

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

**AVANÇOS NO MÉTODO LTS_N PARA CÁLCULO DE CRITICALIDADE E
DESENVOLVIMENTO DA PRIMEIRA VERSÃO DO CÓDIGO $LTSN$**

por

Gilberto Orengo de Oliveira

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, Maio de 2002

**AVANÇOS NO MÉTODO LTS_N PARA CÁLCULO DE CRITICALIDADE E
DESENVOLVIMENTO DA PRIMEIRA VERSÃO DO CÓDIGO $LTSN$**

por

Gilberto Orengo de Oliveira

Tese submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Marco Tullio Mena Barreto de Vilhena

Co-Orientador: Prof. Dr. Alexandre David Caldeira (CTA-IEAv/SP)

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Fernando Carvalho da Silva (COPPE-UFRJ/RJ)

Prof. PhD. Cláudio de Oliveira Graça (UFSM/RS)

Prof. Dra. Cynthia Feijó Segatto (UFRGS/RS)

Prof. Dr. Alberto Tamagna

Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 09 de Maio de 2002

RESUMO

AVANÇOS NO MÉTODO LTS_N PARA CÁLCULO DE CRITICALIDADE E DESENVOLVIMENTO DA PRIMEIRA VERSÃO DO CÓDIGO LTSN

O objetivo deste trabalho consiste no desenvolvimento de alguns avanços, teóricos e numéricos, no método LTS_N visando implementar a primeira versão de um código computacional, para resolver a equação de transporte utilizando formulação LTS_N na forma de multigrupos em geometria plana. Os avanços para o método LTS_N estão fundamentados na solução iterativa para o sistema de equações que constituem as condições de contorno, um novo método para a busca do valor de k_{eff} baseado no método da bissecção. O desenvolvimento desta metodologia permitiu realizar o cálculo muito rápido com altas ordens de quadratura e com esforço computacional muito reduzido. Juntos os avanços matemáticos e numéricos, implementados nesta primeira versão de um código fortran, tal como nos códigos já conhecidos permite solucionar a equação de transporte na forma de multigrupos, tanto para o cálculo direto como para o adjunto, com fontes arbitrárias. Este código utiliza de recursos computacionais da linguagem FORTRAN e as bibliotecas LAPACK, para a otimização de seus algoritmos, facilitando o desenvolvimento futuro. A validação deste trabalho foi feita utilizando dois problemas: um relativo ao fluxo angular e escalar, tanto para o fluxo direto como para o adjunto, cuja importância está relacionada com busca de convergência, relação de reciprocidade e comprovação da solução adjunta, e; um problema de criticalidade, para comprovar a eficácia do algoritmo de busca iterativa de k_{eff} e espessura crítica. Com este trabalho se abrem muitas possibilidades tanto teóricas como numéricas a investigar com o método LTS_N .

Autor: Gilberto Orengo de Oliveira

Orientador: Prof. Dr. Marco Tullio Mena Barreto de Vilhena

Co-Orientador: Prof. Dr. Alexandre David Caldeira (CTA-IEAv/SP)

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Tese de Doutorado em Engenharia

Porto Alegre, Maio de 2002.

ABSTRACT

ADVANCES TO LTS_N METHOD TO SOLVE CRITICALITY PROBLEMS AND DEVELOPMENT OF THE FIRST VERSION OF THE LTS_N CODE

The aim of this work is to develop some new advances for the LTS_N method in order to implement the first version of a computational code to solve problems in multigroup transport theory in slab geometry. Those advances for the LTS_N method are based on the iterative solution for the system of equations for the boundary conditions, a new method for searching the k_{eff} consisting on the application of the bisection method. The progress with this methodology has allowed very fast computations with very high order of quadrature and with reduced computation effort. Altogether the mathematical and numerical advances, implemented in this first version of a fortran code, like the traditional codes will make possible to solve transport problems in multigroup form, for direct and adjoint calculations with arbitrary sources, with the calculation of the multiplication factor and critical dimensions. The code uses modern resources of FORTRAN LANGUAGE (FORTRAN 90/95) and the LAPACK libraries, with algorithms optimization as well as facilitated implementation of future advances. To validate this work two problems allowing eight different solutions for the LTS_N method are implemented, demonstrating the possibility of monitoring the error with the quadrature order, fact that has mathematically been proved before i.e. the convergence of LTS_N method. With this work many other possibilities to improve the transport computations are open both for theoretical and numerical improvements.

Author: Gilberto Orengo de Oliveira

Orientador: Prof. Dr. Marco Tullio Mena Barreto de Vilhena

Co-Orientador: Prof. Dr. Alexandre David Caldeira (CTA-IEAv/SP)

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Tese de Doutorado em Engenharia

Porto Alegre, Maio de 2002.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
2	O MÉTODO LTS_N	5
2.1	A Equação de Transporte de Nêutrons	5
2.1.1	Tratamento da Variável Energia	6
2.1.2	Tratamento da Variável Angular	8
2.2	O Método LTS_N	9
2.2.1	Método da Decomposição de Schur associado com o Método do Parti- cionamento	11
2.2.2	Método da Diagonalização	17
2.3	Método LTS_N para Solução de Problemas de Multi-Regiões	20
2.4	Estudo da Criticalidade pelo Método LTS_N	22
2.4.1	Metodologia para Determinação dos Parâmetros Críticos da Equação Transcendental	23
2.5	A Solução Adjunta no Método LTS_N	25
2.5.1	A Equação de Transporte Adjunta	27
2.5.2	Solução Adjunta no Método LTS_N	28
3	CONTRIBUIÇÕES PARA O MÉTODO LTS_N	30
3.1	O Uso do Método Iterativo para Solução do Sistema de Equações Lineares ...	30
3.2	A Matriz LTS_N	32
3.3	Alteração na Varredura para Encontrar o Intervalo de Variação do k_{eff}	32
4	ESTUTURA BÁSICA DO CÓDIGO $LTSN$	34
4.1	A Entrada de Dados (Módulo $LTSN1.f90$)	36
4.2	Sub-rotina de Cálculo (Módulo $LTSN2.f90$)	40

4.3	A Saída de Resultados (Módulo LTSN3.f90)	42
5	RESULTADOS NUMÉRICOS	44
5.1	PROBLEMA 1 – Solução Adjunta	44
5.1.1	Problema 1–1: Convergência Numérica.....	45
5.1.2	Problema 1–2.....	46
5.1.3	Problema 1–3.....	47
5.1.4	Problema 1–4.....	48
5.1.5	Problema 1–5.....	49
5.1.6	Problema 1–6: Comparação de Esforço Computacional dos Métodos de Gauss e Iterativo.....	49
5.2	PROBLEMA 2 – Criticalidade.....	50
5.2.1	Problema 2–1: $1G/EI/Pu-239$	51
5.2.2	Problema 2–2: $2G/EI/Reator\ de\ Pesquisa-U$	51
5.2.3	Problema 2–3: $2G/EA/U-D_2O$	53
6	CONCLUSÕES E PROPOSTAS FUTURAS	54
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	56

ÍNDICE DE FIGURAS

Figura 2.1 – Representação esquemática dos Grupos de Energia	7
Figura 2.2 – Representação esquemática de uma placa com K regiões.....	20
Figura 4.1 – Esquema da Estrutura do Código LTSN	35
Figura 4.2 – Diagrama esquemático das sub-rotinas principais do Código LTSN e suas interdependências	35
Figura 5.1 – Comparação entre os métodos LTS_N ($N = 4$) e ANISN S_4P_1 para a solução adjunta.....	49

ÍNDICE DE TABELAS

Tabela 5.1 – Resultados Numéricos para Fontes Exponencial, Delta e Gaussiana.	45
Tabela 5.2 – Comparação entre o fluxo integrado devido a fonte $S_{gi}(0)$ e a solução adjunta na cela $(0, \mu_i, E_g)$ para a solução LTS_N ($N= 200$) do problema 1–2.	46
Tabela 5.3 – Seções de Choque Macroscópicas em multigrupo e formato P_1	47
Tabela 5.4 – Relação de reciprocidade: $\phi(x, \mu) = \phi^*(x, -\mu)$	48
Tabela 5.5 – Comparação de esforço Computacional entre os Métodos de Gauss e o Iterativo–GMRES	50
Tabela 5.6 – Dados Nucleares para o Pu-239 do problema 2–1.	51
Tabela 5.7 – Resultados obtidos para Problema 2–1 (Pu-239).	51
Tabela 5.8 – Dados nucleares, $g=2$, para o reator de pesquisa do problema 2–2.	52
Tabela 5.9 – Resultados obtidos para Problema 2–2.	52
Tabela 5.10 – Fluxos Escalares normalizados, para 2 grupos do Problema 2–2.	52
Tabela 5.11 – Dados nucleares para o sistema U-D ₂ O do problema 2–3.	53
Tabela 5.12 – Resultados obtidos para Problema 2–3 (U-D ₂ O).	53

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

No estudo da teoria de transporte um dos interesses é determinar a distribuição de partículas (nêutrons e/ou fótons) num meio, levando em conta o movimento das mesmas e suas interações com o meio. Outro interesse é o problema inverso, ou seja, dada uma resposta dosimétrica qualquer obter a distribuição de partículas responsável por essa resposta, tratado como um problema adjunto neste trabalho. As raízes da teoria de transporte estão na equação de Boltzmann [Lewis e W. F. Miller, 1984; Bell e Glasstone, 1985], inicialmente formulada para o estudo da teoria cinética dos gases. Nos anos 40, com S. Chandrasekhar [Chandrasekhar, 1960], no estudo de transporte de radiação em atmosferas estelares fundamentou, especialmente, a investigação de técnicas de solução da equação de transporte de radiação. Nos anos 70, e até o presente, se mostrou profícuo no sentido da solução da equação de transporte por métodos numéricos, destacando-se os métodos de ordenadas discretas multidimensionais (ANISN [Parsons, 1988], TORT-DORT e de Monte Carlo–MNCP). Estes e outros fatos históricos que apresentam a relevância na teoria de transporte podem ser encontrados nas referências [Duderstadt e Martin, 1979; Duderstadt e Hamilton, 1976; Stamm’ler e Abbate, 1983], bem como nas acima citadas.

Uma importante contribuição foi incorporada ao estudo de fenômenos de transporte no início dos anos 90: o surgimento do método LTS_N [Vilhena e Barichello, 1991; Vilhena et al., 1994], que resolve de forma analítica a aproximação S_N do problema de transporte, aplicando a transformada de Laplace na variável espacial em um domínio finito.

O método LTS_N consiste, basicamente, na aplicação da transformada de Laplace no sistema de equações diferenciais ordinárias gerado pela aproximação S_N . Disto resulta um sistema de equações algébricas, cuja matriz dos coeficientes contém a variável “ s ”. Para a inversão da matriz dos coeficientes, vários métodos foram desenvolvidos com o objetivo

de encontrar uma fórmula analítica. Primeiramente, Barichello [Barichello, 1992] propôs um algoritmo utilizando a estrutura da matriz LTS_N linearmente anisotrópica e o conceito de matriz inversa. A seguir, esta formulação foi generalizada para o caso anisotrópico por Oliveira [Oliveira, 1993]. Uma aproximação alternativa para este procedimento foi desenvolvida por Streck [Vilhena e Streck, 1992], que usou o método de Trzaska [Trzaska, 1987] para a inversão de uma matriz do tipo $(s\mathbf{A} + \mathbf{B})$, na resolução do método P_N . Mas estes métodos tinham uma limitação, só forneciam boas respostas em problemas com pequena ordem de quadratura ($N < 22$) ou pequeno grau de anisotropia [Brancher et al., 1998]. Para contornar esta dificuldade, inicialmente Cardona [Cardona e Vilhena, 1994] usou o método de particionamento para inverter a matriz LTS_N associada a um problema isotrópico. Este método foi implementado por Brancher [Brancher et al., 1998], chegando a $N = 400$. Mais tarde, surgiu a idéia de um método recursivo [Segatto et al., 1999a; Brancher et al., 1999; Segatto e Vilhena, 1997] para inverter uma matriz simbólica $(s\mathbf{I} + \mathbf{A})$, combinando a decomposição de Schur e o método do particionamento, com ordem de quadratura N até 400 em um supercomputador (CRAY Y-MP/2E e/ou J9/32). Levando em conta que a matriz \mathbf{A} associada à matriz simbólica $(s\mathbf{I} + \mathbf{A})$ é não degenerada, Segatto, Vilhena e Gomes [Segatto et al., 1999b] fizeram a decomposição de \mathbf{A} em uma matriz diagonal, que propiciou trabalhar com problemas com ordem de quadratura muito elevada ($N \approx 1000$), em um microcomputador tipo PC. Para evitar o problema de *overflow* devido ao caráter exponencial da solução LTS_N para problemas envolvendo elevadas ordens de quadratura ou grandes espessuras de placas, Barichello [Barichello, 1996] propôs uma mudança de base na solução, trocando x por $x - a$ para os termos exponenciais positivos, onde a é a espessura da placa. Este procedimento funciona muito bem para problemas homogêneos, mas é ineficiente para problemas não homogêneos porque há uma transferência do problema de *overflow* para o termo de fonte. Recentemente, Gonçalves [Gonçalves, 1999; Gonçalves et al., 2000] propôs uma nova formulação para a solução LTS_N que leva em conta a propriedade de invariância das direções discretas. Fisicamente isto significa considerar equivalentes partículas deslocando-se da direita para a esquerda ($\mu_i < 0$) e partículas deslocando-se da esquerda para a direita ($\mu_i > 0$). Com isso, o problema de *overflow* foi completamente eliminado. Outra importante contribuição foi de Pazos [Pazos e Vilhena, 1998b]-[Pazos e Vilhena, 1999], que provou a convergência do método LTS_N . Com isso o controle na precisão é possível, isto é, à medida que

a ordem de quadratura (N) cresce, o resultado obtido se aproxima do valor exato, a menos de erros inerentes a problemas computacionais (arredondamentos e/ou truncamentos). Uma comparação dos métodos de inversão matricial para problemas ($s\mathbf{A} + \mathbf{B}$) em problemas de transporte, pode ser encontrado no trabalho de Gomes [Gomes, 1999; Segatto et al., 1999b] e uma revisão atualizada e detalhada sobre o método LTS_N no recente trabalho de Segatto e Vilhena [Segatto et al., 1999c].

Existe uma grande quantidade de estudos realizados, e em andamento, quanto à aplicação do método LTS_N , mostrando com isso que o método é eficiente na solução de problemas como:

- 1) resolução de problemas unidimensionais com meio homogêneo e heterogêneo [Barichello e Vilhena, 1993; Tavares, 2000],
- 2) com multigrupos de energia [Vilhena e Barichello, 1995],
- 3) com espalhamento anisotrópico [Segatto et al., 1999a] e, com e sem simetria azimutal [Segatto e Vilhena, 1994; Brancher et al., 1999],
- 4) transferência radiativa [Brancher et al., 1999; Segatto et al., 1999c],
- 5) criticalidade (k_{eff} e espessura crítica) [Batistela et al., 1996; Batistela et al., 1997; Derivi, 1999],
- 6) função importância, através do cálculo adjunto [Gonçalves, 1999],

Com o objetivo de avançar no método LTS_N , este trabalho propõe: o uso de um método iterativo para encontrar as $N/2$ condições de contorno desconhecidas, solucionando o sistema algébrico de equações lineares a partir das condições de contorno do extremo oposto, em $x = a$; alteração na busca dos autovalores do estudo de criticalidade (k_{eff} e espessura crítica), o qual utiliza o método da bissecção; e o desenvolvimento de uma primeira versão do código **Código LTS_N** (ou **LTS_N Code**), para cálculo de transporte unidimensional utilizando a formulação LTS_N .

Com o objetivo de fornecer subsídios para avaliação do trabalho proposto, esta redação foi dividida em 6 capítulos: no capítulo 2, é descrita toda a formulação LTS_N para problemas envolvendo transporte de nêutrons; no capítulo 3 será abordado os avanços

propostos para o método LTS_N e, nos capítulos 4 e 5 são apresentados a descrição do Código $LTSN$ e os resultados numéricos, respectivamente. O último capítulo é dedicado às conclusões e propostas futuras de trabalhos.

CAPÍTULO 2

O MÉTODO LTS_N

Este capítulo é dedicado a apresentação do método LTS_N , na sua formulação atual. Será tratado o estudo do transporte de nêutrons, tanto em meios homogêneos (uma região) como heterogêneos (multi-regiões), seguido da formulação LTS_N para o estudo da criticalidade e da função adjunta (fluxo adjunto).

