

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

**Análise de Esquemas de Aproximações
Angulares para a Equação de Transporte
Bidimensional em Ordenadas Discretas via
Formulações Nodais**

por

Anderson Tres

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

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

Porto Alegre, Agosto de 2015.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Tres, Anderson

Análise de Esquemas de Aproximações Angulares para a Equação de Transporte Bidimensional em Ordenadas Discretas via Formulações Nodais / Anderson Tres.—Porto Alegre: PPGMAP da UFRGS, 2015.

134 p.: il.

Tese (doutorado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2015.

Orientadora: Basso Barichello, Liliane

Tese: Teoria de Transporte

Equação bidimensional de transporte de nêutrons, método de ordenadas discretas analítico, problemas de fonte fixa

**Análise de Esquemas de Aproximações
Angulares para a Equação de Transporte
Bidimensional em Ordenadas Discretas via
Formulações Nodais**

por

Anderson Tres

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

Doutor em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Teoria de Transporte

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

Banca examinadora:

Prof.^a Dr.^a Mariza de Camargo
UFSM/FW

Prof. Dr. Roberto David Martinez Garcia
IEAv-CTA

Prof. Dr. Yousry Azmy
North Carolina State University

Prof. Dr. Esequia Sauter
PPGMAp - UFRGS

Prof. Dr. Carlos Hoppen
Coordenador

AGRADECIMENTOS

Primeiramente agradeço a Deus por estar sempre presente em minha vida, me iluminando e me guiando a alcançar meus objetivos, independente das dificuldades encontradas.

Aos meus pais por me concederem o direito da vida e que, com muito esforço garantiram direta ou indiretamente que eu e meus irmãos tivéssemos uma boa formação acadêmica.

Ao Prof. Dr. Yousry Azmy por ter sido atencioso, amigo e por compartilhar seus conhecimentos durante meu doutorado-sanduíche.

A minha orientadora Prof.^a Dr.^a Liliane Basso Barichello que possibilitou que muitos dos meus sonhos se tornassem realidade. Devido a você, pude vivenciar momentos e experiências incríveis que jamais esquecerei. Não há palavras que expressam a imensa gratidão pela sua paciência, amizade e ensinamentos, não apenas os ligados às ações docentes, mas às lições de vida que passaste para mim. Tu não foste apenas uma orientadora, mas também foste uma mãe, uma amiga e uma pessoa que tenho grande admiração.

Agradeço aos meus amigos e colegas de doutorado, pela convivência agradável e todos os momentos de risos e tristezas, as aflições e as alegrias que passamos juntos durante esta etapa de minha formação.

As agências de fomento pelo apoio financeiro e a todas as pessoas que, de alguma forma, direta ou indireta, contribuíram para o meu sucesso.

Sumário

LISTA DE FIGURAS	viii
LISTA DE TABELAS	x
LISTA DE SÍMBOLOS	xii
LISTA DE ABREVIATURAS	xiv
RESUMO	xv
ABSTRACT	xvii
1 INTRODUÇÃO	1
2 EQUAÇÃO MULTIDIMENSIONAL DE TRANSPORTE DE NÊU- TRONS	11
2.1 Estimativa de erro na aproximação do termo integral da equa- ção de transporte	12
2.2 Esquemas de quadraturas numéricas multidimensionais	21
2.2.1 Quadratura simétrica de nível LQ_N	22
2.2.2 Conjuntos de quadratura Legendre-Chebyshev	24
2.2.2.1 Quadratura de Legendre-Chebyshev quadrangular	26
2.2.2.2 Quadratura de Legendre-Chebyshev triangular	28
2.2.3 Quadratura <i>Quadruple Range QR</i>	30

2.3	Análise de precisão das quadraturas numéricas na integração de funções polinomiais nos cossenos diretores	34
3	SOLUÇÃO ADO DA EQUAÇÃO BIDIMENSIONAL DE TRANSPORTE EM ORDENADAS DISCRETAS	41
3.1	Equações nodais unidimensionais	44
3.2	Aproximações do fluxo no contorno por funções constantes	46
3.3	Solução através do método ADO	49
3.4	Problemas de transporte de nêutrons de fonte-fixa	53
3.5	Solução particular baseada em aproximações constantes	54
3.5.1	Esquema nodal para o domínio completo	55
3.5.2	Solução geral dos <i>problemas I e II</i>	59
3.5.3	Esquema nodal para o domínio em regiões	65
3.5.4	Solução geral do <i>problema III</i>	67
4	RESULTADOS NUMÉRICOS	71
4.1	Resultados numéricos para o <i>problema I</i>	73
4.2	Resultados numéricos para o <i>problema II</i>	75
4.3	Resultados numéricos para o <i>problema III</i>	78
5	COMPORTAMENTO ASSINTÓTICO DE ERRO	95
5.1	Análise assintótica espacial	95

5.2	Análise assintótica angular	106
5.3	O efeito raio na solução da equação de transporte	111
6	CONCLUSÕES	117
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	120

Lista de Figuras

Figura 2.1	Quadratura simétrica de nível LQ_N para $N=8$	22
Figura 2.2	Configuração dos pesos da quadratura simétrica de nível LQ_N para um octante.	23
Figura 2.3	Quadratura P_6T_6 quadrangular.	28
Figura 2.4	Quadratura $P_N T_N S_6$	29
Figura 3.1	(a) <i>Problemas I e II</i> : Domínio representado por apenas uma região, com a fonte de nêutrons localizada no interior do domínio. (b) <i>Problema III</i> : Domínio representado em 4 regiões, com a fonte de nêutrons localizada na região (nodo) 1.	54
Figura 4.1	Fluxo escalar médio na região 1 para o <i>problema III</i> com $\sigma_s = 0,9$	81
Figura 4.2	Fluxo escalar médio nas regiões 2 e 3 para o <i>problema III</i> com $\sigma_s = 0,9$	84
Figura 4.3	Fluxo escalar médio na região 4 para o <i>problema III</i> com $\sigma_s = 0,9$	87
Figura 4.4	Fluxo escalar médio na região 1 para o <i>problema III</i> com $\sigma_s = 0,3$	89
Figura 4.5	Fluxo escalar médio nas regiões 2 e 3 para o <i>problema III</i> com $\sigma_s = 0,3$	91
Figura 4.6	Fluxo escalar médio na região 4 para o <i>problema III</i> com $\sigma_s = 0,3$	93
Figura 5.1	Convergência de $\phi_{ref}(ND)$ em relação ao número de direções por octante para a região 1 com $\sigma_s = 0,9$	99

