869.
- [50] DOMINGUEZ, D. S. *Método espectro-nodal linear para problemas de transporte de nêutrons na formulação de ordenadas discretas em geometria bidimensional cartesiana*. Doutorado, Tese de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, UERJ, Rio de Janeiro, 2006.
- [51] DOMINGUEZ, D. S., AND BARROS, R. C. Spectral green's function linear-nodal method for monoenergetic x, y-geometry external source discrete ordinates problems. *Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computation and Supercomputing in Nuclear Applications (M&C + SNA), Monterey, California, pages CD-ROM* (April, 2007).
- [52] DOMINGUEZ, D. S., IGLESIAS, S. M., AND BARROS, R. C. Reconstrução analítica intra-nodal do fluxo escalar de nêutrons com o método espectro-nodal constante. *International Nuclear Atlantic Conference* (2005).
- [53] DOMINGUEZ, D. S., OLIVEIRA, F. B., FILHO, H. A., AND BARROS, R. C. Composite spatial grid spectral nodal method for one-speed discrete ordinates deep penetration problems in x,y geometry. *Progress in Nuclear Energy* 52 (2010), 298 – 303.
- [54] DOMÍNGUEZ, D. S., AND BARROS, R. C. The spectral green's function linear-nodal method for one-speed x, y-geometry discrete ordinates deep penetration problems. *Annals of Nuclear Energy* 34, 12 (2007), 958 – 966.
- [55] DUDERSTADT, J., AND HAMILTON, L. J. *Nuclear reactor analysis*. John Wiley e Sons, New York, 1976.

- [56] ENGLE JR, W. W. A users manual for anisn: A one dimensional discrete ordinates transport code with anisotropic scattering. Tech. rep., Oak Ridge Gaseous Diffusion Plant, Tenn., 1967.
- [57] FEINAUER, J., SPETTL, A., MANKE, I., STREGE, S., KWADE, A., POTT, A., AND SCHMIDT, V. Structural characterization of particle systems using spherical harmonics. *Materials Characterization* 106 (2015), 123 – 133.
- [58] GARCIA, R. D. M. *Métodos para solução da equação de transporte de partículas integro-diferencial*. PhD thesis, Escola de verão em teoria de transporte de partículas nêutras, Puc - Porto Alegre, 2002.
- [59] GARCIA, R. D. M., AND SIEWERT, C. E. Channel flow of a binary mixture of rigid spheres described by the linearized boltzmann equation and driven by temperature, pressure and density gradients. *SIAM Journal on Applied Mathematics* 67 (2007), 1041 – 1063.
- [60] GÜNAY, M., SARER, B., AND HANÇERLIOGULLARI, A. Three-dimensional monte carlo calculation of gas production in structural material of APEX reactor for some evaluated data files. *Annals of Nuclear Energy* 55, 0 (2013), 292 – 296.
- [61] GODINHO, L. R. *Modelagem de Transferência Radiativa em Vegetações*. Dissertação, Dissertação de Mestrado do Programa de Pós Graduação em Matemática Aplicada, UFRGS, Porto Alegre, 2012.
- [62] GRAUR, I., VELTZKE, T., MÉOLANS, J., HO, M., AND THÖMING, J. The gas flow diode effect: theoretical and experimental analysis of moderately rarefied gas flows through a microchannel with varying cross section. *Microfluidics and Nanofluidics* 18, 3 (2015), 391 – 402.
- [63] HARTMANN, W. *Signals, Sound, and Sensation*. Modern Acoustics and Signal Processing. American Inst. of Physics, 2004.
- [64] HAUSER, E. B., PAZOS, R. P., VILHENA, M. T. D., AND BARROS, R. C. D. Solution and study of nodal neutron transport equation applying the lts

- n-diagexp method. *In: Annals of 18th international conference on transport theory, Rio de Janeiro, RJ* (2003).
- [65] HAUSER, E. B., VILHENA, M. T., AND BARROS, R. C. A laplace transform exponential method for monoenergetic three-dimensional fixed source discrete ordinates problems in cartesian geometry. *International Journal of Nuclear Energy Science and Technology* 5, 1 (2009), 80 – 89.
- [66] HÉBERT, A. Mixed-dual implementations of the simplified p_N method. *Annals of Nuclear Energy* 37, 4 (2010), 498 – 511.
- [67] HOFFMAN, T., DODDS JR, H., ROBINSON, M., AND HOLMES, D. Sputtering calculations with the discrete-ordinates method. *Nuclear Science and Engineering* 68, 2 (1978), 204 – 211.
- [68] JARRELL, J. J., AND ADAMS, M. L. Discrete-ordinates quadrature sets based on linear discontinuous finite elements. *In International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2011), Rio de Janeiro, RJ, Brazil* (2011).
- [69] KÓPHÁZI, J., LATHOUWERS, D., AND KLOOSTERMAN, J. L. Development of a three-dimensional time-dependent calculation scheme for molten salt reactors and validation of the measurement data of the molten salt reactor experiment. *Nuclear Science and Engineering* 163 (2009), 118 – 131.
- [70] LATHROP, K. D. *TWOTRAN, A Fortran Program for Two-Dimensional Transport*. July 22, 1968.
- [71] LATHROP, K. D., AND CARLSON, B. G. Discrete ordinates angular quadrature of the neutron transport equation. Tech. rep., Los Alamos Scientific Lab., N. Mex., 1964.
- [72] LEWIS, E., AND MILLER, W. *Computational methods of neutron transport*. Wiley, 1984.
- [73] LONGONI, G. *Advanced quadrature sets, acceleration and preconditioning techniques for the discrete ordinates method in parallel computing environments*. PhD thesis, University of Florida, 2004.

- [74] LONGONI, G., AND HAGHIGHAT, A. Development of new quadrature sets with the ordinate splitting technique. In *Proceedings of the 2001 American Nuclear Society International Meeting on Mathematical Methods for Nuclear Applications, Salt Lake City, UT* (2001), vol. 1, pp. 9 – 13.
- [75] MELLO, J. A. M. *Modelagem Espectro-Nodal Exponencial para Problemas Monoenergéticos de Penetração Profunda Segundo a Teoria de Transporte de Nêutrons na Formulação de Ordenadas Discretas em Geometria Cartesiana Bidimensional*. Doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Nuclear - UFRJ - Rio de Janeiro, 2000.
- [76] MENEZES, W. A., FILHO, H. A., AND BARROS, R. C. Spectral green's function nodal method for multigroup sn problems with anisotropic scattering in slab-geometry non-multiplying media. *Annals of Nuclear Energy* 64, 0 (2014), 270 – 275.
- [77] MENEZES, W. A., FILHO, H. A., BARROS, R. C., MORAES, C. S., AND DOMINGUEZ, D. S. Analytical spatial reconstruction scheme for the coarse-mesh solutions generated by the constant spectral nodal method for monoenergetic discrete ordinates transport calculations in x,y geometry fission-chain reacting systems. *Annals of Nuclear Energy* 53, 0 (2013), 274 – 279.
- [78] MILITÃO, D. S., FILHO, H. A., AND BARROS, R. C. A numerical method for monoenergetic slab-geometry fixed-source adjoint transport problems in the discrete ordinates formulation with no spatial truncation error. *International Journal of Nuclear Energy Science and Technology* 7, 2 (2012), 151 – 165.
- [79] NAQA, I. E., DEASY, J. O., AND VICIC, M. Locally adaptive denoising of monte carlo dose distributions via hybrid median filtering. In *Nuclear Science Symposium Conference Record, 2003 IEEE* (Oct 2003), vol. 4, pp. 2703 – 2706.
- [80] OKUMURA, K., OKA, Y., AND ISHIWATARI, Y. Nuclear reactor calculations. In *Nuclear Reactor Design*. Springer, 2014, pp. 49 – 126.
- [81] PICOLOTO, C., TRES, A., DA CUNHA, R., AND BARICHELLO, L. Two-dimensional neutron transport problems with reflective boundary conditions:

- an analytical approach. In *Proceedings of the 2013 International Nuclear Atlantic Conference-INAC* (2013).
- [82] PICOLOTO, C., TRES, A., DA CUNHA, R., AND BARICHELLO, L. Closed-form solutions for nodal formulations of two dimensional transport problems in heterogeneous media. *Annals of Nuclear Energy* 86 (2015), 65 – 71.
- [83] PICOLOTO, C., TRES, A., DA CUNHA, R., AND BARICHELLO, L. Closed-form solutions for nodal formulations of two dimensional transport problems in heterogeneous media. *Annals of Nuclear Energy* 86 (2015), 65 – 71.
- [84] PICOLOTO, C. B. *Formulações Espectronodais em Cálculos Neutrônicos Multidimensionais*. Doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica - UFRGS - Porto Alegre, 2015.
- [85] PROLO FILHO, J., AND BARICHELLO, L. General expressions for auxiliary equations of a nodal formulation for two-dimensional transport calculations. *Journal of Computational and Theoretical Transport* 43, 1-7 (2014), 352 – 373.
- [86] PROLO FILHO, J. F. *Abordagens Espectronodais para Modelos Multidimensionais em Transporte de Partículas*. Doutorado, Programa de Pós-Graduação em Matemática - UFRGS - Porto Alegre, 2011.
- [87] PROLO FILHO, J. F. BARICHELLO, L. B. An analytical discrete ordinates solution for a nodal model of a two-dimensional neutron transport problem. Tech. rep., American Nuclear Society, 555 North Kensington Avenue, La Grange Park, IL 60526 (United States), 2013.
- [88] REICHERT, J. T. *Abordagens analíticas para problemas de transporte de radiação com dependência espectral*. Doutorado, Programa de Pós-Graduação em Matemática - UFRGS - Porto Alegre, 2009.
- [89] REICHERT, J. T., AND BARICHELLO, L. B. An analytical approach to the solution of the transport equation for photons. Tech. rep., M&C, 2011, Rio de Janeiro, 2011.
- [90] RHOADES, W., AND MYNATT, F. Dot iii two-dimensional discrete ordinates transport code. Tech. rep., Oak Ridge National Lab., Tenn.(USA), 1973.

- [91] RHOADES, W. A., AND CHILDS, R. L. The tort three-dimensional discrete ordinates neutron/photon transport code. Tech. rep., Oak Ridge National Lab., TN (USA), 1987.
- [92] RODRIGUES, P. *Dinâmica de gases rarefeitos e transferência radiativa: aplicações em geometria cilíndrica*. Doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica - UFRGS - Porto Alegre, 2003.
- [93] ROHDE, U., BAIER, S., DUERIGEN, S., FRIDMAN, E., KLIEM, S., AND MERK, B. Development and verification of the coupled 3D neutron kinetics/thermal-hydraulics code dyn3d-htr for the simulation of transients in block-type HTGR. *Nuclear Engineering and Design 251* (2012), 412 – 422. 5th International Topical Meeting on High Temperature Reactor Technology (HTR 2010).
- [94] SCHERER, C. S., B. L. B. An analytical approach to the unified solution of kinetic equations in rarefied gas dynamics. III. evaporation and condensation problems. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik (Printed ed.) 61* (2010), 95 – 117.
- [95] SCHERER, C. S., AND PROLO FILHO, J. F. AN BARICHELLO, L. B. An analytical approach to the unified solution of kinetic equations in rarefied gas dynamics. I. flow problems. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik 60* (2009), 70 – 115.
- [96] SEED, T., MILLER, W., AND BOSLER, G. Trident. a new triangular mesh discrete ordinates code. *DISCLAIMER Portions of this document may be illegible in electronic image products. Images are produced from the best available original document.* (1978), 157.
- [97] SEED, T., MILLER JR, W., AND BRINKLEY JR, F. Trident: a two-dimensional, multigroup, triangular mesh discrete ordinates, explicit neutron transport code. Tech. rep., Los Alamos Scientific Lab., NM (USA), 1977.
- [98] SEGATTO, C., GOMES, M., ET AL. The one-dimensional LTSN solution in a slab with high degree of quadrature. *Annals of Nuclear Energy 26*, 10 (1999), 925 – 934.

- [99] SEGATTO, C., AND VILHENA, M. The state-of-the-art of the LTSN method. *Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications* (1999), 1618 – 1631.
- [100] SEGATTO, C. F., AND DE VILHENA, M. T. M. Extension of the LTSN formulation for discrete ordinates problem without azimuthal symmetry. *Annals of Nuclear Energy* 21, 11 (1994), 701 – 710.
- [101] SEUBERT, A., VELKOV, K., AND LANGENBUCH, S. The time-dependent 3d discrete ordinates code TORT-TD with thermal-hydraulic feedback by athlet models. *Paul Scherrer Institut - PSI, Switzerland* (2008).
- [102] SHARIPOV, F. Non-isothermal gas flow through rectangular microchannels. *Journal of Micromechanics and Microengineering* 9, 4 (1999), 394.
- [103] SILVA, D. M., LYDIA, E. J., GUIDA, M. R., ZANI, J. H., ALVES FILHO, H., AND BARROS, R. C. Analytical methods for computational modeling of fixed-source slab-geometry discrete ordinates transport problems: Response matrix and hybrid s n. *Progress in Nuclear Energy* 69 (2013), 77 – 84.
- [104] STACEY, W. M. *Nuclear reactor physics*. John Wiley & Sons, 2007.
- [105] TOMASCHEWSKI, F., SEGATTO, C., BARROS, R., AND VILHENA, M. Analytic representation of the solution of neutron kinetic transport equation in slab-geometry discrete ordinates formulation. In *Integral Methods in Science and Engineering*. Springer, 2015, pp. 617 – 627.
- [106] TRES, A. *Análise de Esquemas de Aproximações Angulares para a Equação de Transporte Bidimensional em Ordenadas Discretas via Formulações Nodais*. Doutorado, Programa de Pós-Graduação em Matemática - UFRGS - Porto Alegre, 2015.
- [107] TRES, A., BECKER, C., DA CUNHA, R. D., AND BARICHELLO, L. B. A deterministic approach for neutron transport in two-dimensional domains. In *Proceedings of the International Congress of Mechanical Engineering-COBEM, Ribeirão Preto, Brazil, CD-ROM* (2013), vol. 6922, p. 6930.

- [108] TRES, A., PICOLOTO, C. B., FILHO, J. F. P., CUNHA, R. D., AND BARICHELLO, L. B. Explicit formulation of a nodal transport method for discrete ordinates calculations in two-dimensional fixed-source problems. *Kerntechnik* 79 (2014), 155.
- [109] TSAI, R. W., AND LOYALKA, S. K. A numerical method for solving the integral equation of neutron transport: III. *Nuclear Science and Engineering* 59 (1976), 536 – 540.
- [110] VILHENA, M., BARICHELLO, L., ZABADAL, J., SEGATTO, C., CARDONA, A., AND PAZOS, R. Solutions to the multidimensional linear transport equation by the spectral method. *Progress in nuclear energy* 35, 3 (1999), 275 – 291.
- [111] VILHENA, M. T., AND BARICHELLO, L. B. A new analytical approach to solve the neutron transport equation. *Kerntechnik* 56 (1991), 334 – 336.
- [112] WALTERS, W. F. The relation between finite element methods and nodal methods in transport theory. *Progress in Nuclear Energy* 18 (1986), 21 – 26.
- [113] WALTERS, W. F., AND O’DELL, R. D. Nodal methods for discrete-ordinates transport problems in (x, y) geometry. Tech. rep., Los Alamos National Lab., NM (USA), 1981.
- [114] WICK, G. C. Über ebene diffusions problem. *Z. Phys* 120 (1943), 702 – 705.
- [115] WU, Y., SONG, J., ZHENG, H., SUN, G., HAO, L., LONG, P., AND HU, L. Cad-based monte carlo program for integrated simulation of nuclear system supermc. *Annals of Nuclear Energy* 82 (2015), 161 – 168.
- [116] ZABADAL, J., DE VILHENA, M. T., AND BARICHELLO, L. B. An analytical solution for the two-dimensional discrete ordinates problem in a convex domain. *Progress in Nuclear Energy* 31, 3 (1997), 225 – 228.
- [117] ZABADAL, J., VILHENA, M., AND BARICHELLO, L. Solution of the three-dimensional one-group discrete ordinates problems by the {LTSN} method. *Annals of Nuclear Energy* 22, 2 (1995), 131 – 134.

- [118] ZAMBONI, C. *Fundamentos da Física de Nêutrons*. Editora Livraria da Física, 2007.
- [119] ZANI, J. H. Método linear nodal no esquema iterativo nbi. *Trends in Applied and Computational Mathematics* 6, 2 (2005), 337 – 347.

Apêndice A FORMULAÇÃO NODAL DEFINIDA EM DOMÍNIO COMPLETO

Neste apêndice incluímos a formulação desenvolvida sem consideração de divisões do domínio em nodos, aplicada à um problema teste específico. Representa a fase inicial de estudos das propostas alternativas de equações auxiliares.