2.1 A Equação de Transporte de Nêutrons

A obtenção da equação de transporte de nêutrons pode ser feita através da histórica equação de Boltzmann da teoria cinética dos gases, que representa um balanço de partículas num elemento de volume do espaço de fase. Neste trabalho não será apresentado o desenvolvimento da obtenção da equação de transporte de nêutrons, pois está exaustivamente tratada na literatura pertinente [Lewis e W. F. Miller, 1984; Stamm'ler e Abbate, 1983]. Além disto, estará voltado para problemas estacionários com geometria plana e simetria azimutal, já que na grande maioria dos problemas de interesse a dependência do ângulo azimutal pode ser desprezada, sem perda de significado físico¹. A dependência do ângulo azimutal é importante, por exemplo, no estudo da transferência radiativa [Brancher et al., 1999; Segatto et al., 1999c]. Inicialmente, por simplicidade, será tratado o problema em meio homogêneo e, adiante será feita a generalização para multi-regiões. Assim, a equação de transporte de nêutrons unidimensional em coordenadas cartesianas, para uma única região, em estado

¹Isto só é válido para problemas com geometria plana

estacionário e com simetria azimutal, é dada por

$$\begin{aligned}
& \mu \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, E, \mu) + \Sigma_t(E) \psi(x, E, \mu) \\
&= 2\pi \int_0^\infty \int_{-1}^1 \Sigma_s(\mu_o, E' \rightarrow E) \psi(x, E', \mu') d\mu' dE' \\
&+ \chi(E) \int_0^\infty \frac{\nu(E')}{2k_{eff}} \Sigma_f(E') \int_{-1}^1 \psi(x, E', \mu') d\mu' dE' \\
&+ S(x, E, \mu), \tag{2.1}
\end{aligned}$$

sujeita às condições de contorno

$$\psi(0, E, \mu) = f(E, \mu), \quad \mu > 0 \tag{2.1a}$$

$$\psi(a, E, \mu) = g(E, \mu), \quad \mu < 0, \tag{2.1b}$$

onde $\psi(x, E, \mu)$ é o fluxo angular na direção definida por μ , na posição x com energia entre E e $E + dE$; $\mu_o \equiv \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}' = \cos \gamma$ é o cosseno do ângulo de espalhamento; $\Sigma_t(E)$ é a seção de choque macroscópica total; $\Sigma_s(\mu', E' \rightarrow E)$ é a seção de choque macroscópica de espalhamento; $\Sigma_f(E')$ é a seção de choque macroscópica de fissão; $\chi(E)$ é o espectro de fissão; $\nu(E')$ é o número médio de nêutrons oriundos da fissão; k_{eff} é o fator de multiplicação efetivo; $S(x, E, \mu)$ é o termo de fonte de nêutrons e, $f(E, \mu)$ e $g(E, \mu)$ são os fluxos incidentes nas fronteiras. Como pode ser observado, as seções de choque macroscópicas são consideradas independentes da posição. Para formalizar a solução da Eq.(2.1) pelo método LTS_N serão consideradas a seguir as aproximações necessárias às variáveis energia (E) e angular (μ).

2.1.1 Tratamento da Variável Energia

Para tratarmos a dependência do fluxo neutrônico com a energia, será utilizado a aproximação de multigrupos. Esta aproximação consiste em discretizar a variável energia em intervalos discretos, conforme o esquema da Figura 2.1. Esta discretização é feita de maneira a concordar fisicamente com o fato dos nêutrons, devido aos sucessivos espalhamentos, perderem energia ($E_{g-1} > E_g$) durante o movimento no meio e, matematicamente pelo

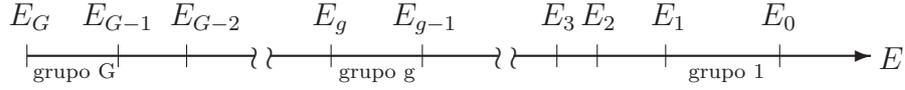


Figura 2.1 – Representação esquemática dos Grupos de Energia

fato de sempre resolvermos a equação de transporte discretizada partindo das mais altas energias e, sucessivamente, até a mais baixa energia. Desta forma, o fluxo angular de nêutrons no grupo g é definido por

$$\psi_g(x, \mu) \equiv \int_{E_g}^{E_{g-1}} \psi(x, \mu, E) dE = \int_g \psi(x, \mu, E) dE, \quad (2.2)$$

e as constantes de grupos, são dados por

$$\Sigma_{t_g} \equiv \psi_g^{-1}(x, \mu) \int_g dE \Sigma_t(E) \psi(x, \mu, E), \quad (2.2a)$$

$$\Sigma_{s_{g'g}}(\mu_o) \equiv \psi_g^{-1}(x, \mu) \int_g dE' \Sigma_s(\mu_o, E' \rightarrow E) \psi(x, \mu, E'), \quad (2.2b)$$

$$(\nu \Sigma_f)_{g'} \equiv \psi_g^{-1}(x, \mu) \int_g dE' \nu(E') \Sigma_f(E') \psi(x, \mu, E'), \quad (2.2c)$$

$$S_g \equiv \int_g dE S(x, \mu, E), \quad (2.2d)$$

$$\chi_g \equiv \int_g \chi(E) dE. \quad (2.2e)$$

Com estas considerações, a Eq.(2.1) toma a forma

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} \psi_g(x, \mu) + \Sigma_{t_g} \psi_g(x, \mu) &= 2\pi \int_{-1}^1 \sum_{g'=1}^G \Sigma_{s_{g'g}}(\mu_o) \psi_{g'}(x, \mu') d\mu' \\ &+ \chi_g \sum_{g'=1}^G \frac{(\nu \Sigma_f)_{g'}}{2 k_{eff}} \int_{-1}^1 \psi_{g'}(x, \mu') d\mu' + S_g(x, \mu), \end{aligned} \quad (2.3)$$

com $g = 1 : G$.

2.1.2 Tratamento da Variável Angular

Para tratamento da variável angular μ será utilizado o método das ordenadas discretas, cujo estudo começou com a análise de transferência radiativa em problemas de atmosferas estelares [Chandrasekhar, 1960]. Escolhendo as direções discretas e os seus pesos como $\{\mu_m\}$ e $\{\omega_m\}$, respectivamente, podemos aproximar o termo integral da Eq.(2.1) por

$$\int_{-1}^{+1} \psi(x, E, \mu) d\mu \cong \sum_{i=1}^N \omega_i \psi(x, E, \mu_i). \quad (2.4)$$

É utilizada a fórmula de quadratura de Gauss como escolha para o conjunto de quadratura $\{\mu_m, \omega_m\}$, cujas raízes usualmente são ordenadas de forma decrescente,

$$-1 < \mu_N < \cdots < \mu_{\frac{N}{2}+1} < 0 < \mu_{\frac{N}{2}} < \cdots < \mu_2 < \mu_1 < 1, \quad \text{com } N \text{ par,}$$

e satisfaz aos seguintes critérios:

- a) invariância de projeção, em torno de $\mu = 0$, isto é, $\mu_{N+1-n} = -\mu_n$, com $n = 1, 2, \dots, \frac{N}{2}$ e, $\omega_{N+1-n} = \omega_n$,
- b) garante o fluxo escalar positivo, com $\omega_i > 0$, para todo i e,
- c) fornece uma boa precisão nas integrais angulares aproximadas, garantido que se $\psi(x, E, \mu)$ é um polinômio de baixa ordem em μ , então a fórmula de quadratura da Eq.(2.4) deve dar um valor exato para a integral.

Para a geometria plana, o fluxo angular depende somente do cosseno diretor (ou cosseno do ângulo do espalhamento) $\mu_o = \hat{\Omega} \cdot \hat{\Omega}'$, então o *kernel* de espalhamento pode ser e, usualmente é feito, aproximado por uma série truncada de polinômios de Legendre,

$$\begin{aligned} \Sigma_s(\mu_o, E' \rightarrow E) &\cong \sum_{\ell=0}^L \frac{(2\ell+1)}{4\pi} \Sigma_s^\ell(E' \rightarrow E) P_\ell(\mu) P_\ell(\mu') \cos(m(\varphi - \varphi')) \\ &\cong \sum_{\ell=0}^L \frac{(2\ell+1)}{4\pi} \Sigma_s^\ell(E' \rightarrow E) P_\ell(\mu_o), \end{aligned} \quad (2.5)$$

onde, foi usado o Teorema da Adição dos polinômios de Legendre, para simetria azimutal,

$$P_\ell(\mu_o) = P_\ell(\mu) P_\ell(\mu').$$

Como exemplo, para $L = 0$, o espalhamento no sistema de laboratório é isotrópico e, para $L = 1$ é um espalhamento linearmente anisotrópico. Finalmente, a Eq.(2.1), com os tratamentos adequados às variáveis energia e angular, fica

$$\begin{aligned} \mu_i \frac{d}{dx} \psi_{gi}(x) + \Sigma_{t_g} \psi_{gi}(x) &= \frac{1}{2} \sum_{g'=1}^G \sum_{j=1}^N \sum_{\ell=0}^L (2\ell + 1) \Sigma_{s_{g'g}}^\ell P_\ell(\mu_o) \omega_j \psi_{g'j}(x) \\ &+ \frac{\chi_g}{2k_{eff}} \sum_{g'=1}^G (\nu \Sigma_f)_{g'} \sum_{j=1}^N \omega_j \psi_{g'j}(x) \end{aligned} \quad (2.6)$$

com $i = 1 : N$ e $g = 1 : G$. Considerando que as seções de choque serão lidas de uma biblioteca de seções de choque previamente preparada, então por simplicidade, temos

$$\Sigma_{g'g}^L \cong \sum_{\ell=0}^L (2\ell + 1) \Sigma_{s_{g'g}}^\ell P_\ell(\mu_o), \quad (2.7)$$

que será a seção de choque de espalhamento, do grupo g' para o grupo g de acordo com a ordem de espalhamento L desejada. Desta forma, a Eq.(2.6) ficará

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \psi_{gi}(x) + \frac{\Sigma_{t_g}}{\mu_i} \psi_{gi}(x) &= \frac{1}{2\mu_i} \sum_{g'=1}^G \sum_{j=1}^N \Sigma_{g'g}^L \omega_j \psi_{g'j}(x) \\ &+ \frac{\chi_g}{2k_{eff}} \frac{1}{\mu_i} \sum_{g'=1}^G (\nu \Sigma_f)_{g'} \sum_{j=1}^N \omega_j \psi_{g'j}(x) + \frac{S_{gi}(x)}{\mu_i}, \end{aligned} \quad (2.8)$$

a qual fornece um conjunto de GN equações diferenciais ordinárias de primeira ordem, com as condições de contorno

$$\psi_{gn}(0) = f_{gn}, \quad n = 1 : \frac{N}{2} \Leftrightarrow \mu > 0 \quad (2.8a)$$

$$\psi_{gn}(a) = g_{gn}, \quad n = 1 : \frac{N}{2} \Leftrightarrow \mu < 0. \quad (2.8b)$$

2.2 O Método LTS_N

Como referido anteriormente, o método LTS_N consiste, basicamente, na aplicação da transformada de Laplace no sistema de equações diferenciais ordinárias gerado pela aproximação multigrupo-S_N (Eq. 2.8), resultando em um sistema de equações algébricas simbólicas (dependentes de “ s ”). Após a solução analítica deste sistema, aplica-se a inversa da trans-

formada de Laplace. Nos parágrafos a seguir, apresenta-se a formulação do método LTS_N para solução de problemas de transporte em geometria de placa e modelo multigrupo.

As equações (2.8) podem ser descritas na forma matricial,

$$\frac{d}{dx}\Phi(x) + \mathbf{M}\Phi(x) = \mathbf{Q}(x), \quad (2.9)$$

com as condições de contorno, agora escritas como

$$\Phi_1(0) = \mathbf{f} \quad \text{e} \quad \Phi_2(a) = \mathbf{g}, \quad (2.9a)$$

onde \mathbf{M} é uma matriz ($GN \times GN$), cujos elementos podem ser descritos por G^2 blocos ou submatrizes $\mathcal{M}(N \times N)$, dados por:

$$\mathcal{M}_{g'g}(ij) = \begin{cases} -\frac{\Sigma_{t_g}}{\mu_i} + \frac{\omega_j}{2\mu_i} \left(\Sigma_{g'g}^L + \frac{\chi_{g'}\nu_{g'}\Sigma_{f_{g'}}}{k_{eff}} \right), & \text{se } i = j \text{ e } g = g', \\ \frac{\omega_j}{2\mu_i} \left(\Sigma_{g'g}^L + \frac{\chi_{g'}\nu_{g'}\Sigma_{f_{g'}}}{k_{eff}} \right), & \text{nos demais casos,} \end{cases} \quad (2.10)$$

para $i = 1 : N$, $j = 1 : N$, $g = 1 : G$ e $g' = 1 : G$. Um exemplo da matriz \mathbf{M} , para $G = 2$, pode ser visto abaixo,

$$\mathbf{M} = \begin{bmatrix} \mathcal{M}_{11}(ij) & \mathcal{M}_{12}(ij) \\ \mathcal{M}_{21}(ij) & \mathcal{M}_{22}(ij) \end{bmatrix}. \quad (2.11)$$

Os vetores coluna $\Phi(x)$ e $\mathbf{Q}(x)$, são, respectivamente,

$$\Phi(x) = \left[\phi_{11}(x) \dots \phi_{G1}(x) \dots \phi_{1N}(x) \dots \phi_{GN}(x) \right]^T \quad (2.12)$$

e

$$\mathbf{Q}(x) = \left[\frac{S_{11}(x)}{\mu_1} \dots \frac{S_{G1}(x)}{\mu_1} \dots \frac{S_{1N}(x)}{\mu_N} \dots \frac{S_{GN}(x)}{\mu_N} \right]^T. \quad (2.13)$$

Quando se aplica a transformada de Laplace[Arfken, 1985], a equação (2.9) fica

$$s\bar{\Phi}(s) - \Phi(0) - \mathbf{A}\bar{\Phi}(s) = \bar{\mathbf{Q}}(s), \quad (2.14)$$

ou,

$$\bar{\Phi}(s) = (s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\Phi(0) + (s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\bar{\mathbf{Q}}(s), \quad (2.15)$$

onde \mathbf{I} é a matriz identidade e $\mathbf{A} = -\mathbf{M}$. O fluxo angular é obtido pela inversa da transformada de Laplace, ou seja,

$$\Phi(x) = \mathcal{L}^{-1}\left\{(s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\right\}\Phi(0) + \mathcal{L}^{-1}\left\{(s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\right\} * \mathbf{Q}(x), \quad (2.16)$$

ou

$$\Phi(x) = \mathbf{B}(x)\Phi(0) + \mathbf{H}(x), \quad (2.17)$$

onde o asterisco designa a convolução, que é definida como

$$\mathbf{H}(x) = \int_0^x \mathbf{B}(x - \zeta)\mathbf{Q}(\zeta)d\zeta \quad (2.18)$$

e $\mathbf{B}(x)$ é dado por

$$\mathbf{B}(x) = \mathcal{L}^{-1}\left\{(s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\right\}. \quad (2.19)$$

Neste ponto, tem-se duas maneiras para encontrar a inversão da matriz $(s\mathbf{I} - \mathbf{A})$ e, conseqüentemente a obtenção de $\mathbf{B}(x)$. A primeira, pelo método da decomposição de Schur associado com o método do particionamento e, a segunda, pelo método da diagonalização. As duas maneiras serão analisadas a seguir.

2.2.1 Método da Decomposição de Schur associado com o Método do Particionamento

Para este fim, parte-se de $(s\mathbf{I} - \mathbf{A})$, onde os elementos da matriz \mathbf{A} não dependem do parâmetro "s". Para se encontrar a inversa da matriz $(s\mathbf{I} - \mathbf{A})$, é aplicado o esquema da

decomposição de Schur[Golup e Loan, 1989] na matriz \mathbf{A} , produzindo

$$\mathbf{A} = \mathbf{Q}\mathbf{U}\mathbf{Q}^T, \quad (2.20)$$

onde, \mathbf{U} é uma matriz triangular superior e \mathbf{Q} é uma matriz unitária. Desta forma, a inversa da matriz $(s\mathbf{I} - \mathbf{A})$, usando esta decomposição, fica

$$\begin{aligned} (s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} &= \left[\left(s\mathbf{Q}\mathbf{Q}^T - \mathbf{Q}\mathbf{U}\mathbf{Q}^T \right) \right]^{-1} = \left[\left(\mathbf{Q}(s\mathbf{I} - \mathbf{U})\mathbf{Q}^T \right) \right]^{-1} \\ &= \mathbf{Q}(s\mathbf{I} - \mathbf{U})^{-1}\mathbf{Q}^T. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Assim, a matriz a ser invertida é da forma

$$\mathbf{S}_k = \begin{bmatrix} s - u_{11} & u_{12} & u_{13} & \cdots & u_{1GN} \\ 0 & s - u_{22} & u_{23} & \cdots & u_{2GN} \\ 0 & 0 & s - u_{33} & \cdots & u_{3GN} \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & \cdots & s - u_{GNGN} \end{bmatrix}. \quad (2.22)$$

Para inverter a matriz $(s\mathbf{I} - \mathbf{U})$ será usado o método do particionamento, que consiste na inversão de matrizes em blocos[Gomes, 1999],

$$\begin{bmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{D} \\ \mathbf{0} & \mathbf{E} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}^{-1} & -\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{E}^{-1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{E}^{-1} \end{bmatrix}. \quad (2.23)$$

Agora, estabelece-se o processo recursivo tal que

$$\mathbf{S}_1 = [s - u_{11}], \quad (2.24)$$

$$\mathbf{S}_2 = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_1 & u_{12} \\ 0 & s - u_{22} \end{bmatrix}, \quad (2.25)$$

e para k -ésima matriz, tem-se:

$$\mathbf{S}_k = \begin{bmatrix} & \begin{bmatrix} u_{1k} \\ u_{2k} \\ \vdots \\ u_{(k-1)k} \end{bmatrix} \\ \mathbf{S}_{k-1} & \\ & \\ \mathbf{0} & s - u_{kk} \end{bmatrix}, \quad k = 1 : GN. \quad (2.26)$$