Figura 5.2	Convergência de $\phi_{ref}(ND)$ em relação ao número de direções por octante para a região 1 com $\sigma_s = 0,3$	101
Figura 5.3	Erro absoluto em relação ao número de direções por octante na região 1 para $\sigma_s = 0,9$	104
Figura 5.4	Erro absoluto em relação ao número de direções por octante na região 1 para $\sigma_s = 0,3$	105
Figura 5.5	Fluxo escalar médio no contorno $x = 0,985$ e gráfico de contorno do fluxo em relação ao plano xy para o problema Benchmark com $\sigma_s = 0,9$. (a) - (b) são com respeito a quadratura LQ_{16} com 36 direções por octante, (c) - (d) Quadratura $P_N T_N S_{16}$ com 36 direções por octante, (e) - (f) Quadratura $P_{12} T_{12}$ com 36 direções por octante e (g) - (h) Quadratura QR $N_\theta = 4; N_\phi = 8$ com 32 direções por octante.	112
Figura 5.6	Fluxo escalar médio no contorno $x = 0,985$ e gráfico de contorno do fluxo em relação ao plano xy para o problema Benchmark com $\sigma_s = 0,3$. (a) - (b) são com respeito a quadratura LQ_{16} com 36 direções por octante. (c) - (d) Quadratura $P_N T_N S_{16}$ com 36 direções por octante, (e) - (f) Quadratura $P_{12} T_{12}$ com 36 direções por octante e (g) - (h) Quadratura QR $N_\theta = 4; N_\phi = 8$ com 32 direções por octante.	113
Figura 5.7	Fluxo escalar médio no contorno $x = 0,985$ e gráfico de contorno do fluxo em relação ao plano xy para o problema Benchmark com $\sigma_s = 0,3$. (a) - (b) Quadratura $P_N T_N S_{64}$ com 528 direções por octante e (c) - (d) Quadratura $P_{32} T_{32}$ com 256 direções por octante.	115

Lista de Tabelas

Tabela 2.1	Quadratura simétrica de nível LQ_N	24
Tabela 2.2	Quadratura Legendre-Chebyshev P_NT_N	27
Tabela 2.3	Quadratura Legendre-Chebyshev $P_NT_NS_N$	30
Tabela 2.4	Quadratura com respeito a integração da variável polar em geometria Cartesiana bidimensional.	32
Tabela 2.5	Quadratura com respeito a integração da variável azimutal em geometria Cartesiana bidimensional.	33
Tabela 2.6	Quadratura <i>Quadruple Range QR</i>	34
Tabela 2.7	Quantidade de direções discretas por octante para dadas ordens de quadratura numérica.	35
Tabela 2.8	Aproximação das funções polinomiais nos cossenos diretores dados pela Eq. (2.47), através da quadratura LQ_N	36
Tabela 2.9	Aproximação das funções polinomiais nos cossenos diretores dados pela Eq.(2.47) através da quadratura P_NT_N	37
Tabela 2.10	Aproximação das funções polinomiais nos cossenos diretores dados pela Eq. (2.47) através da quadratura $P_NT_NS_N$	38
Tabela 2.11	Aproximação das funções polinomiais nos cossenos diretores dados pela Eq. (2.47) através da quadratura QR	39
Tabela 4.1	Fluxos escalares $\phi_y(x) = \phi_x(y)$, para $x = y = 0, 5$	73
Tabela 4.2	Fluxos escalares $\phi_y(x) = \phi_x(y)$, para $x = y = 0, 7$	74

Tabela 4.3	Fluxos escalares $\phi_y(x) = \phi_x(y)$, para $x = y = 0,98$	75
Tabela 4.4	Fluxos escalares $\phi_y(x)$ e $\phi_x(y)$, para $x = y = 0,5$	76
Tabela 4.5	Fluxos escalares $\phi_y(x)$ e $\phi_x(y)$, para $x = y = 0,7$	77
Tabela 4.6	Fluxos escalares $\phi_y(x)$ e $\phi_x(y)$, para $x = y = 0,98$	77
Tabela 4.7	Fluxo escalar médio na região 1 para $\sigma_s = 0,9$	80
Tabela 4.8	Fluxo escalar médio nas regiões 2 e 3 para $\sigma_s = 0,9$	82
Tabela 4.9	Fluxo escalar médio na região 4 para $\sigma_s = 0,9$	85
Tabela 4.10	Fluxo escalar médio na região 1 para $\sigma_s = 0,3$	88
Tabela 4.11	Fluxo escalar médio nas regiões 2 e 3 para $\sigma_s = 0,3$	90
Tabela 4.12	Fluxo escalar médio na região 4 para $\sigma_s = 0,3$	92
Tabela 5.1	Ordem de convergência p e solução $\phi_{ref}(ND)$ para a região 1 com $\sigma_s = 0,9$	98
Tabela 5.2	Ordem de convergência p e solução $\phi_{ref}(ND)$ para a região 1 com $\sigma_s = 0,3$	100
Tabela 5.3	Ordem de convergência p nas regiões 2 e 3, com seção de choque de espalhamento $\sigma_s = 0,9$, via código AHOT.	102
Tabela 5.4	Ordem de convergência p para a região 4, com seção de choque de espalhamento $\sigma_s = 0,9$, via código AHOT.	103
Tabela 5.5	Soluções numéricas extrapoladas ϕ_{ref} para a região 1 com $\sigma_s = 0,9$.	109
Tabela 5.6	Soluções numéricas extrapoladas ϕ_{ref} para a região 1 com $\sigma_s = 0,3$.	110