Formulação do problema

O problema de transporte de nêutrons com fonte fixa trabalhado está definido em um domínio retangular $[0, a] \times [0, b]$ conforme Figura A.1. No interior desse domínio $[0, a_s] \times [0, b_s]$ existe a presença de uma fonte isotrópica $Q(\mathbf{r})$ e em algumas fronteiras é conhecido o fluxo angular incidente.

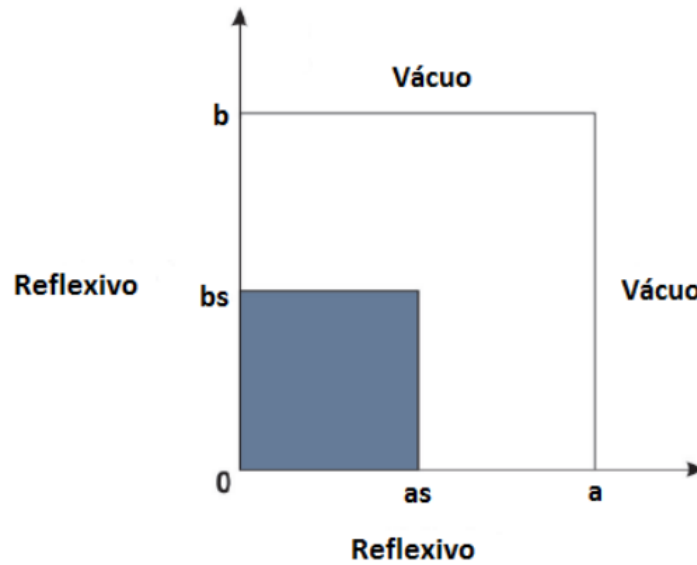


Figura A.1: Representação geométrica do domínio do problema.

A equação de transporte em ordenadas discretas que modela esse problema é escrita na forma

$$\begin{aligned} \mu_i \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \Omega_i) + \eta_i \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \Omega_i) + \sigma_t \Psi(x, y, \Omega_i) &= \\ &= \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^M \omega_k \Psi(x, y, \Omega_k) + Q(x, y), \end{aligned} \quad (\text{A.1})$$

em que, $x \in [0, a]$, $y \in [0, b]$, $\mathbf{\Omega}_i = (\mu_i, \eta_i)$ representa as direções com peso da quadratura angular associado ω_i , $i = 1, \dots, M$ onde M representa o número de direções (ordenadas) e é definido de acordo com a escolha da quadratura utilizada. Para este problema escolheu-se utilizar a quadratura simétrica de nível LQ_N , dessa forma tem-se $M = N(N + 2)/8$ representando o número de direções por octante. Ainda, σ_t e σ_s , são respectivamente, a seção de choque macroscópica total e seção de choque de espalhamento.

Os fluxos incidentes nos contornos para as fronteiras com condição de contorno do tipo vácuo, são definidos por

$$\Psi(a, y, \dot{\mathbf{\Omega}}) = 0, \quad (\text{A.2})$$

$$\Psi(x, b, \dot{\mathbf{\Omega}}) = 0, \quad (\text{A.3})$$

e para as fronteiras com condição de contorno do tipo reflexiva, são definidas por

$$\Psi(x, 0, \dot{\mathbf{\Omega}}) = \Psi(x, 0, \ddot{\mathbf{\Omega}}), \quad (\text{A.4})$$

$$\Psi(0, y, \dot{\mathbf{\Omega}}) = \Psi(0, y, \ddot{\mathbf{\Omega}}), \quad (\text{A.5})$$

onde $\dot{\mathbf{\Omega}}$ indica as direções de incidência do fluxo em cada fronteira e $\ddot{\mathbf{\Omega}}$ indica as direções de saída do fluxo em cada fronteira.

Equações nodais integradas

A partir da equação bidimensional em ordenadas discretas, equação (A.1), pretende-se obter as equações unidimensionais integradas transversalmente. Para isso, serão utilizados os esquemas nodais.

Dessa forma, multiplica-se a equação (A.1) por $1/b$ e integra-se em relação a variável $y \in [0, b]$,

$$\begin{aligned} \mu_i \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_i) + \frac{\eta_i}{b} [\Psi(x, b, \mathbf{\Omega}_i) - \Psi(x, 0, \mathbf{\Omega}_i)] + \sigma_t \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_i) = \\ = Q_y(x) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^M \omega_k \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_k), \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$

para $i = 1, \dots, M$, sendo o fluxo angular médio definido por

$$\Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_i) = \frac{1}{b} \int_0^b \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_i) dy \quad (\text{A.7})$$

e a fonte

$$Q_y(x) = \frac{1}{b} \int_0^b Q(x, y) dy. \quad (\text{A.8})$$

Agora, multiplica-se a equação (A.1) por $1/a$ e integra-se em $x \in [0, a]$

$$\begin{aligned} \eta_i \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \Omega_i) + \frac{\mu_i}{a} [\Psi(a, y, \Omega_i) - \Psi(0, y, \Omega_i)] + \sigma_t \Psi_x(y, \Omega_i) = \\ = Q_x(y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^M \omega_k \Psi_x(y, \Omega_i), \end{aligned} \quad (\text{A.9})$$

para $i = 1, \dots, M$, com fluxo angular médio e fonte, definidos respectivamente, por

$$\Psi_x(y, \Omega_i) = \frac{1}{a} \int_0^a \Psi(x, y, \Omega_i) dx, \quad (\text{A.10})$$

$$Q_x(y) = \frac{1}{a} \int_0^a Q(x, y) dx. \quad (\text{A.11})$$

Neste trabalho, considera-se o seguinte ordenamento para o problema integrado em y , equação (A.6), $\mu_i > 0$ para $i = 1, \dots, M/2$ e $\mu_i < 0$ para $i = M/2 + 1, \dots, M$, como mostra a Figura A.2.

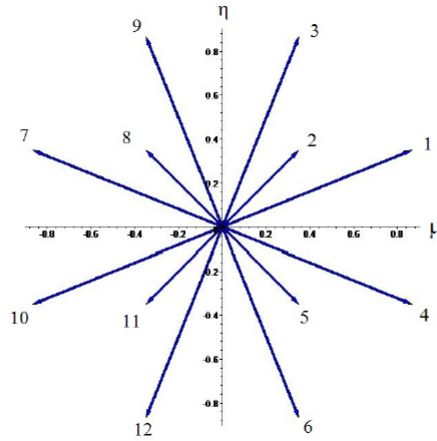


Figura A.2: Escolha da numeração das direções em S_4 para a equação nodal integrada em y , quadratura LQ_N .

De acordo com essa ordenação, escreve-se a equação (A.6) da seguinte forma,

$$\mu_i \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \Omega_i) + \sigma_t \Psi_y(x, \Omega_i) = Q_y(x, \Omega_i) +$$

$$+\frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+M/2})] \quad (\text{A.12})$$

e

$$-\mu_i \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \Omega_{i+M/2}) + \sigma_t \Psi_y(x, \Omega_{i+M/2}) = Q_y(x, \Omega_{i+M/2}) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+M/2})], \quad (\text{A.13})$$

para $i = 1, \dots, M/2$, sendo o termo fonte definido por

$$Q_y(x, \Omega_i) = Q_y(x) - \frac{\eta_i}{b} [\Psi(x, b, \Omega_i) - \Psi(x, 0, \Omega_i)] \quad (\text{A.14})$$

e

$$Q_y(x, \Omega_{i+M/2}) = Q_y(x) - \frac{\eta_{i+M/2}}{b} [\Psi(x, b, \Omega_{i+M/2}) - \Psi(x, 0, \Omega_{i+M/2})]. \quad (\text{A.15})$$

As equações (A.12) e (A.13) são as *equações nodais* do problema integrado em y . Para obter as *equações nodais* do problema integrado em x , considera-se o seguinte ordenamento: $\eta_i > 0$ para $i = 1, \dots, M/2$ e $\eta_i < 0$ para $i = M/2 + 1, \dots, M$, conforme Figura A.3.