Aplicando a fórmula 2.23 na seqüência de matrizes acima, obtém-se:

$$\mathbf{S}_1^{-1} = \left[\frac{1}{s - u_{11}} \right], \quad (2.27)$$

$$\mathbf{S}_2^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_1^{-1} & -\mathbf{S}_1^{-1} \left[\frac{u_{12}}{s - u_{22}} \right] \\ 0 & \frac{1}{s - u_{22}} \end{bmatrix}, \quad (2.28)$$

$$\mathbf{S}_k^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_{k-1}^{-1} & \frac{-\mathbf{S}_{k-1}^{-1}}{s - u_{kk}} \begin{bmatrix} u_{1k} \\ u_{(k-1)k} \end{bmatrix} \\ \mathbf{0} & \frac{1}{s - u_{kk}} \end{bmatrix}. \quad (2.29)$$

Para encontrar-se a transformada inversa de Laplace, usando o método de expansão de Heaviside, precisa-se conhecer uma fórmula para o cálculo da matriz adjunta. Sabendo que o determinante da matriz triangular, \mathbf{S}_k , é dado por

$$\det(\mathbf{S}_k) = \prod_{i=1}^k (s - u_{ii}), \quad (2.30)$$

tem-se que

$$Adj(\mathbf{S}_k) = \det(\mathbf{S}_k) \cdot \mathbf{S}_k^{-1} = \begin{bmatrix} Adj(\mathbf{S}_{k-1})(s - u_{kk}) & -Adj(\mathbf{S}_{k-1}) \begin{bmatrix} u_{1k} \\ \vdots \\ u_{(k-1)k} \end{bmatrix} \\ \mathbf{0} & \det(\mathbf{S}_{k-1}) \end{bmatrix}. \quad (2.31)$$

Desta forma, pela fórmula de inversão de Heaviside

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1}\{(s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\} &= \mathbf{Q}\mathcal{L}^{-1}\{(s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\}\mathbf{Q}^T \\ &= \mathbf{Q} \sum_{k=1}^{GN} e^{s_k x} \sum_{i=1}^{m_k} \frac{\mathbf{P}_k^i x^{m_k-i}}{(m_k - 1)!} \mathbf{Q}^T, \end{aligned} \quad (2.32)$$

onde m_k é a multiplicidade da raiz s_k e,

$$\mathbf{P}_k^i = \frac{1}{(i-1)!} \lim_{s \rightarrow s_k} \frac{d^{i-1}}{ds} (s - s_k)^{m_k} \frac{Adj(\mathbf{S}_{GN})}{\prod_{k=1}^{GN} (s - s_k)}. \quad (2.33)$$

No caso da equação de transporte, sem o termo de fissão², todos os autovalores são simétricos e distintos entre si, logo a expressão (2.32) fica reduzida a:

$$\mathcal{L}^{-1}\{(s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\} = \mathbf{Q} \left(\sum_{k=1}^{GN} \mathbf{P}^k e^{s_k x} \right) \mathbf{Q}^T, \quad (2.34)$$

onde

$$\mathbf{P}^k = \frac{Adj(\mathbf{S}_{GN})}{\frac{d}{ds} \det(\mathbf{S}_{GN})} \Big|_{s=s_k} = \frac{Adj(\mathbf{S}_{GN})}{\prod_{k=1}^{GN} (s - s_k)}. \quad (2.35)$$

Substituindo a expressão (2.34) na Eq.(2.16), temos uma solução para o fluxo angular, utilizando o método de Schur associado com o método de particionamento:

$$\Phi(x) = \mathbf{Q} \left(\sum_{k=1}^{GN} \mathbf{P}^k e^{s_k x} \right) \mathbf{Q}^T \Phi(0) + \mathbf{Q} \left(\sum_{k=1}^{GN} \mathbf{P}^k e^{s_k x} \right) \mathbf{Q}^T * \mathbf{Q}(x). \quad (2.36)$$

²Quando há fissão, os autovalores são simétricos, reais, imaginários puros e complexos

Numa notação matricial em blocos, a equação acima (2.36), fica

$$\begin{bmatrix} \Phi_1(x) \\ \Phi_2(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}(x) & \mathbf{B}_{12}(x) \\ \mathbf{B}_{21}(x) & \mathbf{B}_{22}(x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1(0) \\ \Phi_2(0) \end{bmatrix} + \int_0^x d\zeta \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}(x-\zeta) & \mathbf{B}_{12}(x-\zeta) \\ \mathbf{B}_{21}(x-\zeta) & \mathbf{B}_{22}(x-\zeta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1(\zeta) \\ \mathbf{Q}_2(\zeta) \end{bmatrix} \quad (2.37)$$

sujeita as condições de contorno

$$\Phi_1(0) = \mathbf{f}_1 \quad (2.37a)$$

$$\Phi_2(a) = \mathbf{g}_2 \quad (2.37b)$$

onde, nos vetores, o índice 1 e 2 referem-se às $N/2$ direções positivas e $N/2$ direções negativas respectivamente.

Vale notar que o vetor $\Phi(0)$ não está completamente determinado, tendo-se em vista que só $N/2$ componentes, referentes a $\mu > 0$, são conhecidas. As outras $N/2$ condições para $\mu < 0$ devem ser obtidas através da solução de um sistema algébrico de equações lineares a partir das condições de contorno em $x = a$.

Como foi mencionado anteriormente, para cálculo envolvendo elevada ordem de quadratura ou grande espessura de placa existe um problema de *overflow* na solução. Numa tentativa de resolver este problema foi sugerido, por Barichelo[Barichello, 1996], uma mudança de base, trocando a variável dos argumentos relativos às raízes positivas de x por $(x - a)$. Todavia, permanece o problema de *overflow* no componente particular da solução LTS_N , exigindo que este seja construído por outro método. Nesta construção, a forma funcional da fonte estará sempre sujeita às dificuldades e restrições do método como, por exemplo, no uso do método coeficientes a determinar. Nesta formulação, a solução LTS_N tem a configuração:

$$\begin{bmatrix} \Phi_1(x) \\ \Phi_2(x) \end{bmatrix} = \left\{ \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^+(x-a) & \mathbf{B}_{12}^+(x-a) \\ \mathbf{B}_{21}^+(x-a) & \mathbf{B}_{22}^+(x-a) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^-(x) & \mathbf{B}_{12}^-(x) \\ \mathbf{B}_{21}^-(x) & \mathbf{B}_{22}^-(x) \end{bmatrix} \right\} \begin{bmatrix} \mathbf{H}_1 \\ \mathbf{H}_2 \end{bmatrix} \\ + \begin{bmatrix} \text{SOLUÇÃO PARTICULAR CONSTRUÍDA} \\ \text{A PARTIR DE ALGUM MÉTODO} \end{bmatrix}, \quad (2.38)$$

onde \mathbf{H}_1 e \mathbf{H}_2 são vetores modificados em conseqüência da mudança de base, \mathbf{B}^+ é o componente da matriz $\mathbf{B}(x)$ relativo às raízes positivas e \mathbf{B}^- , o componente relativo às raízes negativas.

Mais recentemente, este problema foi abordado e solucionado por Gonçalves, Segatto e Vilhena[Gonçalves et al., 2000], onde foi usado a propriedade da invariância na solução da equação de transporte. A formulação proposta, quando comparada a (2.38), mantém a decomposição da matriz $\mathbf{B}(x)$ em componentes relativo às raízes positivas, \mathbf{B}^+ , e negativas, \mathbf{B}^- . A diferença consiste em não considerar a mudança $(x-a)$ como um artifício matemático, mas sim, como parte efetiva da solução justificada pela invariância de projeção e, como tal, extensiva aos demais termos relacionados a \mathbf{B}^+ . Isto passa pela identificação, através da simetria imposta pela invariância, do par $(x-a, -\mu)^3$ com a parte da solução que compreende \mathbf{B}^+ e, (x, μ) com a que compreende \mathbf{B}^- . Desta forma $\mathbf{B}(x)$ é reescrito da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \mathbf{B}(x) &= \mathcal{L}^{-1}\left\{(s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}\right\} = \mathbf{Q} \left(\sum_{k=1}^{GN/2} \mathbf{P}^k e^{s_k x} \right) \mathbf{Q}^T + \mathbf{Q} \left(\sum_{k=\frac{N}{2}+1}^{GN} \mathbf{P}^k e^{s_k x} \right) \mathbf{Q}^T \\ &= \mathbf{B}^+(x) + \mathbf{B}^-(x), \end{aligned} \quad (2.39)$$

onde os autovalores s_k , $k = 1 : N/2$, são as raízes positivas do determinante da matriz $(s\mathbf{I} - \mathbf{A})$. Deste modo, a solução LTS_N , homogênea e particular, é posta explicitamente como uma superposição linear do fluxo angular referente a direções negativas ($\mu < 0$) e positivas ($\mu > 0$). Ou seja,

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \Phi_1(x) \\ \Phi_2(x) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^+(x-a) & \mathbf{B}_{12}^+(x-a) \\ \mathbf{B}_{21}^+(x-a) & \mathbf{B}_{22}^+(x-a) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1(a) \\ \Phi_2(a) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^-(x) & \mathbf{B}_{12}^-(x) \\ \mathbf{B}_{21}^-(x) & \mathbf{B}_{22}^-(x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1(0) \\ \Phi_2(0) \end{bmatrix} \\ &+ \int_a^x d\zeta \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^+(x-\zeta) & \mathbf{B}_{12}^+(x-\zeta) \\ \mathbf{B}_{21}^+(x-\zeta) & \mathbf{B}_{22}^+(x-\zeta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1(\zeta) \\ \mathbf{Q}_2(\zeta) \end{bmatrix} + \int_0^x d\zeta \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^-(x-\zeta) & \mathbf{B}_{12}^-(x-\zeta) \\ \mathbf{B}_{21}^-(x-\zeta) & \mathbf{B}_{22}^-(x-\zeta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1(\zeta) \\ \mathbf{Q}_2(\zeta) \end{bmatrix}, \end{aligned} \quad (2.40)$$

onde $\Phi_1(0)$ e $\Phi_2(a)$ são as condições de contorno do problema (conforme 2.37a-b) e $\Phi_2(0)$ e $\Phi_1(a)$ devem ser determinadas por um sistema linear de GN equações algébricas construído

³O sinal da mudança de $(a-x)$ para $(x-a)$ está implícito na anti-simetria das raízes s_k .

a partir das condições de contorno na forma:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^+(-a) & \mathbf{B}_{12}^-(0) \\ \mathbf{B}_{21}^+(0) & \mathbf{B}_{22}^-(a) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1(a) \\ \Phi_2(0) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mathbf{I} - \mathbf{B}_{11}^-(0) & \mathbf{I} - \mathbf{B}_{12}^+(-a) \\ \mathbf{I} - \mathbf{B}_{21}^-(a) & \mathbf{I} - \mathbf{B}_{22}^+(0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1(0) \\ \Phi_2(a) \end{bmatrix} \\ &+ \int_0^a d\zeta \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^+(x - \zeta) & \mathbf{B}_{12}^+(x - \zeta) \\ -\mathbf{B}_{21}^-(x - \zeta) & -\mathbf{B}_{22}^-(x - \zeta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1(\zeta) \\ \mathbf{Q}_2(\zeta) \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Nesta formulação, todas as exponenciais que aparecem na solução têm argumentos negativos. E, em relação à (2.38), a formulação proposta facilita sobremaneira o tratamento da solução particular ao construí-la, de forma geral, dentro da solução LTS_N . A forma funcional da fonte só tem as restrições comuns à integração analítica ou numérica. Além disto, o fluxo angular pode ser determinado no contorno resolvendo estritamente o sistema de equações algébricas (2.41).

2.2.2 Método da Diagonalização

Para calcular a inversão de $(s\mathbf{I} - \mathbf{A})$, pelo método da diagonalização, observa-se que os autovalores da matriz LTS_N são não-degenerados, assim a matriz \mathbf{A} pode ser decomposta em uma matriz diagonal pela seguinte relação:

$$\mathbf{A} = \mathbf{X}\mathbf{D}\mathbf{X}^{-1}, \quad (2.42)$$

onde \mathbf{D} é uma matriz diagonal composta dos autovalores de \mathbf{A} e, \mathbf{X} é uma matriz de autovetores associados aos autovalores. Desta forma, substituindo na equação (2.19), temos

$$\begin{aligned} \mathbf{B}(x) &= \mathcal{L}^{-1} \left\{ (s\mathbf{X}\mathbf{X}^{-1} - \mathbf{X}\mathbf{D}\mathbf{X}^{-1})^{-1} \right\} \\ &= \mathbf{X}\mathcal{L}^{-1} \left\{ (s\mathbf{I} - \mathbf{D})^{-1} \right\} \mathbf{X}^{-1}. \end{aligned} \quad (2.43)$$

Como \mathbf{D} é dado por

$$\mathbf{D} = \begin{bmatrix} s_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & s_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & s_{GN} \end{bmatrix}, \quad (2.44)$$

então

$$s\mathbf{I} - \mathbf{D} = \begin{bmatrix} s - s_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & s - s_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & s - s_{GN} \end{bmatrix}. \quad (2.45)$$

A expressão da inversa da matriz $(s\mathbf{I} - \mathbf{D})$ é escrita como,

$$(s\mathbf{I} - \mathbf{D})^{-1} = \begin{bmatrix} s - s_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & s - s_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & s - s_{GN} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{s - s_1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{s - s_2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{s - s_{GN}} \end{bmatrix}. \quad (2.46)$$

A inversa da transformada de Laplace, da matriz acima é

$$\mathcal{L}^{-1}\{(s\mathbf{I} - \mathbf{D})^{-1}\} = \begin{bmatrix} e^{xs_1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & e^{xs_2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & e^{xs_{GN}} \end{bmatrix} = e^{\mathbf{D}x}. \quad (2.47)$$

Assim, a expressão para $\mathbf{B}(x)$ é dada por:

$$\mathbf{B}(x) = \mathbf{X}e^{\mathbf{D}x}\mathbf{X}^{-1}. \quad (2.48)$$

O método da diagonalização pode ser aplicado em problemas de transporte com elevados grau de anisotropia e de N , como pode ser visto em [Segatto et al., 1999b]. Mais uma vez convém salientar que o vetor e $\Phi(0)$ não está completamente determinado. A

determinação do restante das incógnitas é feita usando as condições de contorno. Finalmente, incorporando nesta solução o tratamento dado para o problema de *overflow*, temos,

$$\mathbf{B} = \mathbf{X}e^{\mathbf{D}x}\mathbf{X}^{-1} = \mathbf{X}e^{\mathbf{D}^+(x-L)}\mathbf{X}^{-1} + \mathbf{X}e^{\mathbf{D}^-x}\mathbf{X}^{-1} = \mathbf{B}^+(x-L) + \mathbf{B}^-(x), \quad (2.49)$$

onde os elementos das matrizes \mathbf{D}^+ e \mathbf{D}^- são

$$d_{ij}^+ = \begin{cases} s_i & \text{se } d_{ij} > 0 \\ 0 & \text{se } d_{ij} \leq 0 \end{cases} \quad \text{e} \quad d_{ij}^- = \begin{cases} s_i & \text{se } d_{ij} < 0 \\ 0 & \text{se } d_{ij} \geq 0. \end{cases} \quad (2.50)$$

Por fim, substituindo a expressão (2.49) na Eq.(2.17), temos uma solução para o fluxo angular, utilizando o método da Diagonalização:

$$\Phi(x) = \mathbf{B}^+(x-L)\Phi(a) + \mathbf{B}^-\Phi(0) + \mathbf{H}(x), \quad (2.51)$$

onde

$$\mathbf{H}(x) = \int_a^x \mathbf{B}^+(x-\zeta)\mathbf{Q}(\zeta)d\zeta + \int_0^x \mathbf{B}^-(x-\zeta)\mathbf{Q}(\zeta)d\zeta.$$

Para determinar os componentes desconhecidos $\Phi_2(0)$ e $\Phi_1(a)$ dos vetores $\Phi(0)$ e $\Phi(a)$, respectivamente, são aplicadas as condições de contorno, produzindo

$$\begin{bmatrix} \Phi_1(a) \\ \Phi_2(0) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^+(0) & \mathbf{B}_{12}^-(0) \\ \mathbf{B}_{21}^+(a) & \mathbf{B}_{22}^-(a) \end{bmatrix}^{-1} \begin{bmatrix} (\mathbf{I} - \mathbf{B}_{11}^-(0))\Phi_1(0) - \mathbf{B}_{12}^+(0)\Phi_2(a) - \mathbf{H}_1(0) \\ (\mathbf{I} - \mathbf{B}_{22}^+(a))\Phi_2(a) - \mathbf{B}_{21}^-(a)\Phi_1(0) - \mathbf{H}_2(a) \end{bmatrix}. \quad (2.52)$$

É importante observar que todos os argumentos das exponenciais aparecendo na solução LTS_N são negativos. O método da Diagonalização, devido ao número reduzido de operações matemáticas, se torna menos honeroso computacionalmente, mantendo a ótima eficiência do método LTS_N . Por isto, o método da Diagonalização será usado em todos os problemas propostos. Mesmo assim, o método de Schur será mantido no código, para futuro aproveitamento ou até para comparações de resultados entre os métodos. Além disto, poderá ser usado em substituição ao método da diagonalização, quando este não for aplicável.

2.3 Método LTS_N para Solução de Problemas de Multi-Regiões

Foi visto nas seções anteriores, toda a derivação da formulação LTS_N, para problemas em meios homogêneos. A partir de agora, será apresentado a extensão desta formulação para problemas envolvendo multi-regiões (ou meios heterogêneos).

Para este fim, será considerado um problema de transporte de nêutrons em uma placa de K regiões, como mostra a Figura 2.2, onde cada região é diferenciada pelo tipo de material que é composta. Fisicamente esta diferenciação encontra-se nas seções de choque.