LISTA DE SÍMBOLOS

$\Omega = (\mu, \eta, \xi)$	vetor direção das partículas
$\mathbf{r} = (x, y, z)$	vetor posição espacial
σ_t	seção de choque total
σ_s	seção de choque de espalhamento
$Q(\mathbf{r}, \Omega)$	termo de fonte externa de nêutrons
Y_l^n	função harmônico esférico
M	número de direções discretas
N	ordem de quadratura
w	pesos da quadratura numérica
θ	ângulo polar
ϕ	ângulo azimutal
$\Psi(x, y, \Omega)$	fluxo angular de nêutrons
τ	nodos ou regiões do problema
$\Psi_{y\tau}(x, \Omega)$	fluxo angular médio na variável x
$\Psi_{x,\tau}(y, \Omega)$	fluxo angular médio na variável y
$\Psi_{x,\tau}^h(y, \Omega)$	solução do problema homogêneo em y
$\Psi_{y,\tau}^h(x, \Omega)$	solução do problema homogêneo em x
$\Psi_{x,\tau}^p(y, \Omega)$	solução do problema particular em y
$\Psi_{y,\tau}^p(x, \Omega)$	solução do problema particular em x
$\Phi_{y,\tau}(\nu_\tau, \Omega)$	autofunções do problema homogêneo em x
$\Phi_{x,\tau}(\gamma_\tau, \Omega)$	autofunções do problema homogêneo em y
$\lambda_{y\tau}, \lambda_{x\tau}$	autovalores do problema homogêneo
ν_τ, γ_τ	constantes de separação
$A_j, B_j, C_j, D_j, A_{j,\tau}, B_{j,\tau}$	coeficientes da solução homogênea
$A_{x\tau}, D_{x\tau}, A_{y\tau}, D_{y\tau}$	matrizes dos problemas de autovalores

$U_y(\nu_\tau, \Omega), V_y(\nu_\tau, \Omega)$	vetores auxiliares
$U_x(\gamma_\tau, \Omega), V_x(\gamma_\tau, \Omega)$	vetores auxiliares
a_s, b_s, a, b	dimensões da fonte e do domínio (respectivamente)
$\phi_{y\tau}(x)$	fluxo escalar médio em x
$\phi_{x\tau}(y)$	fluxo escalar médio em y
ND	número de direções discretas
p	ordem de convergência
$\phi_{ref}(ND)$	solução de referência espacial
h_a	comprimento de discretização angular
ϕ_{ref}	solução de referência

LISTA DE ABREVIATURAS

ADO	Método Analítico de Ordenadas Discretas
$AHOT$	Método nodal <i>Arbitrarily High Order Transport</i>
LQ_N	Quadratura Simétrica de Nivel
$P_N T_N S_N$	Quadratura Legendre-Chebyshev triangular
$P_N T_N$	Quadratura Legendre-Chebyshev quadrangular
QR	Quadratura <i>Quadruple Range</i>
P_N	Polinômios de Legendre
T_N	Polinômios de Chebyshev

RESUMO

Neste trabalho é feito um estudo sobre a discretização angular da equação bidimensional de transporte de nêutrons e os erros de truncamento associados, decorrentes da representação da variável angular contínua por um conjunto de direções discretas. Estes erros incluem a aproximação da integral do termo de espalhamento por um conjunto de quadratura numérica, técnica que caracteriza o chamado método de ordenadas discretas. Quatro esquemas de quadraturas numéricas disponíveis na literatura são empregados no estudo: Simétrica de nível (LQ_N), Legendre-Chebyshev triangular ($P_N T_N S_N$), Legendre-Chebyshev quadrangular ($P_N T_N$), e *Quadruple Range* (QR), para a aproximação angular da equação de transporte. O uso do esquema de quadratura LQ_N , é limitado até ordem $N = 20$, enquanto que os demais permitem ordens de quadratura superiores.

As variáveis espaciais da equação de transporte angularmente discretizada são tratadas através de técnicas nodais e resultados numéricos são obtidos a partir de dois métodos: o método nodal *Arbitrarily High Order Transport* (AHOT) e o método Analítico de Ordenadas Discretas (ADO). Além do fato do método ADO não utilizar algoritmos de varredura numérica ou métodos iterativos para resolução das equações discretizadas resultantes, o mesmo determina soluções explícitas em termos das variáveis espaciais, via resolução de um problema de autovalores de ordem reduzida à metade do número de direções utilizadas na discretização angular.

O estudo é focado em problemas de fonte fixa, onde uma análise assintótica espacial e angular é feita a fim de determinar a ordem de convergência dos métodos e uma solução de referência para comparação dos resultados.

Foi observado que para um determinado esquema de quadratura, a propriedade de integrar exatamente polinômios de alta ordem nos cossenos diretores

não é suficiente para garantir uma maior precisão em termos de convergência espacial para a solução de referência. Ainda assim, os resultados numéricos mostram que o fluxo escalar médio ao longo de toda a região de fonte do problema, converge assintoticamente com discretização espacial quase idêntica para todas as quadraturas angulares consideradas, mas o erro assintótico angular (calculado em relação ao valor de referência espacial para cada conjunto de quadratura utilizada), não diminui consideravelmente com o aumento do número de direções angulares. Por outro lado, a utilização do conjunto de quadratura QR , indicou redução da flutuação dos valores dos fluxos, os chamados efeitos raio, para ordens de aproximação angular mais baixas do que os outros três esquemas de quadratura considerados. No entanto, com base nos resultados numéricos obtidos até agora, não é possível determinar a taxa de convergência assintótica do erro devido à discretização angular.

Além disso, foi possível incorporar quadraturas numéricas de ordem superior na formulação ADO, preservando propriedades importantes do método, tais como a redução da ordem do problema de autovalores, resultando uma maior eficiência computacional. As soluções ADO foram obtidas a partir da divisão do domínio em um número menor de regiões (até 2×2), mesmo assim apresentando boa precisão em comparação com a solução de referência espacial obtida através da extrapolação das soluções AHOT para sucessivos refinamentos de malhas (até 64×64).