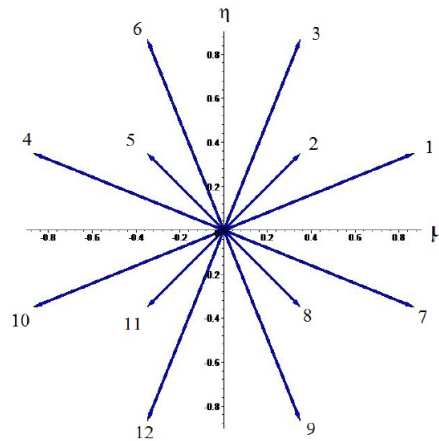


Figura A.3: Escolha da numeração das direções em S_4 para a equação nodal integrada em x , quadratura LQ_N .

Dessa forma, considerando esse ordenamento, escreve-se a equação (A.9) como

$$\eta_i \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \Omega_i) + \sigma_t \Psi_x(y, \Omega_i) = Q_x(y, \Omega_i) +$$

$$+ \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Psi_x(y, \Omega_k) + \Psi_x(y, \Omega_{k+M/2})] \quad (\text{A.16})$$

e

$$- \eta_i \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \Omega_{i+M/2}) + \sigma_i \Psi_x(y, \Omega_{i+M/2}) = Q_x(y, \Omega_{i+M/2}) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Psi_x(y, \Omega_k) + \Psi_x(y, \Omega_{k+M/2})], \quad (\text{A.17})$$

para $i = 1, \dots, M/2$, com termos fonte definidos por

$$Q_x(y, \Omega_i) = Q_x(y) - \frac{\mu_i}{a} [\Psi(a, y, \Omega_i) - \Psi(0, y, \Omega_i)] \quad (\text{A.18})$$

e

$$Q_x(y, \Omega_{i+M/2}) = Q_x(y) - \frac{\mu_{i+M/2}}{a} [\Psi(a, y, \Omega_{i+M/2}) - \Psi(0, y, \Omega_{i+M/2})]. \quad (\text{A.19})$$

Observa-se que nas equações (A.14), (A.15), (A.18) e (A.19), aparecem termos relacionados às condições de contorno, que são conhecidos somente nas direções incidentes. Dessa forma, como usual em esquemas nodais, equações auxiliares são necessárias para aproximar os fluxos angulares desconhecidos no contorno, que serão propostos mais adiante.

Obtidas as equações unidimensionais integradas transversalmente nas variáveis espaciais y e x , respectivamente, equações (A.12), (A.13), (A.16) e (A.17), pode-se utilizar o método ADO na resolução da parte homogênea dessas equações, o que será visto a seguir.

Solução homogênea pelo método ADO

A parte homogênea das equações unidimensionais integradas transversalmente (A.12), (A.13), (A.16) e (A.17), são resolvidas pela aplicação do método ADO. Esse método consiste em construir a solução homogênea do problema em termos de constantes de separação e autofunções, que são definidas por expressões que envolvem autovalores e autovetores.

Desta forma, propõe-se soluções para o problema homogêneo, na forma

$$\Psi_y^h(x, \Omega_i) = \Phi_y(\nu, \Omega_i) e^{-x/\nu} \quad (\text{A.20})$$

e

$$\Psi_x^h(y, \Omega_i) = \Phi_x(\gamma, \Omega_i) e^{-y/\gamma}. \quad (\text{A.21})$$

Substitui-se a equação (A.20) nas equações (A.12) e (A.13), obtém-se

$$-\frac{\mu_i}{\nu}\Phi_y(\nu, \boldsymbol{\Omega}_i) + \sigma_t\Phi_y(\nu, \boldsymbol{\Omega}_i) = \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} [\Phi_y(\nu, \boldsymbol{\Omega}_k) + \Phi_y(\nu, \boldsymbol{\Omega}_{k+M/2})] \quad (\text{A.22})$$

e

$$\frac{\mu_i}{\nu}\Phi_y(\nu, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) + \sigma_t\Phi_y(\nu, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) = \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} [\Phi_y(\nu, \boldsymbol{\Omega}_k) + \Phi_y(\nu, \boldsymbol{\Omega}_{k+M/2})], \quad (\text{A.23})$$

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

Nesse ponto, define-se as equações

$$U_y(\nu, \boldsymbol{\Omega}_i) = [\Phi_y(\nu, \boldsymbol{\Omega}_i) + \Phi_y(\nu, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2})] \quad (\text{A.24})$$

e

$$V_y(\nu, \boldsymbol{\Omega}_i) = [\Phi_y(\nu, \boldsymbol{\Omega}_i) - \Phi_y(\nu, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2})] \quad (\text{A.25})$$

de maneira que ao adicionar as equações (A.22) e (A.23), obtém-se

$$V_y(\nu, \boldsymbol{\Omega}_i) = \frac{\nu}{\mu_i}\sigma_t U_y(\nu, \boldsymbol{\Omega}_i) - \frac{\nu\sigma_s}{2\mu_i} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k U_y(\nu, \boldsymbol{\Omega}_k), \quad (\text{A.26})$$

para $i = 1, \dots, M/2$ com $\eta_i = \eta_{i+M/2}$.

Agora, subtraindo-se as equações (A.22) e (A.23) e considerando-se novamente as equações (A.24) e (A.25), obtém-se

$$V_y(\nu, \boldsymbol{\Omega}_i) = \frac{\mu_i}{\nu\sigma_t} U_y(\nu, \boldsymbol{\Omega}_i), \quad (\text{A.27})$$

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

Nesse ponto, para obter o problema de autovalores, substitui-se a equação (A.27) na equação (A.26), resultando

$$[\mathbf{D}_y - \mathbf{A}_y]\mathbf{U}_y = \lambda_y \mathbf{U}_y, \quad (\text{A.28})$$

com

$$\lambda_y = \frac{1}{\nu^2}, \quad (\text{A.29})$$

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

$$\mathbf{D}_y = \text{diag} \left\{ \left(\frac{\sigma_t}{\mu_1} \right)^2, \left(\frac{\sigma_t}{\mu_2} \right)^2, \dots, \left(\frac{\sigma_t}{\mu_{M/2}} \right)^2 \right\} \quad (\text{A.30})$$

e as entradas da matriz \mathbf{A}_y , são definidas por

$$\mathbf{A}_y(i, j) = \frac{\omega_j \sigma_s \sigma_t}{2\mu_i^2}, \quad (\text{A.31})$$

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

Da solução do problema de autovalores, equação (A.28), encontra-se $\{\lambda_{yj}, U_{yj}\}$ para $j = 1, \dots, M/2$ e as constantes de separação ν_j definidas na equação (A.29). Logo, pode-se determinar as componentes do vetor \mathbf{V}_y , e então, definir as autofunções do problema, utilizando-se as equações (A.24) e (A.25),

$$\Phi_y(\nu_j, \boldsymbol{\Omega}_i) = \frac{U_y(\nu_j, \boldsymbol{\Omega}_i) + V_y(\nu_j, \boldsymbol{\Omega}_i)}{2} \quad (\text{A.32})$$

e

$$\Phi_y(\nu_j, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) = \frac{U_y(\nu_j, \boldsymbol{\Omega}_i) - V_y(\nu_j, \boldsymbol{\Omega}_i)}{2}. \quad (\text{A.33})$$

Neste ponto deve-se observar que no início tinha-se um problema de dimensão M , e agora chega-se em um problema de autovalores de dimensão $M/2 \times M/2$. Isso ocorre devido à escolha das direções e ao fato das constantes de separação serem fornecidas aos pares $\pm\nu_j$.

Dessa forma, pode-se estabelecer a solução para o problema homogêneo. Baseado no que foi desenvolvido até o momento e levando em conta que as constantes de separação ocorrem aos pares, define-se a solução homogênea para o problema integrado em y da seguinte forma

$$\Psi_y^h(x, \boldsymbol{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^{M/2} [A_j \Phi_y(\nu_j, \boldsymbol{\Omega}_i) e^{-x/\nu_j} + B_j \Phi_y(\nu_j, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(a-x)/\nu_j}] \quad (\text{A.34})$$

e

$$\Psi_y^h(x, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} [A_j \Phi_y(\nu_j, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) e^{-x/\nu_j} + B_j \Phi_y(\nu_j, \boldsymbol{\Omega}_i) e^{-(a-x)/\nu_j}], \quad (\text{A.35})$$

para $i = 1, \dots, M/2$ e A_j e B_j representam os coeficientes da solução, que deverão ser determinados.