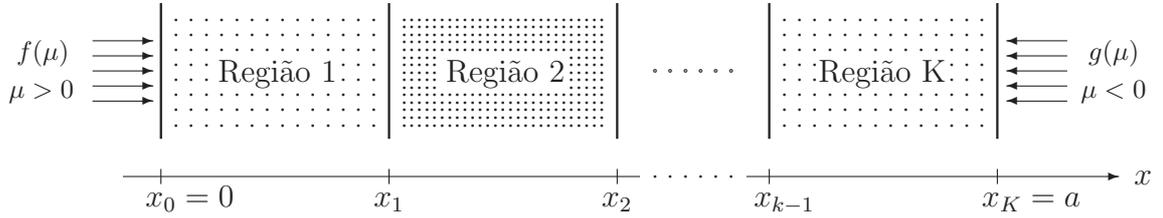


Figura 2.2 – Representação esquemática de uma placa com K regiões.

A equação S_N, em multigrupos, que rege este problema é

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} \psi_{gi}^k(x) + \frac{\Sigma_{t_g}^k}{\mu_i} \psi_{gi}^k(x) &= \frac{1}{2\mu_i} \sum_{g'=1}^G \sum_{j=1}^N \Sigma_{g'g}^{kL} \omega_j \psi_{g'j}^k(x) \\ &+ \frac{\chi_g^k(x)}{2k_{eff}} \frac{1}{\mu_i} \sum_{g'=1}^G (\nu \Sigma_f)_{g'}^k \sum_{j=1}^N \omega_j \psi_{g'j}^k(x) \end{aligned} \quad (2.53)$$

a qual fornece um conjunto de GN equações diferenciais ordinárias de primeira ordem, com $k = 1 : K$, $x \in [x_{k-1}, x_k]$, $x_0 = 0$ e $x_K = a$, $i = j = 1 : N$, $g = g' = 1 : G$ e ainda com as condições de contorno

$$\psi_{gi}^1(0) = f_{gi}, \quad i = 1 : \frac{N}{2} \quad (2.53a)$$

$$\psi_{g(i+\frac{N}{2})}^K(a) = g_{gi}, \quad i = 1 : \frac{N}{2}, \quad (2.53b)$$

adicionadas das condições de continuidade do fluxo angular nas interfaces das regiões,

$$\psi_{gi}^k(x_k) = \psi_{gi}^{k+1}(x_k), \quad k = 1 : K - 1. \quad (2.54)$$

Para simplificar a utilização do método LTS_N é feita uma mudança de variável na variável espacial x , da seguinte forma:

$$x \in [x_{k-1}, x_k], \quad (2.55)$$

então

$$x \leftarrow x - x_{k-1}, \quad (2.56)$$

para $k = 1 : K$. Assim $x \in [0, L_k]$, onde $L_k = x_k - x_{k-1}$ é a espessura da região k . Portanto, tem-se K problemas de meios homogêneos, com as condições de continuidades, agora, definidas por

$$\psi_{gi}^k(L_k) = \psi_{gi}^{k+1}(0). \quad (2.57)$$

A equação 2.53 escrita na forma matricial fica

$$\frac{d}{dx} \mathbf{\Phi}^k(x) + \mathbf{A}^k \mathbf{\Phi}^k(x) = \mathbf{Q}^k(x), \quad (2.58)$$

a qual, a menos do índice k , mostra-se idêntica a Eq.(2.9), que representa a região homogênea. Conclui-se facilmente que a solução, pelo método LTS_N , da equação acima (2.58) tem uma seqüência idêntica a da Eq.(2.9) só que, agora, para cada região. Portanto, a generalização da aplicação do método LTS_N num problema com uma placa heterogênea de K regiões é imediata. Neste caso, a formulação LTS_N deve ser aplicada em cada uma das regiões, determinando uma solução para a k -ésima região que pode ser expressa como:

$$\mathbf{\Phi}^k(x) = \mathbf{B}^{k+}(x - x_k) \mathbf{\Phi}^k(x_k) + \mathbf{B}^{k-}(x) \mathbf{\Phi}^k(0) + \mathbf{H}^k(x), \quad (2.59)$$

onde

$$\mathbf{H}^k(x) = \int_{x_k}^x \mathbf{B}^{k+}(x - \zeta) \mathbf{Q}^k(\zeta) d\zeta + \int_{x_{k-1}}^x \mathbf{B}^{k-}(x - \zeta) \mathbf{Q}^k(\zeta) d\zeta,$$

onde $x_{k-1} < x < x_k$. As mesmas considerações anteriores sobre a determinação dos $N/2$ componentes do fluxo angular nas fronteiras são válidas aqui.

2.4 Estudo da Criticalidade pelo Método LTS_N

Nesta seção será descrita a determinação do fator de multiplicação efetivo (k_{eff}) e da espessura crítica, pela resolução de uma equação transcendental, obtida pela aplicação das condições de contorno, proposto inicialmente por Batistela[Batistela et al., 1997][Batistela et al., 1996] e mais recentemente, com Derivi[Derivi, 1999], que acrescentou o cálculo da densidade atômica.

O problema de criticalidade é transformado num problema de determinação de raízes de uma equação transcendental pela aplicação do método LTS_N .

A aplicação da formulação LTS_N num problema de placa plana heterogênea de K regiões, com G grupos de energia e sujeita à aplicação das condições de contorno do tipo vácuo e de continuidade dos fluxos angulares nas interfaces origina o sistema homogêneo,

$$\mathbf{A}\Phi_{GN}^{k*}(0) = \left[\mathbf{0} \right]_{GN}^k, \quad (2.60)$$

onde $k = 1 : K$, $\Phi_{GN}^{k*}(0)$ é o vetor de KGN componentes que representam os fluxos angulares modificados nas k regiões e g grupos de energia, em cada uma das k regiões, definido por

$$\Phi_{GN}^{k*}(0) = \left[\phi_{11}^{1*}(0) \quad \cdots \quad \phi_{GN}^{1*}(0) \quad \cdots \quad \phi_{11}^{K*}(0) \quad \cdots \quad \phi_{GN}^{K*}(0) \right]^T, \quad (2.60a)$$

onde $\phi_{gi}^{k*}(0)$ é o fluxo angular modificado com direção μ_i e grupo g na região k ; $[\mathbf{0}]_{KGN}$ é um vetor nulo de KGN componentes, e \mathbf{A} é a matriz ($KGN \times KGN$) obtida pela aplicação das condições de contorno e de continuidade para o fluxo angular nas interfaces do problema.

Expressando os elementos de \mathbf{A} por blocos ou submatrizes, \mathbf{B} , obtém-se

$$\left[\begin{array}{ccccc} \mathbf{B}^1(0) & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & \cdots & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} \\ \mathbf{B}^1(x_1) & -\mathbf{B}^2(0) & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & \cdots & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} \\ [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & \mathbf{B}^2(x_2 - x_1) & -\mathbf{B}^3(0) & \cdots & [0]_{GN \times GN} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ [0]_{GN \times GN} & [0]_{GN \times GN} & [0]_{GN \times GN} & \cdots & -\mathbf{B}^K(0) \\ [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & \cdots & \mathbf{B}^K(x_K - x_{K-1}) \end{array} \right] \phi_{GN}^{K*}(0) = [\mathbf{0}]_{KGN}, \quad (2.60b)$$

onde $\mathbf{B}^1(0)$ é a matriz $(GN/2 \times GN)$ resultante da aplicação de $GN/2$ condições de contorno em $x = 0$ da região 1 nas direções positivas da equação de multi-regiões e $\mathbf{B}^K(x_K - x_{K-1})$ é a matriz $(GN/2 \times GN)$ obtida pela aplicação das condições de contorno em $x = (x_K)$ da região K nas direções negativas deste mesmo termo. Os demais blocos apresentados são matrizes de dimensão $(GN \times GN)$ correspondentes às condições de interface, enquanto os componentes restantes da matriz \mathbf{A} são submatrizes nulas de dimensão variável.

O sistema linear homogêneo expresso em 2.60 apresenta solução não-trivial se, e somente se,

$$\det(\mathbf{A}) = \det \begin{bmatrix} \mathbf{B}^1(0) & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & \cdots & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} \\ \mathbf{B}^1(x_1) & -\mathbf{B}^2(0) & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & \cdots & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} \\ [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & \mathbf{B}^2(x_2 - x_1) & -\mathbf{B}^3(0) & \cdots & [0]_{GN \times GN} \\ \vdots & \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ [0]_{GN \times GN} & [0]_{GN \times GN} & [0]_{GN \times GN} & \cdots & -\mathbf{B}^K(0) \\ [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & [0]_{\frac{GN}{2} \times GN} & \cdots & \mathbf{B}^K(x_K - x_{K-1}) \end{bmatrix} = \mathbf{0}. \quad (2.61)$$

Para outros tipos de condições de contorno homogêneas aplica-se o mesmo procedimento aqui descrito.

2.4.1 Metodologia para Determinação dos Parâmetros Críticos da Equação Transcendental

A metodologia utilizada para determinação dos parâmetros de criticalidade dependerá do parâmetro específico no qual se tenha interesse. As metodologias aqui descritas referem-se ao fator de multiplicação efetivo de nêutrons (k_{eff}) e espessura crítica.

- **Espessura Crítica**

Será proposta uma estratégia para investigar a solução da equação transcendental referente a um problema de criticalidade numa placa plana heterogênea de várias regiões (K) e com vários grupos de energia. No caso de cálculo da espessura crítica, pode ser descrita por basicamente duas etapas : a primeira caracterizada pela determinação do intervalo I que contenha a menor dentre as raízes positivas (*raiz* α) que satisfazem a equação transcendental, e a segunda baseada num processo iterativo para cálculo desta raiz. O processo é inicializado estabelecendo-se a região (NPDS) cuja espessura

será avaliada. A seguir toma-se a ordem de quadratura $N = 2$ e passa-se a avaliar o determinante da matriz das condições de contorno \mathbf{A} , $\det(\mathbf{A})$ a partir da espessura da região imediatamente anterior à desejada (ESP(NPOS-1)), efetuando-se pequenos incrementos de 0,0003 unidades sucessivamente. Este processo caracteriza uma varredura crescente e tem por objetivo estabelecer o intervalo em que se encontra a primeira raiz positiva que satisfaz a equação transcendental para $N = 2$. Os limites do intervalo são estabelecidos a partir de uma análise dos valores obtidos para $\det(\mathbf{A})$, segundo o princípio do método da bissecção. Analisa-se assim a variação de sinal para o determinante $\det(\mathbf{A})$ nos diferentes pontos utilizados, sendo que no caso deste resultado ser um número complexo esta variação deve ser observada tanto na parte real quanto na parte imaginária. Como exemplo, tendo-se observado que a primeira variação ocorre entre as espessuras $[a, b]$ constrói-se o intervalo $I_2 = [a, b]$. Com este intervalo inicia-se um processo iterativo para determinação da espessura crítica. Para tal, considera-se como aproximação inicial, chute inicial do processo iterativo, a média aritmética dos limites do intervalo I_2 , ($\alpha_2 = \frac{a+b}{2}$). Busca-se então determinar uma seqüência de valores α_N , com $N = 4, 6, \dots$, convergente para a espessura crítica, tendo por base intervalos que são sucessivamente refinados a medida que a ordem de quadratura N aumenta. Tomando-se então $N = 4$, $I_4 = [\alpha_2 - 0,5; \alpha_2 + 0,5]$ (intervalo centrado em α_2 com uma margem de variação de 0,5 unidades) efetua-se uma discretização neste intervalo (NUM_DISC partes), ou seja, o mesmo é subdividido em várias partes, avaliando-se o módulo do determinante da matriz \mathbf{A} , $|\det(\mathbf{A})|$ em cada um dos pontos da discretização. Tem-se então α_4 o segundo termo da seqüência, como sendo o ponto que minimiza $|\det(\mathbf{A})|$ no intervalo I_4 . Com as primeiras aproximações (α_2 e α_4) efetua-se o primeiro refinamento para o intervalo de busca. Tal refinamento é realizado calculando-se o erro relativo entre estas duas aproximações ($\mathbf{ER} = \left| \frac{\alpha_4 - \alpha_2}{\alpha_4} \right|$), determinando-se assim o intervalo $I_6 = [\alpha_4 - \mathbf{ER}; \alpha_4 + \mathbf{ER}]$ a ser utilizado para determinação de α_6 após nova discretização do intervalo de busca. Genericamente, este processo é realizado da seguinte maneira para ordens de quadratura $N \geq 6$: calcula-se o erro relativo \mathbf{ER} determinado pelas duas últimas aproximações consecutivas para a raiz α , dado por ($\mathbf{ER} = \left| \frac{\alpha_{N-2} - \alpha_{N-4}}{\alpha_{N-2}} \right|$). Com este dado constrói-se um novo intervalo de busca, definido por $I_N = [\alpha_{N-2} - \mathbf{ER}; \alpha_{N-2} + \mathbf{ER}]$, a ser discretizado para deter-

minação de α_N . Como critério de parada para este processo iterativo foi utilizado o erro relativo verificado entre duas aproximações conforme, não importando o valor de N utilizado para determinação da raiz, e considerando-se a espessura crítica como sendo a última aproximação calculada. Os próximos valores para ESP são obtidos da fórmula de recorrência, $ESP = [ESP(NPOS + 1) - DELTA] - DET/DETL$, onde $DETL = (DET[ESP(NPOS+1)+DELTA]-DELTA[ESP(NPOS+1)])/(DELTA)$, $DET = DET[ESP(NPOS+1)]$, $ESP(NPOS + 1) = ESP(NPOS) + DELTA$ e $DELTA$ representa um pequeno incremento a ESP .

- **Fator de Multiplicação de Nêutrons**

Para a determinação do fator de multiplicação dos nêutrons, o processo é basicamente o mesmo utilizado para o cálculo da espessura crítica. A diferença ocorre somente na determinação do intervalo inicial. O procedimento é o seguinte: inicialmente toma-se $N = 2$ e passa-se a avaliar o determinante da matriz das condições de contorno $\det(\mathbf{A})$, para os valores de k_{eff} pertencentes à faixa $0 < k_{eff} < 1.4$, efetuando-se pequenos decrementos ($\Delta k_{eff} = 0.0003$) a partir de 1.4. Este processo caracteriza uma varredura decrescente e tem por objetivo estabelecer o intervalo em que se encontra a última raiz positiva que satisfaz a equação transcendental, para $N = 2$. É considerado como valor inicial do valor de k_{eff} no ponto médio do intervalo onde a troca de sinal ocorreu. A seguir é aplicado o método de Newton-Raphson para calcular o próximo k_{eff} , com ordem de quadratura $N + 2$, e assim sucessivamente até encontrar um critério de parada, determinado pela precisão desejada.

2.5 A Solução Adjunta no Método LTS_N

A seguir, apresenta-se a solução adjunta pelo método LTS_N , desenvolvido inicialmente por Gonçalves[Gonçalves, 1999], iniciando com uma rápida explanação sobre função importância. Posteriormente, constrói-se o operador adjunto de transporte e finalmente propõe-se sua solução pelo método LTS_N .

A definição e interpretação física da solução adjunta podem ser derivadas da determinação da resposta R de um detector devido a um fluxo angular que satisfaz a equação linear

de transporte de Boltzmann. A resposta R é definida como um funcional linear [Graça, 1988]:

$$R(\psi) = \langle \Sigma, \psi \rangle , \quad (2.62)$$

onde o fluxo angular é um elemento do espaço vetorial V , cujo domínio é o espaço de fase $(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E)$, e a função seção de choque macroscópica, ou função resposta, Σ , é um elemento do espaço vetorial dual, definida neste mesmo domínio.

O parâmetro seção de choque macroscópica pode assumir uma variedade de expressões capazes de representar funcionais lineares resposta de interesse tais como taxa de reação, resposta dosimétrica, deposição de calor, etc., em todo ou em parte do espaço de fase. Uma avaliação do funcional linear resposta R pode ser feita pela formulação do princípio variacional, cujo tratamento pode ser encontrado na Ref.([Gonçalves, 1999]).

A função adjunta pode ser vista como uma função peso que pondera a influência de uma fonte no funcional resposta em consideração. Se a fonte S for uma função delta em seu domínio, $S(\mathbf{r}_0, \boldsymbol{\Omega}_0, E_0)$,

$$\psi^*(\mathbf{r}_0, \boldsymbol{\Omega}_0, E_0) = \langle \Sigma(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E), \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) \rangle , \quad (2.63)$$

ou, explicitamente,

$$\psi^*(\mathbf{r}_0, \boldsymbol{\Omega}_0, E_0) = \int \int \int \Sigma(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) dV d\boldsymbol{\Omega} dE , \quad (2.64)$$

a função adjunta é interpretada como a medida de importância de uma partícula, introduzida numa cela do espaço de fase, em contribuir para a resposta de um detector[Lewins, 1965]. Desta interpretação deriva a também conhecida denominação de função importância para a solução adjunta. Esta interpretação de função importância coloca a solução adjunta sobretudo como uma propriedade do espaço de fase que designa a capacidade de contribuição de cada cela para um funcional resposta.

A solução adjunta é às vezes referida como fluxo adjunto. Esta denominação se justifica ou como uma alusão ao fluxo angular obtido pela equação de transporte direta ou pela relação de reciprocidade entre as duas soluções para problemas monoenergéticos, $\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \psi^*(\mathbf{r}, -\boldsymbol{\Omega})$. A solução adjunta é adimensional.