ABSTRACT

In this work, we study the angular discretization of two-dimensional neutron transport equation and the associated truncation errors, deriving from the representation of continuous angular variable by a set of discrete directions. These errors comprise the approximation of the integral of the scattering term by a set of numerical quadrature, a technique that characterizes the so-called method of discrete ordinates. Four numerical quadrature schemes available in the literature are employed in our study: Level symmetric (LQ_N), Legendre-Chebyshev triangular ($P_N T_N S_N$), Legendre-Chebyshev quadrangular ($P_N T_N$), and Quadruple Range (QR), for the angular approximation of the transport equation. The use of the LQ_N quadrature scheme, is limited to order $N = 20$, while the others allow for arbitrarily high order quadratures.

The spatial variables of the angularly discretized transport equation are handled through nodal techniques and numerical results are obtained with two methods: the Arbitrarily High Order Transport methods of the nodal type (AHOT) and the Analytical Discrete Ordinates method (ADO). In addition to the fact that ADO does not require a mesh sweep algorithm or iterative methods for solving the resulting discretized equations, the method presents explicit solutions in terms of spatial variables via eigenvalue problem resolution of reduced order to half the number of directions used in the angular discretization.

The study is focused on fixed-source problems, where a spatial and angular asymptotic analysis is done in order to determine the convergence order of the methods and a reference solution for comparison of the results.

It was observed that, for a given quadrature scheme, the property of exactly integrating highest order direction cosines polynomials is not sufficient to

ensure higher accuracy in terms of spatial convergence to the reference solution. Still, numerical results show that the average scalar flux over the entire source region of the problem, converges asymptotically with the refinement of the spatial discretization almost identically for all angular quadratures considered, but the angular asymptotic error (computed against the reference value for each utilized quadrature set), does not decrease considerably with increasing number of angle directions. On the other hand, the use of QR quadrature set indicates larger reduction in the flux fluctuations known as ray effects for lower order angular approximation schemes than the other three sets considered. However, based on the numerical results we obtained so far, we are unable to determine the asymptotic convergence rate of the error due to angular discretization.

Furthermore, it was possible to incorporate the numerical high order quadrature in the ADO formulation, preserving important properties of the method, such as reducing the order of the eigenvalue problem that results in a higher computational efficiency. The ADO solutions were obtained by dividing the domain in a fewer number of regions (up to 2×2), still exhibiting good accuracy compared with the spatial reference solution obtained via extrapolation of AHOT solutions obtained on successively refined meshes (up to 64×64).

1 INTRODUÇÃO

Em vários ramos da ciência, a equação de Boltzmann, proposta por Ludwig Boltzmann durante seus estudos em teoria cinética dos gases [23], é a ferramenta matemática básica para o estudo quantitativo de fenômenos físicos. Entre as diversas áreas onde os modelos derivados da equação são comumente utilizados, pode-se citar o estudo de reatores nucleares [5, 58, 107], transporte de radiação [8, 45, 47, 89], cálculo de blindagem [106], simulação de fenômenos acústicos [43], dinâmica de gases rarefeitos [44, 88, 91, 102], estudo de microfluidos e microestruturas [90, 105], prospecção de petróleo [13, 33], fabricação de materiais cerâmicos [35], entre outros. Dentre os diferentes ramos de aplicação de tal equação, neste trabalho, dá-se ênfase à modelagem do transporte de nêutrons.

A equação de transporte de nêutrons ou equação linear de Boltzmann, representa um balanço matemático entre a produção e a perda de nêutrons, descrevendo quantitativamente a distribuição espacial, direcional, energética e temporal das partículas em meios materiais [22]. Em geral, a equação de transporte de nêutrons é estudada na forma integro-diferencial dependente de sete variáveis independentes: três espaciais, duas angulares, uma de energia e uma variável temporal. O tratamento analítico desta equação é muito complexo e devido a isso, métodos numéricos com enfoque probabilístico e determinístico têm sido usados na obtenção de sua solução. Diferentemente dos métodos probabilísticos, como Monte Carlo [29, 116], onde aborda-se o problema incluindo vários aspectos físicos da situação real, nos métodos determinísticos, a equação de transporte ou suas formas derivadas, são tratadas de forma aproximada através do uso de métodos numéricos. Para resolver numericamente a equação íntegro-diferencial, é necessário uma discretização das variáveis que compõem o espaço de fase. A variável energia, geralmente é discretizada através da aproximação multi-grupo [38], enquanto que as variáveis

que compõem o domínio espacial, são discretizadas através de diferentes métodos, cada um com sua abordagem individual em vários sistemas de coordenadas, dos quais pode-se citar: o método de diferenças finitas [51, 69, 84], o método de volumes finitos [83], o método de elementos finitos [65, 82, 117], os métodos nodais [9, 12, 21, 63, 108] ou da colocação nodal [26, 27, 50]. Já as variáveis que compõem o domínio angular da equação de transporte, são frequentemente tratadas através do método dos harmônicos esféricos [40, 41, 56, 64] ou do método de ordenadas discretas [11, 18, 21, 46, 49, 71, 115].

Neste trabalho, devido a versatilidade e a precisão em resolver problemas unidimensionais e multidimensionais da teoria de transporte, dá-se ênfase ao método de ordenadas discretas, para o tratamento do domínio angular da equação de transporte. O método de ordenadas discretas, introduzido por Wick [113] na resolução de problemas de transporte de nêutrons e, posteriormente por Chandrasekhar [32] em estudos de transferência radiativa, é frequentemente utilizado nos principais códigos computacionais em teoria de transporte [6, 61, 86, 94], e tem como base a discretização das variáveis angulares contínuas da equação de transporte em direções angulares discretas (ordenadas discretas) e aproximação da integral do termo de espalhamento, sobre todas as direções do movimento das partículas, como um somatório finito de direções angulares discretas via uso de quadraturas numéricas.

Especificamente para o caso de aproximações em ordenadas discretas da equação de transporte, diferentes métodos têm sido desenvolvidos para o tratamento da variável espacial, como métodos de elementos finitos descontínuos (*DGFEM*) [53, 109, 110], os métodos nodais Linear-Linear, Linear-Nodal e *AHOT* [9, 10], o método *LTS_N* [20], método ADO [18, 19], entre outros [11, 21, 39, 70, 89].