Processo análogo é utilizado para o desenvolvimento da solução homogênea do problema integrado em x . Nesse sentido, obtém-se o problema de autovalores na forma

$$[\mathbf{D}_x - \mathbf{A}_x]\mathbf{U}_x = \lambda_x \mathbf{U}_x, \quad (\text{A.36})$$

com

$$\lambda_x = \frac{1}{\gamma^2}, \quad (\text{A.37})$$

sendo, \mathbf{D}_x e \mathbf{A}_x matrizes de ordem $M/2 \times M/2$. A matriz \mathbf{D}_x é definida como

$$\mathbf{D}_x = \text{diag} \left\{ \left(\frac{\sigma_t}{\eta_1} \right)^2, \left(\frac{\sigma_t}{\eta_2} \right)^2, \dots, \left(\frac{\sigma_t}{\eta_{M/2}} \right)^2 \right\} \quad (\text{A.38})$$

e as entradas da matriz \mathbf{A}_x definidas por

$$\mathbf{A}_x(i, j) = \frac{\omega_j \sigma_s \sigma_t}{2\eta_i^2}, \quad (\text{A.39})$$

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

Dessa forma, escreve-se a solução para o problema homogêneo, equações (A.16) e (A.17), na forma

$$\Psi_x^h(y, \boldsymbol{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^{M/2} [E_j \Phi_x(\gamma_j, \boldsymbol{\Omega}_i) e^{-y/\gamma_j} + F_j \Phi_x(\gamma_j, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(b-y)/\gamma_j}] \quad (\text{A.40})$$

e

$$\Psi_x^h(y, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} [E_j \Phi_x(\gamma_j, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) e^{-y/\gamma_j} + F_j \Phi_x(\gamma_j, \boldsymbol{\Omega}_i) e^{-(b-y)/\gamma_j}], \quad (\text{A.41})$$

para $i = 1, \dots, M/2$, sendo E_j e F_j coeficientes da solução, que deverão ser determinados.

Solução particular e geral

Nesse capítulo é trabalhado a solução particular do problema, sendo que buscou-se desenvolvê-la a partir das funções de Green. Considerando a formulação apresentada por Barichello et al. [24], será feita uma adaptação a esse trabalho, de forma a considerar o caso dos autovalores repetidos.

Definição do Termo Fonte

Neste trabalho é considerado o termo fonte do domínio conforme Figura (A.1) e como definido no trabalho de Tsai e Loyalka [109]

$$Q(x, y) = \begin{cases} 1, & \text{para } x \in [0, a_s] \text{ e } y \in [0, b_s] \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (\text{A.42})$$

Substituindo a equação (A.42) na equação (A.8), obtém-se

$$Q_y(x) = \begin{cases} b_s/b, & x \in [0, a_s] \\ 0, & a_s < x \leq a, \end{cases} \quad (\text{A.43})$$

onde $Q_y(x)$ é a fonte para o problema integrado em y .

Agora substituindo a equação (A.42) na equação (A.11), obtém-se

$$Q_x(y) = \begin{cases} a_s/a, & y \in [0, b_s] \\ 0, & b_s < y \leq b, \end{cases} \quad (\text{A.44})$$

onde $Q_x(y)$ é a fonte para o problema integrado em x .

Nas equações (A.14), (A.15), (A.18) e (A.19) o termo não homogêneo depende dos valores dos fluxos angulares dos contornos, os quais em algumas direções, são conhecidos pelas condições de contorno do problema e nas direções que não são conhecidas, precisa-se de equações auxiliares.

Define-se os fluxos nos contornos onde há condição de vácuo, na forma

$$\Psi(x, b, \Omega_i) = 0, \quad i = M/4 + 1, \dots, M/2 \quad \text{e} \quad i = 3M/4 + 1, \dots, M, \quad (\text{A.45})$$

$$\Psi(a, y, \Omega_i) = 0, \quad i = M/4 + 1, \dots, M/2 \quad \text{e} \quad i = 3M/4 + 1, \dots, M \quad (\text{A.46})$$

e, os fluxos nas fronteiras onde há condição reflexiva por

$$\Psi(x, 0, \Omega_i) = \Psi(x, 0, \Omega_{i+M/4}), \quad i = 1, \dots, M/4 \quad \text{e} \quad i = M/2 + 1, \dots, 3M/4, \quad (\text{A.47})$$

$$\Psi(0, y, \Omega_i) = \Psi(0, y, \Omega_{i+M/4}), \quad i = 1, \dots, M/4 \quad \text{e} \quad i = M/2 + 1, \dots, 3M/4. \quad (\text{A.48})$$

Nesse trabalho, procurou-se aproximar os fluxos desconhecidos nos contornos por aproximações mais gerais do tipo exponencial, definidas por

$$\Psi(0, y, \Omega_i) = M_i e^{\frac{-(b-y)}{\gamma_{max}}}, \quad (\text{A.49})$$

$$\Psi(a, y, \Omega_i) = L_i e^{\frac{-(b-y)}{\gamma_{max}}}, \quad (\text{A.50})$$

$$\Psi(x, 0, \Omega_i) = J_i e^{\frac{-(a-x)}{\nu_{max}}}, \quad (\text{A.51})$$

$$\Psi(x, b, \Omega_i) = I_i e^{\frac{-(a-x)}{\nu_{max}}}, \quad (\text{A.52})$$

com $i = 1, \dots, M/4$ e $i = M/2 + 1, \dots, 3M/4$, onde γ_{max} e ν_{max} são as constantes de separação máximas de cada problema integrado, obtidas da solução do problema de

autovalores. Nessa aproximação não é necessário definir parâmetros *a priori* e foi considerado o problema definido em um domínio cercado por condições reflexivas e do tipo vácuo.

Para obter o termo fonte para o problema integrado em y , substitui-se as equações (A.51) e (A.52) juntamente com as equações (A.43) e (A.45) nas equações (A.14) e (A.15),

$$Q_y(x, \Omega_i) = \frac{b_s}{b} + \frac{\eta_i}{b} [J_i - I_i] e^{\frac{-(a-x)}{\nu_{max}}}, \quad i = 1, \dots, M/4$$

$$\text{e } i = M/2 + 1, \dots, 3M/4, \quad (\text{A.53})$$

$$Q_y(x, \Omega_i) = \frac{b_s}{b} + \frac{\eta_i}{b} J_i e^{\frac{-(a-x)}{\nu_{max}}}, \quad i = M/4 + 1, \dots, M/2$$

$$\text{e } i = 3M/4 + 1, \dots, M, \quad (\text{A.54})$$

para $x \in [0, a_s]$, e

$$Q_y(x, \Omega_i) = \frac{\eta_i}{b} [J_i - I_i] e^{\frac{-(a-x)}{\nu_{max}}}, \quad i = 1, \dots, M/4$$

$$\text{e } i = M/2 + 1, \dots, 3M/4, \quad (\text{A.55})$$

$$Q_y(x, \Omega_i) = \frac{\eta_i}{b} J_i e^{\frac{-(a-x)}{\nu_{max}}}, \quad i = M/4 + 1, \dots, M/2$$

$$\text{e } i = 3M/4 + 1, \dots, M, \quad (\text{A.56})$$

para $x \in [a_s, a]$.

Utilizando o mesmo procedimento do problema integrado em y , obtém-se o termo fonte do problema integrado em x ,

$$Q_x(y, \Omega_i) = \frac{a_s}{a} + \frac{\mu_i}{a} [M_i - L_i] e^{\frac{-(b-y)}{\gamma_{max}}}, \quad i = 1, \dots, M/4$$

$$\text{e } i = M/2 + 1, \dots, 3M/4, \quad (\text{A.57})$$

$$Q_x(y, \Omega_i) = \frac{a_s}{a} + \frac{\mu_i}{a} M_i e^{\frac{-(b-y)}{\gamma_{max}}}, \quad i = M/4 + 1, \dots, M/2$$

$$\text{e } i = 3M/4 + 1, \dots, M, \quad (\text{A.58})$$

para $y \in [0, b_s]$, e

$$Q_x(y, \Omega_i) = \frac{\mu_i}{a} [M_i - L_i] e^{\frac{-(b-y)}{\gamma_{max}}}, \quad i = 1, \dots, M/4$$

$$\text{e } i = M/2 + 1, \dots, 3M/4, \quad (\text{A.59})$$

$$Q_x(y, \Omega_i) = \frac{\mu_i}{a} M_i e^{\frac{-(b-y)}{\gamma m a x}}, \quad i = M/4 + 1, \dots, M/2$$

$$\text{e } i = 3M/4 + 1, \dots, M, \quad (\text{A.60})$$

para $y \in [b_s, b]$. Definidos os termos fontes dos problemas integrados, apresenta-se na seção a seguir a proposta de solução particular.