2.5.1 A Equação de Transporte Adjunta

O operador de transporte adjunto pode ser definido a partir da igualdade dos pares duais [Lewis e W. F. Miller, 1984]

$$\langle \psi^*, \mathbf{L}\psi \rangle = \langle \mathbf{L}^*\psi^*, \psi \rangle, \quad (2.65)$$

onde, o desenvolvimento leva, conseqüentemente, a equação adjunta de transporte

$$\begin{aligned} & -\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) + \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \psi^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) \\ &= \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\Omega' \Sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E \rightarrow \boldsymbol{\Omega}', E') \psi^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E') + S^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E), \end{aligned} \quad (2.66)$$

sujeita as condições de contorno,

$$\psi^*(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega}, E) = 0 \quad \text{para} \quad \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\Omega} > 0, \quad (2.67)$$

onde $\hat{\mathbf{n}}$ é o vetor unitário perpendicular a superfície convexa. Desta forma, o operador adjunto é definido por

$$\begin{aligned} \mathbf{L}^*\psi^* &= \left[-\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla + \Sigma_t(\mathbf{r}, E) \right] \psi^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) \\ &\quad - \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\Omega' \Sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E \rightarrow \boldsymbol{\Omega}', E') \psi^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E'). \end{aligned} \quad (2.68)$$

Como diferenças entre o operador de transporte e o operador adjunto, os termos de gradiente têm sinais opostos, ou seja, o termo de fuga líquida do elemento de volume no operador \mathbf{L} é trocado por um termo de ganho líquido em \mathbf{L}^* . Na seção de choque diferencial estão invertidas as posições das variáveis que identificam o estado do nêutron antes e depois da interação. Isto caracteriza uma inversão no sentido do espalhamento e, se as seções de choque são consideradas como elementos de uma matriz $G \times G$, a matriz seção de choque para a equação adjunta é a transposta à da equação para o fluxo angular. Finalmente, quando a função fluxo angular satisfaz as condições de contorno de superfície livre, a solução adjunta satisfará as condições de contorno (2.67). Isto está coerente com a interpretação de função

importância visto que, para condições de contorno de superfície livre, o nêutron que deixa o sistema não pode mais contribuir para um funcional resposta.

2.5.2 Solução Adjunta no Método LTS_N

A equação adjunta de transporte, quando aproximada pelas técnicas de ordenadas discretas e multigrupo, pode ser deduzida da equação (2.8), sem o termo de fissão, com condições de contorno de superfície livre, fazendo-se as alterações que caracterizam o operador adjunto. Ou seja,

$$-\frac{d\psi_{g,i}^*(x)}{dx} + \frac{\Sigma_{tg}}{\mu_i} \psi_{g,i}^*(x) = \frac{1}{2\mu_i} \sum_{g'=1}^G \sum_{j=1}^N \Sigma_{s,g'g}^L w_j \psi_{g'j}^*(x) + \frac{S_{g,i}^*(x)}{\mu_i}, \quad (2.69)$$

sujeita às condições de contorno

$$\psi_{g,i+N/2}^*(0) = 0, \quad (2.69a)$$

$$\psi_{g,i}^*(a) = 0, \quad i = 1 : N/2 \text{ e } g = 1 : G. \quad (2.69b)$$

É importante notar que, pela aproximação multigrupo-S_N, a equação (2.63) fica:

$$\psi_{g_1,i_1}(x_1) = \sum_{i=1}^N \sum_{g=1}^G \int_0^{x_0} w_i \sigma_{gi}(x) \psi_{gi}(x) dx. \quad (2.70)$$

Como não surge nenhuma mudança na transformação do operador de transporte direto para o adjunto em relação à variável espacial, a forma geral da equação (2.40) é mantida para a solução adjunta considerando as condições de contorno (2.69a-b).

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \Phi_1^*(x) \\ \Phi_2^*(x) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^-(x) & \mathbf{B}_{12}^+(x-a) \\ \mathbf{B}_{21}^-(x) & \mathbf{B}_{22}^+(x-a) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1^*(0) \\ \Phi_2^*(a) \end{bmatrix} \\ &+ \int_a^x d\zeta \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^+(x-\zeta) & \mathbf{B}_{12}^+(x-\zeta) \\ \mathbf{B}_{21}^+(x-\zeta) & \mathbf{B}_{22}^+(x-\zeta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1^*(\zeta) \\ \mathbf{Q}_2^*(\zeta) \end{bmatrix} + \int_0^x d\zeta \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^-(x-\zeta) & \mathbf{B}_{12}^-(x-\zeta) \\ \mathbf{B}_{21}^-(x-\zeta) & \mathbf{B}_{22}^-(x-\zeta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1^*(\zeta) \\ \mathbf{Q}_2^*(\zeta) \end{bmatrix}. \end{aligned} \quad (2.71)$$

Com o mesmo argumento anterior, o sistema de equações algébricas a ser resolvido para o problema adjunto tem a forma:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^-(a) & \mathbf{B}_{12}^+(0) \\ \mathbf{B}_{21}^-(0) & \mathbf{B}_{22}^+(-a) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \boldsymbol{\Phi}_1^*(0) \\ \boldsymbol{\Phi}_2^*(a) \end{bmatrix} = \int_0^a d\zeta \begin{bmatrix} -\mathbf{B}_{11}^-(x-\zeta) & -\mathbf{B}_{12}^-(x-\zeta) \\ \mathbf{B}_{21}^+(x-\zeta) & \mathbf{B}_{22}^+(x-\zeta) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1(\zeta) \\ \mathbf{Q}_2(\zeta) \end{bmatrix}. \quad (2.72)$$

Assim, a solução do problema adjunto de transporte pelo método LTS_N é determinada pela equação (2.71) a partir da solução do sistema de equações algébricas (2.72).

CAPÍTULO 3

CONTRIBUIÇÕES PARA O MÉTODO LTS_N

O objetivo deste trabalho é avançar no método LTS_N e desenvolver a primeira versão de um código computacional para cálculo de transporte unidimensional em geometria plana, inicialmente para nêutrons, utilizando o método LTS_N .

3.1 O Uso do Método Iterativo para Solução do Sistema de Equações Lineares

O vetor $\Phi(0)$, na Eq. 2.37, não está completamente determinado, porque somente $N/2$ componentes, referentes a $\mu > 0$, são conhecidas. As outras $N/2$ condições para $\mu < 0$ devem ser obtidas através da solução de um sistema algébrico de equações lineares a partir das condições de contorno em $x = a$. Até o momento está sendo utilizado o Método de Eliminação Gaussiana para solução deste sistema de equações. O esforço computacional deste Método ou o número total de operações é obtido somando-se o número de operações necessárias para resolver um sistema triangular. Assim, na aplicação do Método de Eliminação Gaussiana [Cunha, 2000] na resolução de um sistema com n equações e n incógnitas, o número total de operações é da ordem de n^3 para n grande. Se o sistema não é triangular, no método de eliminação são necessárias mais que 68 vezes o exigido no caso triangular. O peso maior no esforço computacional do método deve-se às operações realizadas na eliminação, pois o processo de eliminação é responsável pelo termo cúbico do esforço computacional. Com isso, a propagação de erros de arredondamentos também cresce da ordem n^3 . No sentido de avançar mais no método LTS_N , propõe-se substituir o Método de Eliminação Gaussiana por um método iterativo, tendo em vista que a matriz LTS_N torna-se grande para altos valores de N e g . Em geral, os métodos iterativos são convenientes para sistemas grandes e/ou esparsos. Outra consideração importante é que o Método de Eliminação Gaussiana pode destruir faixas de zero, enquanto o método iterativo preserva os zeros do sistema.

Mas, como nem tudo é perfeito, existem algumas condições para garantir a convergência da sequência de aproximações, calculadas por métodos iterativos.

O método iterativo escolhido foi o Método “Reiniciado” Resíduo Mínimo Generalizado (*Restarted Generalized Minimum RESidual – RGMRES*). O principal motivo desta escolha foi que o mesmo satisfaz a solução esperada e está presente no pacote computacional PIM [Cunha e Hopkins, 1994b]. Este pacote foi desenvolvido por Cunha [Cunha e Hopkins, 1994a].

De acordo com a descrição contida no manual do PIM, o método GMRES é muito robusto para resolver sistemas não-simétricos e, resolve sistemas não-singulares de n equações lineares da forma

$$Q_1 A Q_2 x = Q_1 b, \quad (3.1)$$

onde, Q_1 e Q_2 são matrizes pré-condicionadoras. O método usa o processo de Arnoldi para calcular uma base ortonormal $\{v_1, v_2, \dots, v_k\}$ do subespaço de Krylov $\mathcal{K}(A, v_1)$. A solução do sistema é obtida como $x_o + V_k y_k$, onde V_k é uma matriz na qual as colunas são ortonormais aos vetores v_i , e y_k é a solução do problema de mínimos quadrados $H_k y_k = \|r_o\|_2 e_1$, onde a matriz superior de Hessemberg H_k é gerada durante o processo de Arnoldi e $e_1 = (1, 0, 0, \dots, 0)^T$. Este problema de mínimos quadrados pode ser resolvido usando uma fatorização QR de H_k .

Um problema que surge na conexão com GMRES é que o número de vetores de ordem n que necessita ser armazenado cresce linearmente com k e o número de multiplicações cresce quadraticamente. Isto pode ser evitado usando uma versão “reiniciada” de GMRES e; este é o método implementado no pacote PIM. No lugar de gerar uma base ortonormal de dimensão k , escolhe-se um valor c , $c \ll n$, e gera-se uma aproximação da solução usando uma base ortonormal de dimensão c , assim reduz-se consideravelmente a quantidade armazenada de vetores. Embora o “reiniciado” GMRES não falhe, pode, dependendo do sistema e do valor de c , produzir uma sequência estacionária de resíduos, não obtendo desta forma a convergência. Aumentando o valor de c , geralmente elimina-se este problema e com isso pode também aumentar a taxa de convergência. Uma abordagem detalhada sobre a implementação vetorizada do “reiniciado” GMRES, usado no pacote PIM, pode ser encontrado em [Cunha e Hopkins, 1994a]. Embora o pacote PIM seja otimizado para processamento paralelo, ele permite o uso em cálculos sequenciais, que é o nosso caso.

3.2 A Matriz LTS_N

Um bloco importante do código é a montagem da matriz denominada matriz LTS_N , que contém os parâmetros do problema. Nela estão contidas as informações sobre as GN seções de choque do problema, para cada região. A matriz LTS_N , cujos elementos são descritos pela expressão 2.10 (pág. 10), está na forma “genérica” para o estudo de nêutrons numa única região. O desenvolvimento proposto para o código prevê que num futuro próximo sejam incorporados outros avanços utilizando a metodologia iniciada com a formulação LTS_N , tais como o estudo de transferência radiativa, estudo neutrônico em geometria cilíndrica (em desenvolvimento), entre outros. Assim, é interessante, permitir que a forma numérica desta matriz seja a mais genérica possível. Neste sentido, foi desenvolvido um algoritmo para a montagem da matriz LTS_N *generalizada*, denominada `ltsn_matrix`. Através dele será possível estruturar qualquer problema que envolva parcial ou totalmente a formulação LTS_N .

3.3 Alteração na Varredura para Encontrar o Intervalo de Variação do k_{eff}

O processo de busca da mudança no sinal do determinante da matriz dos coeficientes, descrito a partir da página 23, foi alterado para proporcionar maior otimização.

A estratégia é utilizar uma ordem de quadratura baixa, para reduzir o esforço computacional, e através de uma varredura em intervalos muito pequenos buscar a mudança no sinal do produto dos determinantes, entre os valores 0.0 e 1.5. Após este passo, adota-se o valor de quadratura desejado e assim inicia-se o uso do método da bissecção, na busca do valor de k_{eff} . Isto é, inicia-se o processo com uma ordem de quadratura ($N = 2$ ou 4) e faz-se uma busca para encontrar a mudança no sinal do determinante da matriz dos coeficientes. A seguir, com esta estimativa (k_0), e um percentual de variação para este fator, especificado na entrada de dados (`delta_k`), serão obtidos dois valores para o fator de multiplicação efetivo já na aproximação desejada (por exemplo, $N = 200$ ou mais): $k_1 = k_0 + \Delta k$ e $k_2 = k_0 - \Delta k$. Calcula-se o determinante e verifica-se a ocorrência da mudança de sinal no produtos dos determinantes. Em caso negativo, redefine-se os dois valores para: $k_3 = k_0 + 2\Delta k$ e $k_4 = k_0 - 2\Delta k$, e verifica-se novamente se ocorreu a troca de sinal no cálculo do produto dos determinantes. Caso contrário, repete-se este processo até obter-se a mudança no sinal, quando, então inicia-se o método da bissecção. A expressão geral para

os dois valores é

$$k_{(i)} = k_0 + i * \Delta k \quad \text{e} \quad k_{(i+1)} = k_0 - i * \Delta k, \quad (3.2)$$

para $i = 1, 2, \dots, \#$, onde $\#$ fornecerá o índice do incremento no qual houve troca de sinal no cálculo do produto dos determinantes. Procedendo desta forma evita-se que para cada incremento no N repita-se todo o procedimento para encontrar a mudança no sinal do produto dos determinantes, acarretando um esforço computacional desnecessário.

CAPÍTULO 4

ESTUTURA BÁSICA DO CÓDIGO LTSN

A principal característica do código está em reunir em um único programa computacional os diversos trabalhos e avanços propostos ao longo destes quase 11 anos de existência do método LTS_N . O código que será chamado CÓDIGO LTSN_vX.Y ou LTSN_vX.Y CODE foi desenvolvido em linguagem Fortran 90/95 [Lahey/Fujitsu, 1999][Chapman, 1998], para computadores do tipo PC, onde vX.Y faz referência a versão do mesmo e lê-se “*código LTSN versão X.Y*”. A versão resultante deste trabalho é LTSN_v1.0. Neste momento, o nome dado ao código não levará a expressão PC, que irá diferenciá-lo da versão para supercomputador: ainda não disponível. O compilador Fortran utilizado foi o Lahey/Fujitsu Fortran 95 v5.5 da *Lahey Computer Systems, Inc.* [Lahey-Fujitsu, 2002][Lahey/Fujitsu Fortran 95 *Express*, 1999] para plataforma GNU/Linux [Linux, 2002]. Para usufruir das otimizações efetivas incorporadas ao novo compilador é sugerido o uso de um hardware que contenha um processador Pentium[®]. Embora o compilador Fortran utilizado tenha sido desenvolvido para o Linux, o código será portátil para um ambiente Microsoft Windows[®], através de algumas alterações, especialmente no pacote para solução de equações pelo método iterativo (PIM [Cunha e Hopkins, 1994b]), pois o mesmo foi desenvolvido e otimizado para plataformas UNIX e Linux. A escolha pelo sistema operacional GNU/Linux baseou-se na sua estabilidade e pela possibilidade de usufruir da licença GPL(General Public License) disponível, por exemplo, nos recursos gráficos da biblioteca DISLIN [DISLIN, 2002] e do pacote PIM.

A parte principal do código é o programa LTSN, que está dividido, estrategicamente, em três módulos (Figura 4) que quando compilados formam o Código LTSN. Estes módulos, que estão descritos detalhadamente no capítulo 4, são:

1. LTSN1.f90 (INPUT): onde estarão as rotinas para entradas de dados;
2. LTSN2.f90 (CALCULATIONS): o núcleo (*kernel*) do código. É nesta parte que se encontram todas sub-rotinas de cálculo; e

3. LTSN3.f90 (OUTPUT): tratará a saída de dados, concatenado com o primeiro módulo.

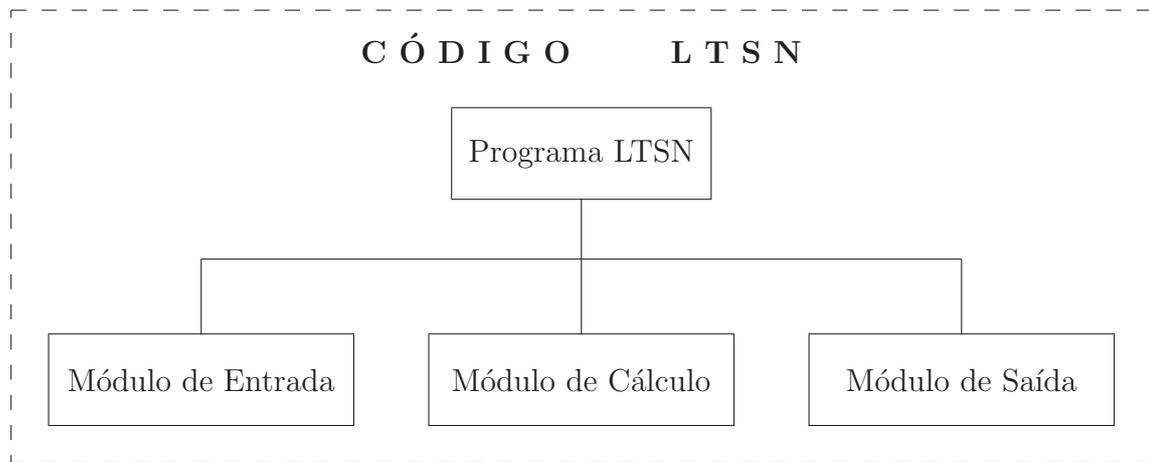


Figura 4.1 – Esquema da Estrutura do Código LTSN

O executável foi gerado através da linha de comando:

```
lf95 ltsn_v1.0.f90 libltsn.a -o LTSN
```

onde “lf95” é o comando para execução do compilador Fortran; “ltsn.f90” é o código LTS_N em si – contendo os módulos LTSN1.f90, LTSN2.f90 e LTSN3.f90; “libltsn.a” é a biblioteca que contém somente as sub-rotinas da LAPACK necessárias para a inversão da matriz LTS_N ; e a opção “-o LTSN” foi usada para renomear o executável como LTSN. O esquema abaixo (Fig. 4.2) reproduz a seqüência e dependência entre as sub-rotinas que constituem a parte principal do código. Mais adiante serão descritos cada uma destas sub-rotinas.