Os métodos nodais [9, 12, 21, 63, 108], por serem mais adequados ao uso de técnicas analíticas, são comumente utilizados na resolução de problemas multidimensionais, onde as equações em ordenadas discretas integradas transversalmente

em uma das variáveis espaciais, são resolvidas numericamente usando aproximações por polinômios de baixa ordem para o termo de fuga transversal e para os termos de fonte de espalhamento. O uso de esquemas nodais em problemas de transporte de nêutrons bidimensionais reduz a complexidade do modelo, uma vez que, os sistemas de equações diferenciais parciais (originados da discretização da integral angular), reduzem-se a sistemas de equações diferenciais ordinárias. No entanto, devido a integração, termos de fuga transversais desconhecidos no contorno dos nodos são introduzidos nas equações. No contexto de métodos nodais, a busca de equações auxiliares para representar exatamente as dependências espaciais desses termos de fuga transversais, é um problema em constante investigação [15, 36, 48, 52, 71, 81, 103, 114].

Nesta tese, dá-se ênfase ao método Analítico de Ordenadas Discretas (ADO), proposto por Barichello e Siewert [18], para o tratamento das variáveis espaciais das equações em ordenadas discretas. Este método tem se destacado na literatura e é caracterizado por possibilitar, no tratamento de problemas unidimensionais, o uso de esquemas de quadratura arbitrário do tipo *half-range*. Além disso, a utilização da abordagem ADO possibilita uma redução na ordem do problema de autovalores, este que determina as autofunções que compõem a solução das equações em ordenadas discretas, resultando em um ganho no custo computacional. O método ADO tem sido amplamente utilizado na resolução de problemas unidimensionais apresentando soluções explícitas e precisas em termos das variáveis espaciais, tanto na dinâmica de gases rarefeitos [44, 91, 92, 93], transferência radiativa [17, 18], como em problemas de transporte de nêutrons [19].

Devido a versatilidade do método ADO na resolução de problemas unidimensionais, estendeu-se a sua aplicação a problemas multidimensionais, onde juntamente com os métodos nodais são uma ferramenta importante no tratamento espacial das equações bidimensionais de transporte em ordenadas discretas.

Cabrera [24] realizou os primeiros estudos de problemas bidimensionais de transporte de nêutrons através da aplicação do método ADO em equações nodais, onde duas abordagens distintas foram utilizadas para o tratamento dos fluxos desconhecidos nas fronteiras (termos de fuga), tal que a primeira relaciona os fluxos desconhecidos ao fluxo médio no interior do domínio [14, 15], enquanto que na segunda abordagem, as relações para os fluxos desconhecidos são introduzidas no termo fonte do problema [79, 80]. No caso de métodos nodais, inicialmente os termos desconhecidos de fuga transversal foram aproximados por constantes [24], em seguida, aproximações mais gerais para estes termos, baseadas nas soluções dos problemas unidimensionais, foram propostas [79, 80]. Os problemas até aqui abordados pela formulação ADO multidimensional são de fonte fixa e dois tipos de soluções particulares têm sido implementadas, uma delas, de caráter mais geral, baseada na utilização de funções de Green [14, 80].

No desenvolvimento deste trabalho, contribuições ao estudo através da utilização da abordagem ADO em problemas bidimensionais de transporte de nêutrons foram feitas, como a introdução de condições de contorno do tipo reflexivas em problemas homogêneos de fonte fixa circundada por blindagem, considerando-se o domínio de forma reduzida e simplificando desta forma a formulação com redução de equações envolvidas [76, 100, 101, 103]. Em seguida, estendeu-se o estudo a problemas em meios heterogêneos [16], com a consideração de divisão do domínio em subregiões [75, 77].

Outro aspecto relevante no estudo do processo de discretização da equação de transporte via ordenadas discretas é o chamado efeito raio, associado à representação distorcida do fluxo angular. Em geral, este efeito ocorre em problemas cujas fontes ou fluxos possuem forte dependência angular, ou quando a fonte externa está localizada em uma pequena região do espaço, em meios de baixa densidade ou altamente absorvedores.

Ao longo dos anos muitas alternativas para reduzir ou eliminar a flutuação dos efeitos raio na solução das equações em ordenadas discretas tem sido propostas e estudadas [60, 64, 73]. De acordo com Lewis e Miller [64], uma destas alternativas pode ser feita através da transformação das equações em ordenadas discretas em equações harmônicos esféricos (P_N) [40, 42, 57, 59, 85], onde a dependência angular do fluxo de nêutrons é tratada através de funções polinomiais contínuas, e estas não sofrem efeitos raio. Porém, o tratamento das equações transformadas tem um custo computacional muito maior para serem resolvidas do que as equações convencionais em ordenadas discretas. Por esta razão, métodos híbridos foram desenvolvidos [72], demonstrando um custo computacional equivalente aos algoritmos em ordenadas discretas, entretanto, os efeitos raio não puderam ser totalmente eliminados, mas apenas reduzidos. Outra alternativa investigada foi baseada na aproximação das colisões primárias [7, 99]. Neste processo, o fluxo ainda não colidido é avaliado analiticamente em regiões isoladas e então, os resultados obtidos são utilizados para gerar numericamente uma aproximação para a primeira colisão das partículas com o meio, nas regiões de fonte. Outra abordagem que vem sendo prática e muito utilizada na redução dos efeitos raio, é baseada no aumento do número de direções discretas, e no uso de esquemas de quadraturas numéricas capazes de satisfazer momentos de ordem superior do fluxo angular, em relação aos cossenos diretores.

Dentre os conjuntos comumente utilizados em problemas multidimensionais de transporte, destaca-se a quadratura simétrica de nível LQ_N [62], esta que preserva simetria com respeito a $\pi/2$ rotações em torno do centro da esfera unitária. No entanto, existe uma limitação no uso desta quadratura, uma vez que, se sua ordem for maior que 20, alguns dos pesos do conjunto gerado tornam-se negativos, o que pode resultar soluções fisicamente impossíveis, quando utilizados na determinação do fluxo angular das equações em ordenadas discretas.