Solução particular via função de Green

Nesse trabalho as funções de Green são usadas para determinar as soluções particulares. Conforme Barichello et al. [24] e Prolo Filho [86] as soluções particulares para o problema integrado em y com $i = 1, \dots, M/2$, podem ser dadas por

$$\Psi_y^p(x, \Omega_i) = \sum_{j=1}^{M/2} \{A_j(x) \Phi_y(\nu_j, \Omega_i) + B_j(x) \Phi_y(\nu_j, \Omega_{i+M/2})\} \quad (\text{A.61})$$

e

$$\Psi_y^p(x, \Omega_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} \{A_j(x) \Phi_y(\nu_j, \Omega_{i+M/2}) + B_j(x) \Phi_y(\nu_j, \Omega_i)\}, \quad (\text{A.62})$$

onde

$$A_j(x) = \int_0^x \left\{ \sum_{\alpha=1}^M Q_y(\tau, \Omega_\alpha) A_{j,\alpha} \right\} e^{\frac{-(x-\tau)}{\nu_j}} d\tau \quad (\text{A.63})$$

e

$$B_j(x) = - \int_x^a \left\{ \sum_{\alpha=1}^M Q_y(\tau, \Omega_\alpha) B_{j,\alpha} \right\} e^{\frac{-(\tau-x)}{\nu_j}} d\tau. \quad (\text{A.64})$$

Os coeficientes $A_{j,\alpha}$ e $B_{j,\alpha}$ são calculados através do sistema linear

$$\mu_i \sum_{j=1}^{M/2} \{A_{j,\alpha} \Phi_y(\nu_j, \Omega_i) + B_{j,\alpha} \Phi_y(\nu_j, \Omega_{i+M/2})\} = \delta_{i,\alpha}, \quad (\text{A.65})$$

$$-\mu_i \sum_{j=1}^{M/2} \{A_{j,\alpha} \Phi_y(\nu_j, \Omega_{i+M/2}) + B_{j,\alpha} \Phi_y(\nu_j, \Omega_i)\} = \delta_{i+M/2,\alpha}, \quad (\text{A.66})$$

onde $\delta_{i,\alpha}$ com $i = 1, \dots, M$ e $\alpha = 1, \dots, M$ é a função delta de Kronecker.

Para o problema integrado em x , onde $i = 1, \dots, M/2$, as soluções particulares são dadas por

$$\Psi_x^p(y, \Omega_i) = \sum_{j=1}^{M/2} \{A_j(y) \Phi_x(\gamma_j, \Omega_i) + B_j(y) \Phi_x(\gamma_j, \Omega_{i+M/2})\} \quad (\text{A.67})$$

e

$$\Psi_x^p(y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} \{A_j(y)\Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + B_j(y)\Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_i)\}, \quad (\text{A.68})$$

onde

$$A_j(y) = \int_0^y \left\{ \sum_{\alpha=1}^M Q_x(\tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) C_{j,\alpha} \right\} e^{\frac{-(y-\tau)}{\gamma_j}} d\tau \quad (\text{A.69})$$

e

$$B_j(y) = - \int_y^b \left\{ \sum_{\alpha=1}^M Q_x(\tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) D_{j,\alpha} \right\} e^{\frac{-(\tau-y)}{\gamma_j}} d\tau. \quad (\text{A.70})$$

Os coeficientes $C_{j,\alpha}$ e $D_{j,\alpha}$ são calculados através do sistema linear

$$\eta_i \sum_{j=1}^{M/2} \{C_{j,\alpha} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_i) + D_{j,\alpha} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})\} = \delta_{i,\alpha}, \quad (\text{A.71})$$

$$-\eta_i \sum_{j=1}^{M/2} \{C_{j,\alpha} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + D_{j,\alpha} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_i)\} = \delta_{i+M/2,\alpha}, \quad (\text{A.72})$$

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

Denota-se como solução particular $\Psi_{y1}^p(x, \mathbf{\Omega}_i)$ para $x \in [0, a_s]$, $\Psi_{y2}^p(x, \mathbf{\Omega}_i)$ para $x \in [a_s, a]$ e $\Psi_{x1}^p(y, \mathbf{\Omega}_i)$ para $y \in [0, b_s]$, $\Psi_{x2}^p(y, \mathbf{\Omega}_i)$ para $y \in [b_s, b]$ com $i = 1, \dots, M$. Na próxima seção a solução geral do problema é estabelecida para possibilitar o cálculo dos coeficientes desconhecidos.

Solução geral do problema

Definido as expressões para as soluções homogêneas e particulares, expressa-se a solução geral do problema da seguinte forma

$$\Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^{M/2} [A_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) e^{-x/\nu_j} + B_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(a_s-x)/\nu_j}] + \Psi_{y1}^p(x, \mathbf{\Omega}_i), \quad (\text{A.73})$$

$$\Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} [A_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-x/\nu_j} + B_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(a_s-x)/\nu_j}] + \Psi_{y1}^p(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}), \quad (\text{A.74})$$

para $x \in [0, a_s]$,

$$\Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^{M/2} [C_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(x-a_s)/\nu_j} + D_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(a-x)/\nu_j}] + \Psi_{y2}^p(x, \mathbf{\Omega}_i), \quad (\text{A.75})$$

$$\Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} [C_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(x-a_s)/\nu_j} + D_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(a-x)/\nu_j}] + \Psi_{y2}^p(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}), \quad (\text{A.76})$$

para $x \in [a_s, a]$,

$$\Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^{M/2} [E_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_i) e^{-y/\gamma_j} + F_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(b_s-y)/\gamma_j}] + \Psi_{x1}^p(y, \mathbf{\Omega}_i), \quad (\text{A.77})$$

$$\Psi_x^h(y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} [E_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-y/\gamma_j} + F_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(b_s-y)/\gamma_j}] + \Psi_{x1}^p(y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}), \quad (\text{A.78})$$

para $y \in [0, b_s]$,

$$\Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^{M/2} [G_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(y-b_s)/\gamma_j} + H_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(b-y)/\gamma_j}] + \Psi_{x2}^p(y, \mathbf{\Omega}_i), \quad (\text{A.79})$$

$$\Psi_x^h(y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} [G_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(y-b_s)/\gamma_j} + H_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(b-y)/\gamma_j}] + \Psi_{x2}^p(y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}), \quad (\text{A.80})$$

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

Para definir o sistema linear que determinará os coeficientes desconhecidos é preciso integrar as equações de contorno de incidência e reflexivas. Multiplicando as equações (A.46) e (A.48) por $1/b$ e integrando em $y \in [0, b]$, obtém-se

$$\Psi_y(a, \mathbf{\Omega}_i) = 0, \quad i = M/2 + 1, \dots, M \quad (\text{A.81})$$

e

$$\Psi_y(0, \mathbf{\Omega}_i) = \Psi_y(0, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}), \quad i = 1, \dots, M/2, \quad (\text{A.82})$$

multiplicando as equações (A.45) e (A.47) por $1/a$ e integrando em $x \in [0, a]$, obtém-se

$$\Psi_x(b, \mathbf{\Omega}_i) = 0, \quad i = M/2 + 1, \dots, M \quad (\text{A.83})$$

e

$$\Psi_x(0, \mathbf{\Omega}_i) = \Psi_x(0, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}), \quad i = 1, \dots, M/2. \quad (\text{A.84})$$

Da mesma forma, multiplicando as equações (A.49) e (A.50) por $1/b$ e integrando em $y \in [0, b]$ e multiplicando as equações (A.51) e (A.52) por $1/a$ e integrando em $x \in [0, a]$, obtém-se

$$\Psi_y(0, \mathbf{\Omega}_i) = \frac{1}{b} \gamma_{max} (1 - e^{\frac{-b}{\gamma_{max}}}) M_i, \quad (\text{A.85})$$

$$\Psi_y(a, \Omega_i) = \frac{1}{b} \gamma_{max} (1 - e^{\frac{-b}{\gamma_{max}}}) L_i, \quad (\text{A.86})$$

$$\Psi_x(0, \Omega_i) = \frac{1}{a} \nu_{max} (1 - e^{\frac{-a}{\nu_{max}}}) J_i, \quad (\text{A.87})$$

$$\Psi_x(b, \Omega_i) = \frac{1}{a} \nu_{max} (1 - e^{\frac{-a}{\nu_{max}}}) I_i, \quad (\text{A.88})$$

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

Tendo a forma integrada das equações necessárias para montar o sistema, faz-se o acoplamento dos problemas integrados nas variáveis x e y , cuidando o uso das aproximações dos contornos e a associação das direções Ω_i entre os dois problemas.