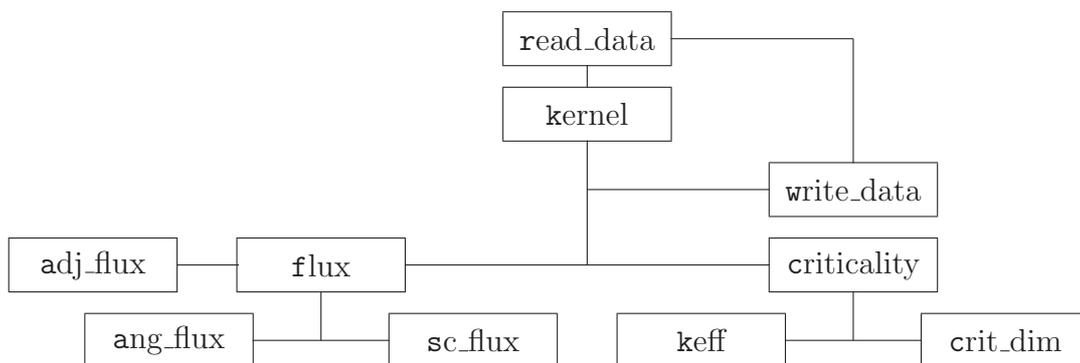


Figura 4.2 – Diagrama esquemático das sub-rotinas principais do Código LTSN e suas interdependências

Para gerar a biblioteca “libltsn.a” foi usado o comando:

```
lf95 l_libltsn.for --out libltsn.a
```

onde “l_libltsn.for” é o arquivo contendo as sub-rotinas LAPACK, as quais serão especificadas abaixo. Para evitar que algum parâmetro fosse erroneamente informado às sub-rotinas desta biblioteca, foi criada uma INTERFACE [Chapman, 1998] e compartilhada através de um MODULE (o MODULE interface_libltsn), para explicitar todos os argumentos trocados entre partes do programa. Outra consideração relevante, é que antes de gerar a versão final do executável, o código foi compilado com a opção “--chk” (*checking*), que remove a otimização e gera mensagens de erro caso ocorram, por exemplo, um estouro de índice de alguma *array*, variáveis que são acessadas antes de serem inicializadas ou ainda quando argumentos trocados entre procedimentos não possuam o mesmo tipo, atributo, forma ou tamanho. O código LTSN está contido na unidade de programa principal, mostrada parcialmente a seguir.

```
Programa Principal
```

```

1  PROGRAM ltsn
2      !*****!
3      !*                                     *!
4      !*           L   T   S   N           *!
5      !*                                     *!
6      !*           LTSN Code version 1.0   *!
7      !*           April 2002             *!
8      !*                                     *!
9      !*****!
10  IMPLICIT NONE
11  !
12  CALL read_data()
13  CALL kernel()
14  !
15  END PROGRAM ltsn
16  !
17  ! Inclusao dos modulos: INPUT - KERNEL - OUTPUT
18  !
19  INCLUDE "ltsn1.f90" ! INPUT
20  INCLUDE "ltsn2.f90" ! KERNEL
21  INCLUDE "ltsn3.f90" ! OUTPUT

```

4.1 A Entrada de Dados (Módulo LTSN1.f90)

O primeiro módulo, LTSN1.f90, contém uma única sub-rotina: a SUBROUTINE `read_data()`, a qual lê a entrada de todas as informações relativas ao problema, de maneira formatada. Tanto o arquivo que contém os dados de entrada (dispositivo padrão 5 – INPUT), como o que contém os resultados (dispositivo padrão 6 – OUTPUT) são

abertos através de redirecionamento de I/O¹. Vejamos como isto é feito. Já com os dados de entrada num arquivo, por exemplo, “input.inp”, para executar o código LTSN digite num terminal linux:

```
./LTSN <input.inp >output.out
```

onde, “LTSN” é o executável e, os sinais “<” e “>” representam o redirecionamento de entrada para o arquivo “input.inp” e de saída para o “output.out”, respectivamente. No código, como já mencionado, a leitura dos dados de entrada é realizada pela sub-rotina “read_data”. Os valores carregados por esta sub-rotina ficarão disponíveis para qualquer parte do código através do uso da declaração USE. Isto será possível porque os módulos “MODULE shared_data” e “MODULE cross_sections_data”, abaixo descritos, os armazenarão.

```

----- MODULE shared_data -----
1  MODULE shared_data
2  USE real_precision, ONLY: dp
3  IMPLICIT NONE
4  !
5  ! Define os dados que podem ser compartilhados
6  !
7  INTEGER, PARAMETER :: nin = 5
8  INTEGER, PARAMETER :: nout = 6
9  INTEGER :: ipn=0, ifc=0, isct=0, isn=0, ign=0, ibl=0, ibr=0, irn=0&
10         &ids=0, itc=0, ipxt=0, ipxgg=0, ilxs=0, inxse=0, inxsi=0, is=0&
11         &idislin=0, idf=0, itex=0
12  REAL(dp) :: l = 0.0_dp, l_source = 0.0_dp, keff = 0.0_dp
13  REAL(dp), ALLOCATABLE, DIMENSION(:) :: bl = 1.0_dp
14  REAL(dp), ALLOCATABLE, DIMENSION(:,:) :: ltsn_matrix = 0.0_dp
15  REAL(dp), ALLOCATABLE, DIMENSION(:,:) :: ltsn_coef_matrix = 0.0_dp
16  REAL(dp), ALLOCATABLE, DIMENSION(:,:) :: chi = 0.0_dp
17  REAL(dp), ALLOCATABLE, DIMENSION(:,:) :: source = 0.0_dp
18  END MODULE shared_data

```

```

----- MODULE cross_sections_data -----
1  MODULE cross_sections_data
2  USE real_precision, ONLY: dp
3  IMPLICIT NONE
4  !
5  ! Define as secoes de choque que podem ser compartilhadas
6  !
7  REAL(dp), ALLOCATABLE, DIMENSION(:,:) :: xs_t = 0.0_dp
8  REAL(dp), ALLOCATABLE, DIMENSION(:,:) :: xs_nu_f = 0.0_dp
9  REAL(dp), ALLOCATABLE, DIMENSION(:,:,) :: xs_s = 0.0_dp
10  END MODULE cross_sections_data

```

¹I/O é o mesmo que Input/Output; em português: E/S.

O módulo que contém a informação sobre as precisões dos números reais é:

```

          MODULE real_precision
1  MODULE real_precision
2  IMPLICIT NONE
3      !
4      ! Define as precisoes independentes de maquinas e compiladores
5      !
6      INTEGER,PARAMETER :: sp = SELECTED_REAL_KIND(p=6)  ! single precision
7      INTEGER,PARAMETER :: dp = SELECTED_REAL_KIND(p=14) ! double precision
8      INTEGER,PARAMETER :: qp = SELECTED_REAL_KIND(p=30) ! quadruple precision
9  END MODULE real_precision

```

A estrutura geral do arquivo de entrada de dados foi baseada no código ANISN [Parsons, 1988] e, está subdividida da seguinte forma:

<i>Campo</i>	Descrição	Identificação
A	Cabeçalho	–
B	Inteiros	15\$
C	Seções de Choque	13\$, 14*
D	Restante dos Dados	–

Cada *Campo* iniciará em uma nova linha, sendo que os dados propriamente ditos iniciarão na linha seguinte a esta. Os *Campos* são descritos da seguinte maneira:

A. Cabeçalho - conterá a versão do código LTSN e a reprodução da primeira linha do arquivo de entrada. O formato de escrita está restrito a A80, para permitir a impressão dos resultados via dispositivo de impressão.

B. Números Inteiros – No formato 4I5

15\$ *Parâmetros de Controle Inteiros* – 19 Entradas

	Nome da Variável	Descrição
1.	IPN	Número de Identificação do Problema
2.	IFC	Cálculo do Fluxo 0 – Cálculo do Fluxo Direto 1 – Cálculo do Fluxo Adjunto
3.	ISCT	Ordem de Espalhamento (P_ℓ)
4.	ISN	Ordem da Quadratura Angular – S_N (Somente inteiros pares, 2/4/6...)

continua na próxima página

continuação de 15\$ *Parâmetros de Controle Inteiros* – 19 Entradas

	Nome da Variável	Descrição
5.	IGN	Número de Grupos de Energia
6.	IBL	Condição de Contorno - Lado Esquerdo, entrada 1* no <i>Campo D</i> 0 – Vácuo 1 – Reflexão 2 – Albedo
7.	IBR	Condição de Contorno - Lado Direito, igual ao IBL, entrada 2* no <i>Campo D</i>
8.	IRN	Número de Regiões, se $IRN > 0$, existe a entrada 9* no <i>Campo D</i>
9.	IDS	Método Diagonalização ou Schur: 0 – Diagonalização 1 – Schur 2 – Ambos, um de cada vez
10.	ITC	Tipo de Cálculo de Criticalidade. SE $ITC \neq 0$ existirá a entrada 16* 0 – Nenhum 1 – k_{eff} 2 – Espessura Crítica
11.	IPXT	Posição da Seção de Choque Total (Σ_t) na Tabela de seção de choque
12.	IPXGG	Posição da Seção de Choque de Espalhamento Intragrupo na Tabela de seção de choque
13.	ILXS	Comprimento da Tabela de Seções de Choque
14.	INXSE	Número de seções de choque que serão Lidas de Arquivo Externo. Se $INXSE \neq 0$ existirá a entrada 13\$ no <i>Campo C</i>
15.	INXSI	Número de seções de choque que serão lidas no próprio arquivo, Internamente. Se $INXSI \neq 0$ existirá a entrada 14* no <i>Campo C</i>
16.	IS	Termo de Fonte 0 – Sem Fonte 1 – Com Fonte, existirão as entrada 17* e 18* no <i>Campo D</i>
17.	IDSLIN	Saída em Formato Gráfico: 0 – Não, 1 – Sim
18.	IDF	Saída para Arquivo .DAT: 0 – Não, 1 – Sim
19.	ITEX	Saída para Arquivo .TEX, na forma de Tabela: 0 – Não, 1 – Sim

C. Seções de Choque

Identificação	Descrição
13\$	Números de Identificação na Biblioteca que fornece as seções de choque
14*	Seções de Choque lidas do próprio arquivo <code>input.inp</code>

D. Restante dos Dados

Identificação	Descrição
1*	Descrição da Condição de Contorno - Fronteira Esquerda
2*	Descrição da Condição de Contorno - Fronteira Direita
9*	Tamanho, em <i>cm</i> da(s) Região(ões)
16*	Valor Inicial para o k_{eff} , o Critério de Parada para o k_{eff} , o Percentual de Variação <code>delta_k</code> e o χ_g
17*	Formato da Fonte
18*	Posição(ões) do Termo de Fonte

Um exemplo de um arquivo de entrada é apresentado abaixo – `input.inp`, o qual trata de um problema sem fonte, com condições de contorno vácuo e reflexão, utilizando uma ordem de quadratura igual a 2 e ordem de espalhamento igual a 0. As seções de choque são lidas de um arquivo fornecido por uma biblioteca de seções de choque.

```

input.inp
1  Problema S2P0 - sem Fonte
2  15$ Parametros de Controle Inteiros
3      1   0   0   2
4      2   0   1   1
5      0   0   3   4
6      8   1   0   0
7      0   0   0   0
8  13$ Identificacao da Entrada da Biblioteca
9      12
10  9*  Dimensão em cm da(s) Regiao(oes)
11      20.0

```

4.2 Sub-rotina de Cálculo (Módulo `LTSN2.f90`)

Este módulo, `LTSN2.f90`, é o núcleo do código, porque é onde estão localizados todas as sub-rotinas de cálculos referentes a implementação do método LTS_N . Nesta parte serão chamadas as seguintes sub-rotinas, com suas respectivas funções principais:

- KERNEL:** Como o próprio nome se refere, nesta sub-rotina está a base do método LTS_N , ou seja, são construídas as matrizes \mathbf{A} e $s\mathbf{I} + \mathbf{A}$, bem como os processos de inversão, os vetores Condição de Contorno, cálculo dos μ e seus respectivos pesos ω , solução do sistema;
- FLUX:** Calcula o Fluxo e, contém três (3) sub-rotinas principais:
- ADJ_FLUX: Calcula o Fluxo Adjunto do problema;
 - ANG_FLUX: Calcula o Fluxo Angular, por grupo de energia;
 - SC_FLUX: Calcula o Fluxo Escalar total, por grupo de energia e/ou por ponto espacial e/ou total geral;
- CRITICALITY:** Cálculos de Criticalidade – Fator de Multiplicação Efetivo (k_{eff}) e Dimensão Crítica e, contém duas (2) sub-rotinas principais:
- KEFF: Calcula o Fator de Multiplicação Efetivo;
 - CRIT_DIM: Calcula a Dimensão Crítica;

Os nomes ds sub-rotinas da Biblioteca LAPACK[LAPACK-95, 2000] utilizadas nas sub-rotinas **KERNEL** e **CRITICALITY**, contidas na `libltsn.a`, estão listadas abaixo.

libltsn.a - contém as seguintes sub-rotinas da LAPACK

DCABS1	DGEBAK	DGEBAL	DGEEV	DGEHD2	DGEHRD	DHSEQR	DLABAD	DLACPY
DLADIV	DLAHQR	DLAHRD	DLALN2	DLAMC1	DLAMC2	DLAMC4	DLAMC5	DLAMCH
DLANV2	DLAPY2	DLAPY3	DLARF	DLARFB	DLARFG	DLARFT	DLARFX	DLARTG
DLASCL	DLASET	DLASSQ	DORG2R	DORGHR	DORGQR	DTREVC	DZNRM2	DZSUM1
ILAEV	IZAMAX	IZMAX1	LSAME	XERBLA	ZAXPY	ZCOPY	ZDOTC	ZDOTU
ZDSCAL	ZGEBAK	ZGEBAL	ZGEES	ZGEHD2	ZGEHRD	ZGEMM	ZGEMV	ZGERC
ZHSEQR	ZLACGV	ZLACON	ZLACPY	ZLADIV	ZLAHQR	ZLAHRD	ZLANGE	ZLANHS
ZLARF	ZLARFB	ZLARFG	ZLARFT	ZLARFX	ZLARTG	ZLASCL	ZLASET	ZLASSQ
ZROT	ZSCAL	ZSWAP	ZTREXC	ZTRMM	ZTRMV	ZTRSEN	ZTRSYL	ZUNG2R
ZUNGHR	ZUNGQR							

No desenvolvimento do código, foram utilizados todos os recursos disponíveis no Fortran 90/95[Lahey/Fujitsu Fortran 95 *Express*, 1999][Chapman, 1998], para tornar o código mais otimizado possível. Entre estes recursos estão o uso de `ALLOCATABLE` e `ALLOCATE` (alocação dinâmica de memória), `POINTER` (ponteiros), `MODULE` (módulos, que substituem os antigos e obsoletos `COMMON`), `EXIT`, `INTERFACE`, entre vários outros.

4.3 A Saída de Resultados (Módulo `LTSN3.f90`)

Este módulo, `LTSN3.f90`, contém a saída formatada dos resultados. A sub-rotina principal é a SUBROUTINE `write_data`. Como mencionado a saída será através de redirecionamento de I/O. A formatação de saída será realizada de maneira clara e objetiva para facilitar a análise dos resultados. Entre as principais características deste arquivo de saída estão:

- A entrada de dados é reproduzida, de modo a facilitar a localização de eventuais erros, devido ao preenchimento do arquivo de entrada “`input.inp`”. Este é um procedimento padrão, em códigos computacionais.
- Os erros ocorridos durante a execução e entrada de dados serão informados, juntamente com a sua possível causa.
- O tempo computacional para cada etapa de cálculo será informado e ao final o tempo total é computado.
- É possível uma visualização gráfica dos resultados, através do Aplicativo DISLIN [DISLIN, 2002]. O DISLIN é um software de livre acesso, disponível na Internet, e é uma biblioteca de softwares gráficos, de alto nível e fácil uso, para plotar dados como curvas, gráficos de barras, plotagem coloridas em 3D, superfícies, mapas e outros. É um software disponível para compiladores C/C++, Fortran 77 e Fortran 90.
- Também é possível, para uma melhor avaliação dos resultados, obter-se saídas dos resultados no formato `*.DAT`, para uso em softwares geradores de gráficos, do tipo ORIGIN[®], GRAPHER[®], GNUPLOT, entre outros.
- Uma vez analisados os resultados, será possível obter saídas dos resultados no formato de tabelas do LaTeX[Kopka e Daly, 1997][MIKTeX, 2002]. Isto simplificará muito a transferência dos resultados para publicações, que usem como padrão o LaTeX.