Neste sentido, alguns esquemas de quadratura foram propostos com o objetivo de contornar o problema de pesos negativos encontrado na quadratura simétrica de nível, como o conjunto de quadratura de pesos iguais EQ_N , desenvolvido por Carlson [31], que é caracterizado por apresentar pesos positivos, independente da ordem de quadratura escolhida. No esquema de quadratura EQ_N , os pesos são determinados através da relação $w = 1/[N(N + 2)]$, onde N representa a ordem da quadratura. Pode-se citar também, os conjuntos de quadratura de pesos positivos UE_N e UG_N , desenvolvidos por Carew e Zamonsky [28], onde o conjunto de quadratura UE_N é derivado através do particionamento uniforme da esfera unitária no número de direções definidas pela ordem da quadratura simétrica de nível LQ_N , enquanto que o conjunto de quadratura UG_N seleciona as ordenadas ao longo do eixo z como raízes dos polinômios de Legendre.

Já Abu-Shumays, fez um estudo mais detalhado a respeito do uso de diferentes esquemas de quadraturas produto para o tratamento das equações em ordenadas discretas, mostrando a precisão com que estas quadraturas integram altas ordens polinomiais nos cossenos diretores [1, 3]. Neste estudo, as quadraturas produto são geradas através do produto de conjuntos de quadraturas unidimensionais com respeito a variável polar e azimutal. Dos diferentes conjuntos de quadraturas apresentados por Abu-Shumays destaca-se o conjunto de quadratura bidimensional *Quadruple Range (QR)*, que é capaz de integrar precisamente funções que são descontínuas ao longo dos contornos de problemas heterogêneos e apresentar maiores reduções na flutuação dos efeitos raio na solução das equações bidimensionais em ordenadas discretas, quando comparado a quadraturas mais clássicas [1, 2, 3].

Recentemente, tem se intensificado na literatura a proposição de métodos ou algoritmos com o objetivo de lidar com os efeitos raio e outros erros induzidos pelo uso de quadraturas numéricas, métodos e técnicas que utilizam diferentes conjuntos de quadratura em diferentes regiões espaciais de problemas específicos, ou al-

goritmos que tentam adaptar as quadraturas para se obter a solução das equações em ordenadas discretas. Longoni e Haghghat apresentaram duas técnicas referenciadas como *Ordinate Splitting (OS)* [67] e *Refinement Angular Regional (RAR)* [66, 68], juntamente com os conjuntos de quadratura Legendre *Equal-Weight (PN–EW)* [31] e Legendre-Chebyshev ($P_N T_N$) [62] para o tratamento de problemas de transporte não convencionais, cujas fontes ou fluxos apresentam forte dependência angular, ou altos picos. Ambas as técnicas (*OS* e *RAR*), fazem um refinamento das direções dos conjuntos de quadratura citados, onde a ideia é introduzir um número maior de direções em uma certa região da esfera unitária. Na técnica *OS*, a direção de interesse é dividida em um número maior de direções com pesos iguais, onde estas direções resultantes são posicionadas simetricamente em torno da direção de interesse. Já na técnica *RAR*, a direção de interesse, é substituída pelo conjunto todo de direções polares e azimutais $P_N T_N$. Ainda, Longoni e Haghghat concluem que os conjuntos de direções refinadas pela técnica *RAR* resultantes, preservam os momentos de ordem superior nos cossenos diretores, diferentemente dos conjuntos refinados obtidos através da técnica *OS* [66, 68].

Entretanto as técnicas utilizadas por Longoni e Haghghat, não são consideradas como adaptativas, uma vez que, as técnicas não introduzem diferentes conjuntos de quadratura em diferentes regiões do domínio espacial, mas usaram apenas um único conjunto modificado em todo o domínio do problema. Nexte contexto, métodos verdadeiramente adaptativos para o tratamento das equações bidimensionais em ordenadas discretas foram desenvolvidos [96, 97, 98], uma vez que diferentes conjuntos de quadratura em diferentes regiões do domínio puderam ser utilizadas. Na abordagem proposta, algoritmos simples para mapear os fluxos angulares através das fronteiras regionais foram empregados e elementos finitos foram utilizados no fluxo angular para orientar a definição dos pesos, interpolação e métodos de mapeamento. Para tomar decisões de refinamento, o método utilizado calcula o fluxo angular em certas direções e compara esses resultados com os valores interpo-

lados que vem das funções base e dos fluxos angulares nos pontos de quadratura já existentes.

Conjuntos de quadraturas baseados em elementos finitos descontínuos lineares (*LDFE*) foram apresentados por Jarrell [54, 55]. Estes conjuntos de quadraturas são desenvolvidos dividindo as faces de um octaedro regular em triângulos equiláteros, e então, estes são projetados na superfície da esfera unitária formando triângulos esféricos. Foram desenvolvidos quatro métodos para definir os pontos de cada triângulo esférico, que por sua vez define as direções e os pesos dos conjuntos de quadraturas. Esses métodos chamados de *LDFE–Center*, *LDFE– θ* , *LDFE–L* e *LDFE–SA*, diferem um do outro na maneira de determinar os pontos e seus pesos nesses triângulos. Ainda, é apresentado a forma adaptativa dos métodos *LDFE* e mostrado a precisão com que estes integram polinômios nos cossenos diretores, além da ordem de convergência e os erros relativos no cálculo do fluxo escalar de nêutrons através do uso dos conjuntos de quadraturas propostos, comparando-os com outras quadraturas disponíveis na literatura, em alguns problemas testes.

Na tentativa de melhorar o método de ordenadas discretas, um conjunto de equações baseado em uma estrutura de interpolações para funções na esfera unitária, denominado *Lagrange Discrete Ordinates* (LDO), é derivado por Ahrens [4]. Mesmo apresentando uma série de diferenças, as equações LDO mantêm a estrutura formal das equações em ordenadas discretas. Os resultados numéricos obtidos através das equações LDO demonstraram convergência espectral angular para soluções suaves e são capazes de mitigar os efeitos raio, aumentando-se o número de direções discretas envolvidas.