Assim, aplica-se as soluções gerais equações (A.73) à (A.80) nas condições de contorno, equações (A.81) à (A.88), e considerando a condição de interface, obtém-se as equações do sistema para o problema integrado em y e as equações do sistema para o problema integrado em x , resultando num sistema linear $7M \times 7M$.

Resolvendo o sistema linear, encontra-se os $7M$ coeficientes necessários para determinar a solução dos fluxos angulares, que serão utilizados para calcular algumas quantidades de interesse, tal como a seguir.

Resultados Numéricos

As quantidades de interesse a serem calculadas são: fluxo escalar de nêutrons e taxa de absorção.

O fluxo escalar de nêutrons em ordenadas discretas é definido por

$$\phi(x) = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+M/2})] \quad (\text{A.89})$$

e

$$\phi(y) = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Psi_x(y, \Omega_k) + \Psi_x(y, \Omega_{k+M/2})]. \quad (\text{A.90})$$

Meio Homogêneo: fluxo escalar

Como primeiro problema teste considera-se o problema descrito por Tsai e Loyalka [109], definido em um domínio retangular $a = b = 1.0 \text{ cm}$, com uma fonte fixa isotrópica $Q(x, y) = 1.0$ na região $[0, 0.52] \times [0, 0.52]$, conforme representada na Figura A.4. Nesse problema a condição de simetria é considerada, onde as condições de contornos são do tipo

vácuo e reflexiva. Para a seção de choque macroscópica total considera-se, $\sigma_t = 1.0 \text{ cm}^{-1}$ e para a seção de choque de espalhamento, $\sigma_s = 0.5 \text{ cm}^{-1}$, $\sigma_s = 0.10 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0.05 \text{ cm}^{-1}$.

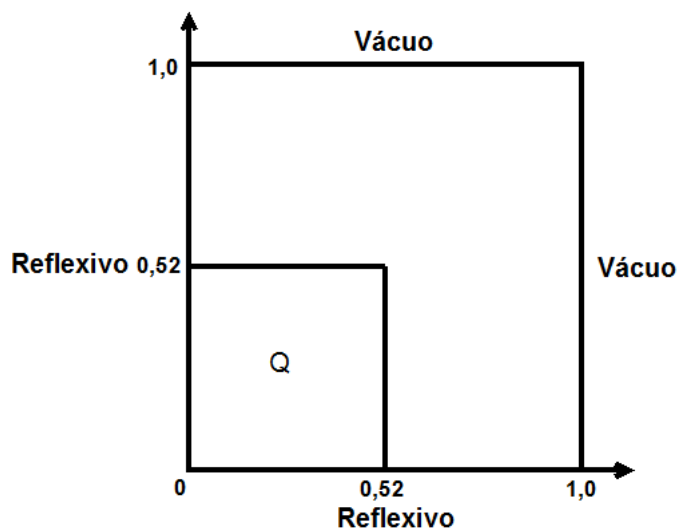


Figura A.4: Representação geométrica do domínio do problema.

A quantidade de interesse a ser analisada é o fluxo escalar de nêutrons calculado para os valores: $x = y = 0.5 \text{ cm}$, $x = y = 0.7 \text{ cm}$ e $x = y = 0.98 \text{ cm}$. A formulação desse problema é implementada para dois esquemas diferentes de quadraturas, quadratura Simétrica de Nível (LQ_N) e a quadratura $P_N T_N S_N$ [74]. Para os fluxos desconhecidos nos contornos utilizou-se aproximações por constantes e aproximações por exponenciais. Sendo que, os resultados obtidos para o fluxo escalar onde utilizou-se aproximações por constantes para os fluxos desconhecidos nos contornos e a quadratura LQ_N , conferem em todos os dígitos com o trabalho de Tres et al. [108]. Por questão de notação, chamou-se aqui: aproximações por constantes de ADO-Constante e, aproximações por exponenciais de ADO-Exponencial.

Compara-se os resultados com os existentes na literatura, Tsai e Loyalka [109], Tres et al. [108], Prolo Filho [86]. Em Tsai e Loyalka [109] a equação integral de transporte de nêutrons bidimensional é resolvida numericamente e os fluxos escalares são calculados em cada ponto. Nessa mesma referência, encontram-se resultados para fluxo escalar que foram gerados numericamente pelo código TWOTRAN-II [109].

No trabalho de Prolo Filho [86] não considera-se a simetria do problema, o domínio é cercado somente por condições do tipo vácuo, com fonte externa localizada na região central do domínio. Utiliza-se o método ADO para resolver as equações unidimensionais,

os fluxos desconhecidos nos contornos são aproximados por equações baseadas na solução homogênea do problema, os fluxos escalares são obtidos em termos dos fluxos angulares médios onde utilizou-se somente a quadratura LQ_N .

Em Tres et al. [108] considera-se a simetria do problema. Utiliza-se o método ADO para resolver as equações unidimensionais, os fluxos desconhecidos nos contornos são aproximados por constantes, os fluxos escalares são obtidos em termos dos fluxos angulares médios, sendo que utilizou-se a quadratura LQ_N . No entanto, a diferença deste trabalho e de Tres et al. [108] está na aproximação para os fluxos desconhecidos nos contornos e na utilização de novas quadraturas, uma vez que aqui utilizou-se aproximações por constantes e aproximações por exponenciais e dois tipos de quadratura LQ_N e $P_N T_N S_N$, enquanto que em Tres et al. [108] utilizou-se somente aproximações por constantes para os fluxos desconhecidos nos contornos e a quadratura LQ_N .

Os resultados obtidos para os fluxos escalares estão apresentados nas Tabelas A.1-A.3. A seguir faz-se a análise para cada valor de x e y , na qual compara-se os resultados com os disponíveis na literatura.

Verifica-se que, para $x = y = 0,5$ os fluxos escalares obtidos utilizando a quadratura LQ_N e o ADO-Exponencial apresentam uma concordância maior em dígitos significativos do que o ADO-Constante, quando faz-se a comparação aos resultados obtidos por Tsai e Loyalka [109]. Por outro lado, quando compara-se ADO-Constante e ADO-Exponencial com Três et al. [108] e Prolo Filho [86] quadratura LQ_N , obtém-se uma concordância de até dois dígitos significativos, nesse caso estamos comparando grandezas iguais. De um modo geral, este problema apresentou um comportamento semelhante aos dos trabalhos de Tres et al. [108] e Prolo Filho [86] em relação ao de Tsai e Loyalka [109].

Quando faz-se uma análise dos resultados obtidos pela quadratura $P_N T_N S_N$, observa-se que apesar dela permitir utilizar valores maiores para N , não obteve-se maiores ganhos significativos em dígitos em comparação aos que já se obtinha com a quadratura LQ_N , para as aproximações ADO-Constante e ADO-Exponencial. Nesse caso, obteve-se os mesmos dígitos significativos que já se obtinha com a quadratura LQ_N , quando comparados com a literatura.

Tabela A.1: Fluxo escalar, $x = 0.5$ cm, $y = 0.5$ cm

	Tsai e Loyalka[109]	TWOTRAN-II[109]	Tres et. al.[108]	Prolo Filho[86]	ADO Constante LQ_N	ADO Exponencial LQ_N	ADO Constante P_{NTNS_N}	ADO Exponencial P_{NTNS_N}
σ_s	$N = 5, 7, 9$ 11, 15	$N = 4, 8, 16$	$N = 2, 4, 6$ 8, 12, 16	$N = 2, 4, 6$ 8, 12, 16	$N = 2, 4, 6$ 8, 12, 16	$N = 2, 4, 6$ 8, 12, 16	$N = 2, 4, 6, 8, 12$ 16, 20, 26, 30	$N = 2, 4, 6, 8, 12$ 16, 20, 26, 30
0.50	0.359604 0.358422 0.357414 0.356678 0.355885	0.337412 0.337707 0.339794	0.3042 0.3206 0.3206 0.3205 0.3207 0.3213	0.2504 0.2786 0.2840 0.2880 0.2939 0.2983	0.3042 0.3206 0.3206 0.3205 0.3207 0.3213	0.3258 0.3371 0.3359 0.3351 0.3347 0.3351	0.3043 0.3203 0.3208 0.3206 0.3212 0.3221 0.3230 0.3240 0.3245	0.3258 0.3368 0.3359 0.3350 0.3350 0.3358 0.3366 0.3375 0.3380
0.10	0.258802 0.259150 0.259131 0.259030 0.258906	0.239483 0.241676 0.244032	0.2195 0.2264 0.2260 0.2259 0.2264 0.2270	0.1866 0.2019 0.2048 0.2073 0.2115 0.2147	0.2195 0.2264 0.2260 0.2259 0.2264 0.2270	0.2357 0.2365 0.2349 0.2342 0.2341 0.2345	0.2195 0.2263 0.2261 0.2261 0.2268 0.2278 0.2287 0.2296 0.2300	0.2357 0.2365 0.2348 0.2341 0.2343 0.2352 0.2360 0.2369 0.2374
0.05	0.250097 0.250569 0.250636 0.250591 0.250529	0.231102 0.233421 0.235787	0.2120 0.2183 0.2179 0.2179 0.2183 0.2189	0.1809 0.1952 0.1978 0.2003 0.2043 0.2075	0.2120 0.2183 0.2179 0.2179 0.2183 0.2189	0.2277 0.2279 0.2263 0.2256 0.2255 0.2260	0.2121 0.2183 0.2180 0.2180 0.2189 0.2198 0.2206 0.2215 0.2220	0.2277 0.2279 0.2262 0.2255 0.2258 0.2266 0.2274 0.2283 0.2288