Um exemplo do arquivo de saída – `output.out`, mostrando o *layout* de saída, é apresentado parcialmente a seguir. Este se refere a entrada de dados `input.inp`, da página 40.

```

output.out
1      LTSN_v1.0 - Problema S2PO - sem Fonte
2      Output Data by LTSN Method - Slab Geometry - PROBLEM NUMBER 1
3
4      *****
5      *                                     *
6      *               #####               *
7      *             ##### #               *
8      *           #####                   *
9      *         ##### ##### #           *
10     *       ##### ## ## # ##### #     *
11     *     ##### #   ## # ##### #     *
12     *   #####   ##   #####           *
13     *  #####    ##    #####           *
14     * #####     ##     #####          *
15     * #####      ##      ##### #     *
16     * ##### # ##### #   ##### #     *
17     * ##### # ##### #   ##### #     *
18     * ##                                     *
19     *                                     *
20     *                                     *
21     *           LTSN CODE - PC VERSION 1.0.10 (FEBRUARY 2002)
22     *           LAHEY/FUJITSU FORTRAN 95 EXPRESS Compiler
23     *           GNU/Linux Plataform - RedHat 6.2
24     *                                     *
25     *           GILBERTO ORENGO
26     *           (g.orengo@via-rs.net)
27     *           DEPARTAMENTO DE ENGENHARIA NUCLEAR - UFRGS
28     *           Porto Alegre - Rio Grande do Sul - Brasil
29     *                                     *
30     * *****
31
32     INPUT DATA - LTSN CODE:
33
34     1.PROBLEM-IPN:                1      2.DIRECT/ADJOINT-IFC/0/1:      0
35     3.ORDER OF SCATTERING-ISCT:  0      4.ORDER SN-ISN/2/4/6/...:    2
36     5.GROUP ENERGY-IGN:         2      6.LEFT BC-IBL/0/1/2:      0
37     7.RIGHT BC-IBR/0/1/2:        1      8.NO. OF ZONES-IRN:        1
38     9.DIAG/SCHUR/BOTH-IDS/0/1/2: 0      10.CRITICALITY-ITC/0/1/2:  0
39     11.POS. SIGMA TOTAL-IPXT:     3      12.POS. SIGMA G'>G-IPXGG:  4
40     13.LENGTH XS TABLE-ILXS:    8      14.READ EXT. XS-INXSE/0/1:  1
41     15.READ INT. XS-INXSI/0/1:    0      16.SOURCE TERM-IS/0/1:     0
42     17.DSLIN OUTPUT-IDSLIN/0/1:   0      18.DATA FILE-IDF/0/1:      0
43     19.LATEX FILE-ITEX/0/1:       0
44
45     >>> ERROR NOT FOUND
46
47     13$ Identificacao da Entrada da Biblioteca
48     12
49     >>> ERROR NOT FOUND
50
51     9* Dimensao das Regioes: REGIAO 1 = 20.0 cm
52     >>> ERROR NOT FOUND
53     ...
54     SCALAR FLUX
55     GROUP 1
56     x(cm)      Scalar Flux          x(cm)      Scalar Flux
57     1.0        1.290053787610762E+001  2.0        1.003405398551076E+001
58     3.0        9.875437822761067E+000  4.0        9.655437822761067E+000
59     ...
60     >>> FINISHED WITHOUT ERROR
61     >>> WITHOUT FILE *.DAT
62     >>> WITHOUT FILE *.TEX

```

CAPÍTULO 5

RESULTADOS NUMÉRICOS

Para validar o código LTSN dois problemas básicos já estabelecidos foram resolvidos: um relativo ao fluxo angular e escalar, tanto para o fluxo direto como para o adjunto, cuja importância está relacionada com busca de convergência, relação de reciprocidade e comprovação da solução adjunta, e; um problema de criticalidade, para comprovar a eficácia do algoritmo de busca iterativa de k_{eff} e espessura crítica, cujos dados foram obtidos da Ref. [Sood et al., 1999]. O primeiro, são dos resultados do problema da Ref. [Gonçalves et al., 2002].

5.1 PROBLEMA 1 – Solução Adjunta

Serão considerados cinco problemas adjuntos de transporte cuja simplicidade deve-se ao caráter de problema-teste. Os resultados obtidos por simulações numéricas são comparados ou com a resposta de um detector, de acordo com a interpretação da solução adjunta como função importância, ou pelas relações de reciprocidade ou pela comparação com o código ANISN.

Os problemas, todos com espalhamento anisotrópico, são apresentados na seqüência abaixo. Para o problema de transporte direto, são consideradas condições de contorno de superfície livre e, para o adjunto, $\phi^*(0, \mu, E) = 0$ para $\mu < 0$, $\phi^*(x_0, \mu, E) = 0$ para $\mu > 0$. Os tempos computacionais, para todos os cinco problemas, foram de no máximo 60s. No último problema (1–6) é apresentado o avanço que o uso do método iterativo acrescentou, no que trata de esforço computacional.

5.1.1 Problema 1–1: Convergência Numérica

Para demonstrar a convergência numérica da solução LTS_N para problemas adjuntos de transporte, neste exemplo é calculada a solução adjunta escalar, em uma posição fixa ($x = 15cm$), para várias ordens de quadratura. O problema a ser resolvido é monoenergético, com espessura de placa $x_0 = 150cm$ e com fonte adjunta exponencial, $\sigma = e^{-0,5x}$. A seção de choque macroscópica total é $\Sigma_t = 2,9664cm^{-1}$ e os coeficientes do kernel de espalhamento são $\Sigma_{s_0} = 2,8876cm^{-1}$ e $\Sigma_{s_1} = 1,2781cm^{-1}$. Os resultados são mostrados na Tabela 5.1.

Tabela 5.1 – Resultados Numéricos para Fontes Exponencial, Delta e Gaussiana.

N	Fonte Exponencial	Fonte Delta	Fonte Gaussiana
2	0,016279475	0,170275154	0,520868568
4	0,016419778	0,170490085	0,519563294
10	0,016422133	0,170489519	0,519554154
20	0,016422420	0,170489521	0,519555191
30	0,016422471	0,170489539	0,519555211
40	0,016422489	0,170489578	0,519555219
50	0,016422497	0,170489611	0,519555224
80	0,016422506	0,170489625	0,519555244
100	0,016422507	0,170489629	0,519555254
200	0,016422509	0,170489638	0,519555271
300	0,016422510	0,170489641	0,519555275
400	0,016422511	0,170489642	0,519555275
500	0,016422511	0,170489642	0,519555275

Destes resultados, nota-se a convergência numérica da solução adjunta para $N > 4$ pelo método LTS_N . Isto está respaldado pela comprovada convergência do método para a solução exata do problema unidimensional [Pazos e Vilhena, 1998b; Pazos e Vilhena, 1998a; Pazos e Vilhena, 1999].

5.1.2 Problema 1–2

Neste segundo exemplo, considera-se o problema adjunto de transporte multigrupo, espessura da placa $x_0 = 200\text{cm}$ e fonte unitária distribuída em todo o espaço de fase do sistema. Ou seja, pela interpretação de função importância, a solução deste problema expressa a capacidade de contribuição de cada ponto do espaço de fase para o fluxo integrado do sistema. Neste sentido, para a comparação de resultados, calculou-se o fluxo de nêutrons integrado através da solução de um problema de transporte com uma fonte externa unitária localizada na cela $(0, \mu_i, E_g)$ do espaço de fase. Fez-se isto para as $N/2$ direções positivas e para os três grupos de energia considerados. As seções de choque são mostradas na Tabela 5.3 (abaixo, pág. 47) e os resultados para a solução LTS_N ($N=200$) estão na Tabela 5.2.

Tabela 5.2 – Comparação entre o fluxo integrado devido a fonte $S_{gi}(0)$ e a solução adjunta na cela $(0, \mu_i, E_g)$ para a solução LTS_N ($N=200$) do problema 1–2.

Grupo (g)	Direção μ	Fluxo Integrado no Sistema	Solução Adjunta em $x = 0$
1	1	1,05184425	1,05184425
1	2	2,16707119	2,16707119
1	3	2,67298761	2,67298761
1	4	2,37648740	2,37648740
2	1	2,16072716	2,16072716
2	2	4,36141952	4,36141952
2	3	5,17355101	5,17355101
2	4	4,32063201	4,32063201
3	1	5,9816934E-001 ^(*)	5,9816934E-001
3	2	1,20947878	1,20947878
3	3	1,43995162	1,43995162
3	4	1,21064849	1,21064849

(*) : $5,9816934\text{E-}001 = 5,9816934 \times 10^{-001}$

Neste exemplo, os resultados ficam comprovados pela consistência da solução adjunta como função importância.

Tabela 5.3 – Seções de Choque Macroscópicas em multigrupo e formato P₁

Grupo	Σ_T	$\Sigma_{s_0, g' \rightarrow g}$	$\Sigma_{s_1, g' \rightarrow g}$
(g)	(cm^{-1})	(cm^{-1})	(cm^{-1})
1	0,75290	1 \rightarrow 1 = 0,621500	1 \rightarrow 1 = 0,392300
	0,75290	2 \rightarrow 1 = 0,000336	2 \rightarrow 1 = 0,000210
	0,75290	3 \rightarrow 1 = 0,000000	3 \rightarrow 1 = 0,000000
2	0,88798	1 \rightarrow 2 = 0,027490	1 \rightarrow 2 = 0,016350
	0,88798	2 \rightarrow 2 = 0,839750	2 \rightarrow 2 = 0,684400
	0,88798	3 \rightarrow 2 = 0,000150	3 \rightarrow 2 = 0,000080
3	0,98650	1 \rightarrow 3 = 0,007490	1 \rightarrow 3 = 0,004350
	0,98650	2 \rightarrow 3 = 0,033400	2 \rightarrow 3 = 0,022300
	0,98650	3 \rightarrow 3 = 0,867600	3 \rightarrow 3 = 0,161900

5.1.3 Problema 1–3

Sabe-se que a solução adjunta e o fluxo angular, para problemas monoenergéticos, obedecem à relação de reciprocidade $\phi(x, \mu) = \phi^*(x, -\mu)$. Neste exemplo, resolve-se o problema adjunto de transporte monoenergético, com espessura de placa $x_0 = 80cm$ e com fonte externa, uma função delta de Dirac localizada na posição $x = 76cm$, $\delta(x - 76)$. Para comparar os resultados dessa solução, baseando-se na relação de reciprocidade, é resolvido um problema de transporte monoenergético, para a mesma espessura de placa e uma fonte delta de Dirac com emissão isotrópica, também localizada na posição $x = 76cm$. A seção de choque macroscópica total é $\Sigma_t = 1,0cm^{-1}$ e os coeficientes do kernel de espalhamento são $\Sigma_{s_0} = 0,99cm^{-1}$ e $\Sigma_{s_1} = 0,8cm^{-1}$. O fluxo angular e a solução adjunta são calculados na posição $x = 37cm$ e os resultados para a solução LTS_N (N = 200) são mostrados na Tabela 5.4 (pág. 48).

Confirmando, pela relação de reciprocidade $\phi(x, \mu) = \phi^*(x, -\mu)$, os bons resultados da solução adjunta pelo método LTS_N.

Tabela 5.4 – Relação de reciprocidade: $\phi(x, \mu) = \phi^*(x, -\mu)$.

DIREÇÃO (μ)	FLUXO ANGULAR	SOLUÇÃO ADJUNTA
9,8156E-001 ^(*)	4,145754E-002	9,159114E-002
9,0411E-001	4,316739E-002	8,930521E-002
7,6990E-001	4,617611E-002	8,541212E-002
5,8731E-001	5,036437E-002	8,025121E-002
3,6783E-001	5,555025E-002	7,424471E-002
1,2523E-001	6,148370E-002	6,784396E-002
-1,2523E-001	6,784396E-002	6,148370E-002
-3,6783E-001	7,424471E-002	5,555025E-002
-5,8731E-001	8,025121E-002	5,036437E-002
-7,6990E-001	8,541212E-002	4,617611E-002
-9,0411E-001	8,930521E-002	4,316739E-002
-9,8156E-001	9,159114E-002	4,145754E-002

(*)9,8156E-001 = $9,8156 \times 10^{-001}$

5.1.4 Problema 1-4

Neste exemplo, para comparação de resultados, usa-se a relação de reciprocidade $\phi^*(x, \mu, E) = \phi(x', \mu', E')$, onde a fonte adjunta está posta em (x', μ', E') e a fonte direta, em (x, μ, E) . Usando a solução LTS_N para $N = 100$, resolve-se o problema adjunto de transporte para uma placa de espessura $x_0 = 180cm$, com uma fonte delta de Dirac localizada na posição $x = 42cm$, direção $\mu_5 = 0,6187$ e no grupo E_2 e um problema direto, nesta mesma placa, com uma fonte delta de Dirac localizada na posição $x = 11cm$, direção $\mu_9 = -0,0950$ e no grupo E_3 . As seções de choque associadas aos grupos de energia são mostradas na Tabela 5.3. Os resultados obtidos são:

$$\phi^*(11, \mu_9, E_3) = 1,38895329E-007$$

e

$$\phi(42, \mu_5, E_2) = 1,38895329E-007,$$

comprovando pela relação de reciprocidade, a precisão dos resultados para a solução adjunta pelo método LTS_N .

5.1.5 Problema 1–5

Neste problema, considera-se uma placa com espessura $x_0 = 100$ cm e o fluxo adjunto é obtido para uma fonte unitária, para os três grupos de energia, cujas seções de choque são mostradas na Tabela 5.3 (pág. 47), localizada ao longo de toda a placa. A função importância para este problema está relacionada com a contribuição de cada ponto do espaço de fase para o fluxo integrado. A solução adjunta para $N = 4$ para este problema é comparada com ANISN S_4P_1 e os resultados são apresentados na Figura 5.1, onde é possível mostrar uma boa concordância entre ambos os métodos em todos os grupos de energia não só pelo comportamento da função mas também pelos valores numéricos.

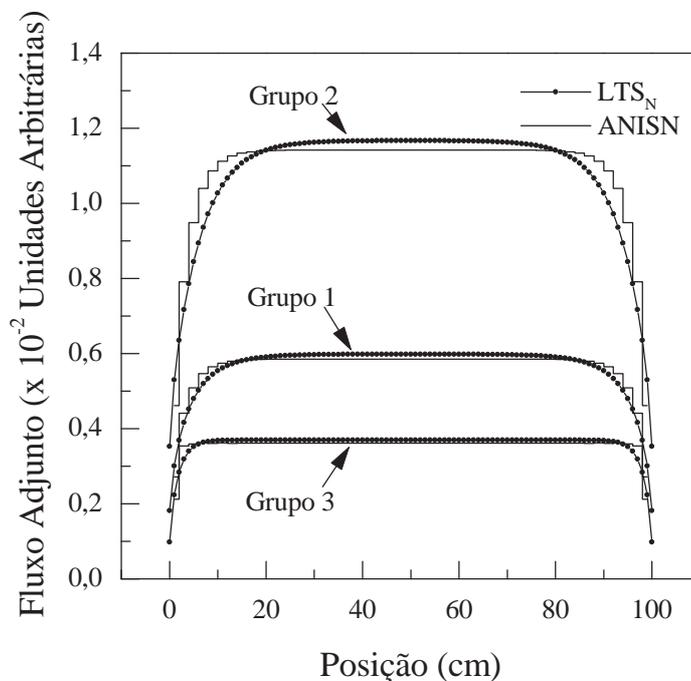


Figura 5.1 – Comparação entre os métodos LTS_N ($N = 4$) e ANISN S_4P_1 para a solução adjunta.

5.1.6 Problema 1–6: Comparação de Esforço Computacional dos Métodos de Gauss e Iterativo

Para mostrar o avanço que o Método Iterativo proporcionou ao Método LTS_N , foi realizado um cálculo comparativo entre o método anteriormente utilizado (Gauss) e o proposto

neste trabalho. Para tanto foi retomado o Problema 1-1, para fonte exponencial ($\sigma = e^{-0,5x}$) e realizados cálculos para diferentes valores de quadratura (N) e obtidos os tempos computacionais. O tempo encontrado é o tempo de uso de CPU e, foi realizado num computador tipo PC-Pentium III de 933MHz/512 MB de memória RAM. Os resultados estão na Tabela 5.5

Tabela 5.5 – Comparação de esforço Computacional entre os Métodos de Gauss e o Iterativo-GMRES

N	Método de Gauss	Método Iterativo — GMRES	Diferença
500	52,5 s	36,9 s	29,7%
700	77,1 s	56,8 s	27,6%
900	104,5 s	76,1 s	27,2%
1000	115,6 s	84,5 s	26,9%

Observa-se que o método iterativo trouxe uma redução em torno de 27% de esforço computacional.

5.2 PROBLEMA 2 – Criticalidade

Para testar o módulo que calcula criticalidade, foram utilizados os dados dos problemas *benchmark* da Ref. [Sood et al., 1999], páginas 16, 30 e 35. Os estudos se referem a solução da dimensão crítica ($k_{eff} = 1$), para um sistema crítico. Dois cálculos foram obtidos para cada caso: o cálculo do k_{eff} a partir do valor da espessura crítica e ; o cálculo da espessura para o sistema crítico. Será empregado a seguinte nomenclatura para apresentação dos problemas: **xG/Ey/Material**, que significa **x** Grupos de energia com **E**spalhamento isotrópico ($y=I$) ou **E**spalhamento linearmente anisotrópico ($y=LA$), para um determinado material físsil. Nos casos estudados foi utilizado o método da diagonalização para a inversão da matriz LTS_N . Os tempos computacionais (TC) referem-se aos tempos de CPU num computador tipo PC-866 MHz/256 MB de memória RAM.