Neste trabalho, adicionalmente às contribuições já mencionadas anteriormente neste texto, referentes ao desenvolvimento da formulação ADO para problemas multidimensionais [16, 100, 101, 103], outra contribuição relevante é a implementação de esquemas alternativos de quadratura (ordem superior) na formu-

lação ADO, de maneira a preservar a redução pela metade da ordem do problema de autovalores que determina as autofunções que compõem as soluções das equações em ordenadas discretas. Faz-se também, uma estimativa dos erros produzidos através da discretização angular da equação de transporte, e da aproximação do termo integral da equação via quadratura numérica, onde mostra-se a precisão com que as quadraturas integram funções polinomiais nos cossenos diretores e a redução que apresentam na flutuação dos efeitos raio na solução das equações em ordenas discretas. Aplica-se o estudo a problemas de fonte fixa, onde faz-se uma análise assintótica espacial e angular de modo a determinar a ordem de convergência e uma solução de referência para comparação dos resultados.

Desta forma, este trabalho está estruturado de maneira que no capítulo 2 apresenta-se a equação de transporte de nêutrons multidimensional e descreve-se a construção de diferentes esquemas de quadraturas numéricas multidimensionais. Ainda, mostra-se a precisão com que estas integram polinômios nas direções dos cossenos diretores, de maneira a estimar o erro de discretização numérica angular da integral de espalhamento da equação de transporte.

No capítulo 3 a equação bidimensional em ordenadas discretas é apresentada, e o sistema de equações diferenciais parciais bidimensionais em ordenadas discretas é integrado transversalmente nas variáveis x e y , fornecendo sistemas de equações diferenciais ordinárias unidimensionais em termos de variáveis médias, via técnica nodal. Os fluxos desconhecidos nos contornos aproximados por constantes, obtidos da integração transversal, são introduzidos no termo fonte do problema, gerando um acoplamento dos problemas nodais unidimensionais. Os resultados numéricos para os problemas teste considerados são apresentados no capítulo 4.

No capítulo 5, é feito uma análise assintótica espacial e angular dos resultados numéricos obtidos para o fluxo escalar médio nas regiões do problema em estudo. Ainda, são apresentados gráficos dos efeitos raio produzidos pelo uso

das quadraturas numéricas simétrica de nível LQ_N , Legendre-Chebyshev $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$, e *Quadruple Range QR*.

Por fim, no capítulo 6, apresenta-se as conclusões obtidas do estudo realizado.

2 EQUAÇÃO MULTIDIMENSIONAL DE TRANSPORTE DE NÊUTRONS

Neste capítulo, faz-se uma estimativa do erro de aproximação numérica angular da integral de espalhamento da equação de transporte bidimensional, através do uso de quadraturas numéricas. O procedimento baseia-se na aproximação do fluxo angular e seção de choque diferencial de espalhamento em termos de funções harmônicas esféricas e polinômios de Legendre, respectivamente, seguido do uso de expansões em séries de Taylor de duas variáveis.

Utiliza-se os quatro esquemas de quadratura citados no capítulo anterior: Simétrica de Nível LQ_N , Legendre-Chebyshev $P_N T_N S_N$ triangular, Legendre-Chebyshev $P_N T_N$ quadrangular e *Quadruple Range QR*, para a análise de aproximação. Vale ressaltar que, destes quatro esquemas de quadraturas, os três primeiros foram desenvolvidos tanto para o tratamento de problemas bidimensionais como tridimensionais, enquanto que a quadratura *QR* desenvolvida por Abu-Shumays [3], foi criada apenas para o tratamento de problemas bidimensionais. Ainda, neste capítulo, determina-se a precisão com que cada uma destas quadraturas integram as funções polinomiais nos cossenos diretores Ω_x e Ω_y , com o intuito de estimar o erro de aproximação numérica da integral de espalhamento da equação de transporte.

Desta forma, parte-se da equação de transporte de nêutrons independente do tempo, que considera a distribuição das partículas em meio não multiplicativo, a um grupo de energia, de acordo com Duderstadt [38]

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

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

A integral na Eq. (2.1) é avaliada sobre todas as direções $\boldsymbol{\Omega}$ na esfera unitária S , onde $\Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$ é o fluxo angular das partículas em $\mathbf{r} = (x, y, z)$ com

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \Omega_x \frac{\partial \Psi}{\partial x} + \Omega_y \frac{\partial \Psi}{\partial y} + \Omega_z \frac{\partial \Psi}{\partial z}. \quad (2.2)$$

A direção angular do movimento das partículas $\boldsymbol{\Omega}$ é convenientemente descrita utilizando os cossenos diretores $\boldsymbol{\Omega} = (\Omega_x, \Omega_y, \Omega_z)$, tal que

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

e

$$\Omega_z = \xi = \cos(\theta), \quad (2.3)$$

sendo os mesmos relacionados da forma

$$\Omega_x^2 + \Omega_y^2 + \Omega_z^2 = 1. \quad (2.4)$$

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

2.1 Estimativa de erro na aproximação do termo integral da equação de transporte

Para iniciar os estudos a respeito do erro produzido pelo processo de aproximação do termo de espalhamento da equação de transporte através do uso de quadraturas numéricas, opta-se por expandir o fluxo angular da integral de espalhamento da Eq. (2.1) em termos das funções harmônicos esféricos como

$$\Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=-k}^k \Upsilon_k^n(\mathbf{r}) Y_k^n(\boldsymbol{\Omega}') \quad (2.5)$$

onde

$$\Upsilon_k^n(\mathbf{r}) = \int_S \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) Y_k^{n*}(\mathbf{\Omega}) d\mathbf{\Omega}. \quad (2.6)$$

Aqui, Y_k^n é chamada de função harmônico esférico de grau k e ordem n , já Y_k^{n*} denota o conjugado complexo de Y_k^n .