Tabela A.2: Fluxo escalar, $x = 0.7$ cm, $y = 0.7$ cm

	Tsai e Loyalka[109]	TWOTRAN-II[109]	Tres et. al.[108]	Prolo Filho[86]	ADO Constante LQ_N	ADO Exponencial LQ_N	ADO Constante $P_N T_N S_N$	ADO Exponencial $P_N T_N S_N$
σ_s	$N = 5, 7, 9$ 11,15	$N = 4, 8, 16$	$N = 2, 4, 6$ 8, 12, 16	$N = 2, 4, 6$ 8, 12, 16	$N = 2, 4, 6$ 8, 12, 16	$N = 2, 4, 6$ 8, 12, 16	$N = 2, 4, 6, 8, 12$ 16, 20, 26, 30	$N = 2, 4, 6, 8, 12$ 16, 20, 26, 30
0.50	0.149801 0.139050 0.138539 0.138460 0.137048	0.157320 0.139581 0.133426	0.2108 0.1995 0.1901 0.1841 0.1784 0.1757	0.1799 0.1679 0.1530 0.1433 0.1363 0.1357	0.2108 0.1995 0.1901 0.1841 0.1784 0.1757	0.2250 0.2074 0.1961 0.1890 0.1823 0.1794	0.2107 0.2009 0.1900 0.1833 0.1769 0.1743 0.1731 0.1725 0.1723	0.2250 0.2091 0.1959 0.1880 0.1806 0.1777 0.1765 0.1759 0.1757
0.10	0.093601 0.083932 0.083759 0.083911 0.082774	0.100591 0.085131 0.078914	0.1446 0.1305 0.1225 0.1176 0.1129 0.1107	0.1273 0.1113 0.0990 0.0914 0.0859 0.0855	0.1446 0.1305 0.1225 0.1176 0.1129 0.1107	0.1558 0.1352 0.1258 0.1200 0.1148 0.1124	0.1446 0.1318 0.1224 0.1170 0.1117 0.1095 0.1085 0.1080 0.1079	0.1558 0.1367 0.1256 0.1193 0.1134 0.1110 0.1100 0.1095 0.1094
0.05	0.088990 0.079448 0.079301 0.079469 0.078362	0.095914 0.080662 0.074448	0.1388 0.1247 0.1169 0.1121 0.1075 0.1054	0.1226 0.1064 0.0944 0.0870 0.0817 0.0813	0.1388 0.1247 0.1169 0.1121 0.1075 0.1054	0.1497 0.1292 0.1199 0.1144 0.1092 0.1069	0.1389 0.1259 0.1168 0.1115 0.1063 0.1041 0.1032 0.1027 0.1026	0.1498 0.1306 0.1198 0.1136 0.1079 0.1056 0.1046 0.1041 0.1040

No caso de $x = y = 0.7 \text{ cm}$ tanto com a quadratura LQ_N quanto com a $P_N T_N S_N$, conseguiu-se até um dígito de concordância com os fluxos escalares de Tsai e Loyalka [109], no entanto, a mesma concordância é observada quando compara-se os trabalhos de Tres et al. [108] e Prolo Filho [86] com Tsai e Loyalka [109]. Quando faz-se a comparação do ADO-Constante e ADO-Exponencial, com Três et al. [108] e Prolo Filho [86], observa-se uma concordância de um a dois dígitos significativos. Para esse valor de x e y , pode-se concluir que o comportamento do ADO-Constante e ADO-Exponencial é semelhante ao comportamento dos resultados obtidos pelos trabalhos de Tres et al. [108] e Prolo Filho [86].

Na análise do último caso, $x = y = 0.98 \text{ cm}$, consegue-se com o ADO-Exponencial utilizando ambas as quadraturas, até um dígito de concordância com Tsai e Loyalka [109], sendo que isso não é observado quando compara-se os trabalhos de Tres et al. [108] e Prolo Filho [86] com Tsai e Loyalka [109]. Quando compara-se os resultados das aproximações ADO-Constante e ADO-Exponencial com Três et al. [108] e Prolo Filho [86], verifica-se até um dígito significativo. O uso da quadratura $P_N T_N S_N$, apesar de possibilitar o uso de maiores valores de N , não propiciou ganhos significativos em dígitos quando comparados com os fluxos escalares disponibilizados na literatura.

Os resultados e análises obtidos para esse problema em específico, motivaram a continuar os estudos, a fim de obter resultados comparativos entre grandezas médias iguais, em particular, resultados gerados por outros métodos nodais diferentes do problema trabalhado em Tsai e Loyalka.

Tabela A.3: Fluxo escalar, $x = 0.98$ cm, $y = 0.98$ cm

	Tsai e Loyalka[109]	Twotran-II[109]	Tres et. al.[108]	Prolo Filho[86]	ADO Constante LQ_N	ADO Exponencial LQ_N	ADO Constante P_{NTNS_N}	ADO Exponencial P_{NTNS_N}
σ_s	$N = 5, 7, 9$ 11, 15	$N = 4, 8, 16$	$N = 2, 4, 6$ 8, 12, 16	$N = 2, 4, 6$ 8, 12, 16	$N = 2, 4, 6$ 8, 12, 16	$N = 2, 4, 6$ 8, 12, 16	$N = 2, 4, 6, 8, 12$ 16, 20, 26, 30	$N = 2, 4, 6, 8, 12$ 16, 20, 26, 30
0.50	0.054250 0.053812 0.053558 0.053442 0.053413	0.045536 0.048085 0.052366	0.1124 0.0924 0.0855 0.0825 0.0810 0.0808	0.1294 0.1147 0.1043 0.0971 0.0893 0.0813	0.1124 0.0924 0.0855 0.0825 0.0810 0.0808	0.1073 0.0840 0.0759 0.0723 0.0703 0.0700	0.1125 0.0938 0.0855 0.0824 0.0809 0.0809 0.0811 0.0811 0.0811	0.1073 0.0857 0.0759 0.0721 0.0702 0.0700 0.0700 0.0699 0.0699
0.10	0.032577 0.032669 0.032655 0.032637 0.032622	0.025670 0.028969 0.032432	0.0725 0.0553 0.0505 0.0485 0.0477 0.0477	0.0917 0.0764 0.0684 0.0633 0.0580 0.0548	0.0725 0.0553 0.0505 0.0485 0.0477 0.0477	0.0659 0.0479 0.0426 0.0405 0.0396 0.0397	0.0725 0.0565 0.0505 0.0485 0.0478 0.0479 0.0481 0.0482 0.0482	0.0659 0.0492 0.0427 0.0405 0.0398 0.0399 0.0401 0.0401 0.0401
0.05	0.030823 0.030952 0.030956 0.030945 0.030931	0.023777 0.027299 0.030798	0.0690 0.0523 0.0476 0.0458 0.0450 0.0450	0.0883 0.0731 0.0654 0.0605 0.0554 0.0523	0.0690 0.0523 0.0476 0.0458 0.0450 0.0450	0.0624 0.0450 0.0400 0.0380 0.0373 0.0373	0.0691 0.0534 0.0476 0.0457 0.0451 0.0453 0.0455 0.0456 0.0456	0.0624 0.0463 0.0401 0.0381 0.0374 0.0376 0.0377 0.0378 0.0378