5.2.1 Problema 2–1: 1G/EI/Pu-239

Neste problema é obtido o fator de multiplicação efetivo (k_{eff}) e a dimensão crítica (x_c) para o caso do Pu-239 nu. Os dados, como as seções de choque macroscópicas e o número médio de nêutrons por fissão, estão na Tabela 5.6.

Tabela 5.6 – Dados Nucleares para o Pu-239 do problema 2–1.

Material	ν	Σ_f	Σ_c	Σ_s	Σ_t	c
Pu-239	3,24	0,081600	0,019584	0,225216	0,32640	1,50

Os resultados obtidos para o caso, para k_{eff} e dimensão crítica (x_c), estão na Tabela 5.7 e são comparados com os obtidos da Ref. [Sood et al., 1999].

Tabela 5.7 – Resultados obtidos para Problema 2–1 (Pu-239).

	Resultados LTS _N		Ref. [Sood et al., 1999]
	N = 150	TC(s)	
k_{eff}	1,000000	76	1,000000
$x_c(cm)$	3,707444	68	3,707444

5.2.2 Problema 2–2: 2G/EI/Reator de Pesquisa-U

Neste problema é obtido o fator de multiplicação efetivo (k_{eff}) e a dimensão crítica (x_c) para $k_{eff} = 1$) para o caso de um reator nuclear de pesquisa de Urânio, um único meio com dois grupos de energia e espalhamento isotrópico. Os dados nucleares, como as seções de choque macroscópicas (cm^{-1}), o número médio de nêutrons por fissão (ν) e o espectro de fissão (χ), estão na Tabela 5.8.

Os resultados obtidos, para k_{eff} e dimensão crítica (x_c), estão na Tabela 5.9 e são comparados com os obtidos da Ref. [Sood et al., 1999].

Tabela 5.8 – Dados nucleares, $g=2$, para o reator de pesquisa do problema 2–2.

Grupo Rápido						
ν_2	Σ_{2f}	Σ_{2c}	Σ_{22s}	Σ_{12s}	Σ_2	χ_2
2,50	0,0010484	0,0010046	0,62568	0,029227	0,65696	1,0
Grupo Lento						
ν_1	Σ_{1f}	Σ_{1c}	Σ_{11s}	Σ_{21s}	Σ_1	χ_1
2,50	0,050632	0,025788	2,44383	0,0	2,52025	0,0

Tabela 5.9 – Resultados obtidos para Problema 2–2.

	Resultados LTS_N		Ref. [Sood et al., 1999]
	N = 150	TC(s)	
k_{eff}	1,000000	112	1,000000
$x_c(cm)$	15,1337058	105	15,1337060

Os fluxos escalares para os dois grupos de energia, do reator de pesquisa, para quatro (4) posições espaciais (x/x_c) estão na Tabela 5.10. Todos os valores foram normalizados com o fluxo do grupo rápido obtido no centro da geometria.

Tabela 5.10 – Fluxos Escalares normalizados, para 2 grupos do Problema 2–2.

x/x_c		Resultados LTS_N	Ref. [Sood et al., 1999]
0,241394	Rápido	0,943363	0,943363
	Lento	0,340123	0,340124
0,502905	Rápido	0,761973	0,761973
	Lento	0,273056	0,273056
0,744300	Rápido	0,504011	0,504012
	Lento	0,173845	0,173845
1,0	Rápido	0,147598	0,147598
	Lento	0,021232	0,021232

5.2.3 Problema 2–3: $2G/EA/U-D_2O$

Neste problema é obtido o fator de multiplicação efetivo (k_{eff}) e a dimensão crítica (x_c) para o caso de um reator nuclear a U-D₂O, para dois grupos de energia e com espalhamento linearmente anisotrópico. Os dados, como as seções de choque macroscópicas (cm^{-1}), o número médio de nêutrons por fissão (ν) e o espectro de fissão (χ), estão na Tabela 5.11.

Tabela 5.11 – Dados nucleares para o sistema U-D₂O do problema 2–3.

Grupo Rápido								
ν_2	Σ_{2f}	Σ_{2c}	Σ_{22s_0}	Σ_{22s_1}	Σ_{12s_0}	Σ_{12s_1}	Σ_2	χ_2
2,50	0,002817	0,008708	0,31980	0,06694	0,004555	-0,0003972	0,33588	1,0
Grupo Lento								
ν_1	Σ_{1f}	Σ_{1c}	Σ_{11s_0}	Σ_{11s_1}	Σ_{21s_0}	Σ_{21s_1}	Σ_1	χ_1
2,50	0,097	0,02518	0,42410	0,05439	0,0	0,0	0,54628	0,0

Os resultados obtidos, para k_{eff} e dimensão crítica (x_c), estão na Tabela 5.12 e são comparados com os obtidos da Ref. [Sood et al., 1999].

Tabela 5.12 – Resultados obtidos para Problema 2–3 (U-D₂O).

	k_{eff}	x_c (cm)	TC(s)
Resultados LTS _N (N = 120)	1,00000	2001,012266	98
Ref. [Sood et al., 1999]	1,00000	2001,012261	–

Nota-se, nos três casos analisados acima, que os resultados concordam com os da Ref. [Sood et al., 1999], demonstrando que o método LTS_N pode ser utilizado para cálculos de criticalidade. Em todos os casos estudados a quadratura escolhida para cálculo foi acima de N= 100 e mesmo assim o custo computacional foi baixo, como mostram os valores obtidos para os tempos de CPU. Isto demonstra que o código também está otimizado.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÕES E PROPOSTAS FUTURAS

O objetivo principal deste trabalho foi desenvolver um código computacional, para cálculo em transporte de nêutrons utilizando a formulação LTS_N . Neste sentido o objetivo foi alcançado e, mais, o método avançou do ponto de vista numérico com a implementação de recursos que o otimizaram. Os resultados obtidos através desta primeira versão foram conclusivos que o método é uma ferramenta poderosa no estudo de neutrônica, em geometria plana.

Entre os avanços numéricos, os que devem ser ressaltados são: i) a alteração na busca do intervalo de variação do k_{eff} e ii) o uso do método iterativo para solução do sistema de equações, que permitiram uma redução considerável do esforço computacional e o cálculo de autovalor k_{eff} para elevadas ordens de quadratura, sem necessidade da aplicação do método da potência. Além disso, forneceram maior confiabilidade nos resultados. A aplicação do método iterativo reduziu de “ n ” o número de operações já que o número de operações é da ordem de n^2 e, com isso menos erros são transportados ao longo do cálculo. Este trabalho fez o fechamento do estudo de criticalidade, pelo método LTS_N , para autovalores reais usando o método da bissecção.

Um destaque que deve ser salientado é que a partir deste trabalho o método LTS_N poderá ser uma referência tipo “*benchmark*”, pois tem-se o controle do erro (monitorando-se o N), sendo que os resultados apresentados apontam neste sentido. Tal conclusão é corroborada pela comprovada convergência do método LTS_N .

Como ficou claro durante o desenvolvimento do trabalho, o resultado seria a primeira versão do código $LTSN$. A partir deste ponto o código tende a aglutinar mais e mais avanços. É o caso, como exemplo, do estudo do transporte de nêutrons em geometria cilíndrica, que está em desenvolvimento pelo grupo do Prof. Vilhena. É bom ressaltar, que o código foi

desenvolvido usando os recursos modernos da linguagem Fortran (Fortran 90/95), os quais permitirão uma fácil ampliação do código. Assim, além desta possibilidade, outras que sugerem trabalhos futuros nesta linha são:

- Desenvolvimento de um algoritmo para uma solução da integral de convolução com uma fonte genérica. Esta proposta deverá englobar a existente, que tem como termos de fonte as funções delta, gaussiana e exponencial.
- Incorporação de uma sub-rotina que envolva estudos de Função Resposta: $R = \langle \Phi^* \cdot S \rangle = \langle \Phi \cdot S^* \rangle$, onde Φ e Φ^* são, respectivamente, o fluxo direto e o adjunto e, S e S^* são, respectivamente, a fonte direta e a adjunta.
- Estudos de Doses Radioativas usando a formulação LTS_N .
- Implementação das sub-rotinas para cálculo da densidade atômica, o *Number Density*.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Arfken, G., 1985. “**Mathematical Methods For Physics**”. Academic Press, Inc., San Diego, CA.

Barichello, L. B., 1992. “**Formulação Analítica para Solução do Problema de Ordenada Discreta Unidimensional**”, Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Barichello, L. B., 1996, “**Comunicação Pessoal**”.

Barichello, L. B. and Vilhena, M. T., 1993. “A General Approach to One Group One Dimensional Transport Equation”, **Kerntechnik**, vol. 58(3), pp. 182–184.

Batistela, C. H. F., Vilhena, M. T., and Borges, V., 1996. “Cálculo do Fator de Multiplicação K_{eff} pelo Método LTS_N ”, **EGATEA-Revista da Escola de Engenharia/UFRGS**, vol. 24(01), pp. 101–111.

Batistela, C. H. F., Vilhena, M. T., and Borges, V., 1997. “Criticality by the LTS_N Method”, **Journal of Nuclear Science and Technology**, vol. 34(6), pp. 603–606.

Bell, G. I. and Glasstone, S., 1985. “**Nuclear Reactor Theory**”. Krieger Publishing Company, Malabar, Florida.

Brancher, J. D., Cardona, A. V., and Vilhena, M. T., 1998. “A Recursive Method to Invert the LTS_N Matrix”, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 33(4), pp. 393–401.

Brancher, J. D., Segatto, C. F., and Vilhena, M. T., 1999. “The LTS_N Solution for Radiative Transfer Problem Without Azimuthal Symmetry With Severe Anisotropy”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 62(6), pp. 743–753.

Cardona, A. V. and Vilhena, M. T., 1994. “A Solution of Linear Transport Equation Using Walsh Function and Laplace Transform”, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 21(8), pp. 495–505.

Chandrasekhar, S., 1960. “**Radiative Transfer**”. Dover Publications, Inc., New York.

Chapman, S. J., 1998. “**Fortran 90/95 for Scientists and Engineers**”. WCB McGraw-Hill, Boston, Massachusetts.

Cunha, C., 2000. “**Métodos Numéricos**”. Editora da Unicamp, Campinas-SP, 2a. edition.

Cunha, R. D. and Hopkins, T. R., 1994a. “A Parallel Implementation Of The Restarted GMRES Iterative Method For Nonsymmetric Systems Of Linear Equations”, **Advances In Computational mathematics**, vol. 3(2), pp. 261–277. Also as TR-7-93, Computing Laboratory, University of Kent at Canterbury.

Cunha, R. D. and Hopkins, T. R., 1994b, “**PIM 2.2 The Parallel Iterative Methods package for Systems of Linear Equations**”. Instituto de Matemática e Centro Nacional de Supercomputação, UFRGS – Brasil.

Derivi, A. G., 1999. “**Código Computacional para Cálculos de Criticalidade em Placas pelo Método LTS_N** ”, Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

DISLIN, 2002, “<http://www.linmpi.mpg.de/dislin>”. Último acesso: fevereiro de 2002.

Duderstadt, J. J. and Hamilton, L. J., 1976. “**Nuclear Reactor Analysis**”. John Wiley & Sons, Inc., New York.

Duderstadt, J. J. and Martin, W. R., 1979. “**Transport Theory**”. John Wiley & Sons, Inc., New York.

Golup, G. H. and Loan, C. F. V., 1989. “**Matrix Computation**”. The Johns Hopkins University Press.

Gomes, M. G., 1999. “**Métodos de Inversão Matricial para $(sA + B)$ em Problemas de Transporte de Nêutrons**”, Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Gonçalves, G. A., 1999. “**Solução LTS_N da Equação Adjunta de Transporte de Nêutrons com Fonte Arbitrária para Elevada Ordem de Quadratura numa Placa Homogênea**”, Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Gonçalves, G. A., Orengo, G., Vilhena, M. T., and Graça, C. O., 2002. “ LTS_N Solution Of The Adjoint Neutron Transport Equation With Arbitrary Source For High Order of Quadrature in a Homogeneous Slab”, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 29, pp. 561–569.

Gonçalves, G. A., Segatto, C. F., and Vilhena, M. T., 2000. “The LTS_N Particular Solution in a Slab for an Arbitrary Source and Large Order of Quadrature”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 66, pp. 271–276.

Graça, C. O., 1988. “Optimization of Blanket Design for Fusion Reactors by Higher Order Perturbation Theory”, **Nuclear Energy**, vol. 27, pp. 121–130.

Kopka, H. and Daly, P. W., 1997. “**A Guide to $\LaTeX 2_{\epsilon}$: Document Preparation for Beginners and Advanced Users**”. Addison-Wesley, Harlow, England.

Lahey-Fujitsu, 2002, “<http://www.lahey.com/>”. Último acesso: maio de 2002.

Lahey/Fujitsu, 1999, “**Lahey/Fujitsu Fortran 95 Language Reference**”. Lahey Computer Systems, Inc., 865 Tahoe Boulevard – P.O. Box 6091 – Incline Village, NV 89450-6091. Revision E.

Lahey/Fujitsu Fortran 95 *Express*, 1999, “**Lahey/Fujitsu Fortran 95 Express – User’s Guide/Linux Edition**”. Lahey Computer Systems, Inc., 865 Tahoe Boulevard – P.O. Box 6091 – Incline Village, NV 89450-6091. Revision A.

LAPACK-95, 2000, “**LAPACK95 – User’s Guide**”. <http://www.netlib.org/>. Último acesso: março de 2002.

Lewins, J., 1965. “**Importance: The Adjoint Fuction**”. Pergamon Press.

Lewis, E. E. and W. F. Miller, J., 1984. “**Computational Methods of Neutron Transport**”. John Wiley & Sons, Inc., New York.

Linux, 2002, “**<http://www.linux.org/>**”. Último acesso: maio de 2002.

MIKTeX, 2002, “**<http://www.miktex.org/>**”. Site com links e distribuição gratuita de pacotes, para Windows, como: LaTeX, WinShel, GhostView, e outros. Último acesso: abril de 2002.

Oliveira, J. V. P., 1993. “**Formulação LTS_N para o Problema de Ordenada Discreta com Anisotropia**”, Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Parsons, D. K., 1988, “**ANISN/PC Manual**”. Idaho Falls, Idaho.

Pazos, R. P. and Vilhena, M. T., 1998a. “Convergence in Transport Theory”, **Applied and Numerical mathematics**, vol. 30, pp. 1–14.

Pazos, R. P. and Vilhena, M. T., 1998b. “Convergence of the LTS_N Method: Approach of C_0 Semi-Groups”, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 34(1), pp. 77–86.

Pazos, R. P. and Vilhena, M. T., 1999. “Convergence of the Spectral Approximations for Steady-State Two-dimensional Transport Problem”, **Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications–International Conference, Madrid, Spain**, vol. 2, pp. 1965–1976.

Segatto, C. F. and Vilhena, M. T., 1994. “Extension of the LTS_N Formulation for Discrete Ordinates Problem Without Azimuthal Symmetry”, **Ann. Nuclear Energy**, vol. 21(11), pp. 701–710.

Segatto, C. F. and Vilhena, M. T., 1997. “Solução Genérica da Equação de Transporte Unidimensional para Elevadas Ordens de Quadraturas”, **Anais do XI ENFIR- Encontro Nacional de Física de Reatores e Termohidráulica–Poços de Caldas – MG**, vol. 1, pp. 238–242.

Segatto, C. F., Vilhena, M. T., and Brancher, J. D., 1999a. “The One-Dimensional LTS_N Formulation for High Degree of Anisotropy”, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 61, pp. 39.

Segatto, C. F., Vilhena, M. T., and Gomes, M. G., 1999b. “The One-Dimensional LTS_N Solution In a Slab With High Degree of Quadrature”, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 26, pp. 925–934.

Segatto, C. F., Vilhena, M. T., and Pazos, R. P., 1999c. “The State-of-the-art of the LTS_N Method”, **Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications–International Conference, Madrid, Spain**, vol. 2, pp. 1618–1631.

Sood, A., Forster, R. A., and Parsons, D. K., 1999, Analytical Benchmark Test Set for Criticality Code Verification. Technical Report LA–13511, Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, New Mexico.

Stamm’ler, R. J. J. and Abbate, M. J., 1983. “**Methods of Steady–State Reactor Physics in Nuclear Design**”. Academic Press, London.

Tavares, L. S. S., 2000. “**Cálculo dos Parâmetros Superficiais de Radiação pelo Método LTS_N** ”, Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Trzaska, Z., 1987. “An Efficient Algorithm for Partial Fraction Expansion of the Linear matrix Pencil Inverse”, **Journal of the Franklin Institute**, vol. 324, pp. 465.

Vilhena, M. T. and Barichello, L. B., 1991. “A New Analytical Approach to Solve the Neutron Transport Equation”, **Kerntechnik**, vol. 56(5), pp. 334–336.

Vilhena, M. T. and Barichello, L. B., 1995. “An Analytical Solution for the Multi-group Slab Geometry Discrete Ordinates Problem”, **Transport Theory and Statistical Physics**, vol. 24(9), pp. 1337–1352.

Vilhena, M. T., Barichello, L. B., and Segatto, C. F., 1994. “Estudo Comparativo de Métodos de Solução da Aproximação S_N da Equação de Transporte Linear”, **XVI Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional – XVI CNMAC**.

Vilhena, M. T. and Streck, E., 1992. “An Approximated Solution of the One-Group Neutron Transport Equation”, **Kerntechnik**, vol. 57, pp. 196.