Substitui-se a expressão dada pela Eqs. (2.5) na integral da Eq. (2.1), para obter

$$\int_S \sigma_s(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega}) \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}' = \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=-k}^k \Upsilon_k^n(\mathbf{r}) \int_S \sigma_s(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega}) Y_k^n(\mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}'. \quad (2.7)$$

Agora, representa-se o termo da seção de choque diferencial $\sigma_s(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega})$ da Eq. (2.7) em termos dos polinômios de Legendre como

$$\sigma_s(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega}) = \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sigma_{sl}(\mathbf{r}) P_l(\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega}), \quad (2.8)$$

mas,

$$\begin{aligned} \mathbf{\Omega}' &= \sin \theta' \cos \phi' \vec{i} + \sin \theta' \sin \phi' \vec{j} + \cos \theta' \vec{k} \\ \mathbf{\Omega} &= \sin \theta \cos \phi \vec{i} + \sin \theta \sin \phi \vec{j} + \cos \theta \vec{k}, \end{aligned} \quad (2.9)$$

logo $\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega}$ é dado por

$$\begin{aligned} \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega} &= \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta' \cos \phi' \sin \theta \cos \phi + \sin \theta' \sin \phi' \sin \theta \sin \phi \\ &= \cos \theta \cos \theta' + \sin \theta \sin \theta' \cos(\phi - \phi'). \end{aligned} \quad (2.10)$$

Através da Eq. (2.10), aplica-se o teorema da adição para harmônicos esféricos, que expressa um polinômio de Legendre de ordem l no ângulo $\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega}$ em termos de produtos de dois harmônicos esféricos com coordenadas angulares (θ, ϕ) e (θ', ϕ') como

$$P_l(\mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega}) = \frac{1}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_l^{m*}(\mathbf{\Omega}') Y_l^m(\mathbf{\Omega}) \quad (2.11)$$

onde

$$Y_l^m(\boldsymbol{\Omega}) = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta) e^{im\phi} \quad (2.12)$$

e

$$Y_l^{m*}(\boldsymbol{\Omega}') = \sqrt{\frac{(2l+1)(l-m)!}{(l+m)!}} P_l^m(\cos\theta') e^{-im\phi'}. \quad (2.13)$$

Finalmente, escreve-se o termo da seção de choque de espalhamento diferencial $\sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega})$ como

$$\sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_{sl}(\mathbf{r}) \sum_{m=-l}^l Y_l^{m*}(\boldsymbol{\Omega}') Y_l^m(\boldsymbol{\Omega}), \quad (2.14)$$

e a integral dada na Eq. (2.7) torna-se

$$\int_S \sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_{sl}(\mathbf{r}) \sum_{m=-l}^l Y_l^m(\boldsymbol{\Omega}) \sum_{k=0}^{\infty} \sum_{n=-k}^k \Upsilon_k^n(\mathbf{r}) \int_S Y_l^{m*}(\boldsymbol{\Omega}') Y_k^n(\boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}'. \quad (2.15)$$

Nota-se que as funções $Y_l^{m*}(\boldsymbol{\Omega}')$ e $Y_k^n(\boldsymbol{\Omega}')$ na equação acima são ortogonais, de forma que através da propriedade de ortogonalidade das funções harmônicas esféricas, tem-se

$$\int_S Y_l^{m*}(\boldsymbol{\Omega}') Y_k^n(\boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' = \delta_{lk} \delta_{mn} \quad (2.16)$$

onde

$$\delta_{lk} = \begin{cases} 1 & l=k \\ 0 & \text{caso contrário} \end{cases} \quad \text{e} \quad \delta_{mn} = \begin{cases} 1 & m=n \\ 0 & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (2.17)$$

Desta forma, reescreve-se a Eq. (2.15) usando a Eq. (2.6) como

$$\int_S \sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sigma_{sl}(\mathbf{r}) Y_l^m(\boldsymbol{\Omega}) \int_S \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') Y_l^{m*}(\boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}'. \quad (2.18)$$

No tratamento de problemas bidimensionais de transporte, o fluxo angular e todos os momentos do fluxo não variam com z , de modo que o último termo do lado direito da Eq. (2.2) pode ser desconsiderado. Neste sentido, a partir da expressão obtida na Eq. (2.18) e da definição de $\mathbf{\Omega} \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$, dada pela Eq. (2.2), escreve-se a Eq. (2.1), para problemas bidimensionais de transporte, em geometria cartesiana como

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}) + \eta \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}) + \sigma_t \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sigma_{sl}(\mathbf{r}) Y_l^m(\mathbf{\Omega}) \int_S \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') Y_l^{m*}(\mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}' + Q(x, y, \mathbf{\Omega}). \quad (2.19)$$

Para fins de estudo da aproximação da integral angular da equação bidimensional de transporte de nêutrons, suprime-se a dependência espacial $\mathbf{r} = (x, y)$ na Eq. (2.18), de maneira que o integrando da equação passe a ser uma função dependente apenas de $\mathbf{\Omega}' = (\Omega'_x, \Omega'_y)$. Desta forma, define-se

$$\Psi(\mathbf{\Omega}') Y_l^{m*}(\mathbf{\Omega}') = f_{lm}(\Omega'_x, \Omega'_y), \quad (2.20)$$

e substitui-se na Eq. (2.18), onde obtém-se

$$\int_S \sigma_s(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}' \cdot \mathbf{\Omega}) \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}' = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=-l}^l \sigma_{sl} Y_l^m(\mathbf{\Omega}) \int_S f_{lm}(\Omega'_x, \Omega'_y) d\mathbf{\Omega}'. \quad (2.21)$$

Deseja-se encontrar uma quadratura numérica, que seja capaz de aproximar a integral do termo de espalhamento da Eq. (2.21), com máxima precisão possível, ou seja

$$\sum_{\tilde{m}=0}^N w_{\tilde{m}} g(\mathbf{\Omega}'_{\tilde{\mathbf{m}}}) \approx \int_S g(\mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}'. \quad (2.22)$$

Desta forma, a quadratura deve ser capaz de aproximar também os momentos angulares, definidos na Eq. (2.6) e expressos na Eq. (2.18), como

$$\sum_{\tilde{m}=0}^N w_{\tilde{m}} f_{lm}(\mathbf{\Omega}'_{\tilde{\mathbf{m}}}) = \sum_{\tilde{m}=0}^N w_{\tilde{m}} \Psi(\mathbf{\Omega}_{\tilde{\mathbf{m}}}) Y_l^{m*}(\mathbf{\Omega}_{\tilde{\mathbf{m}}}) \approx \int_S \Psi(\mathbf{\Omega}) Y_l^{m*}(\mathbf{\Omega}) d\mathbf{\Omega} = \Upsilon_l^m. \quad (2.23)$$

Expande-se então a função $f_{lm}(\Omega'_x, \Omega'_y)$ definida na Eq. (2.20), em séries de Taylor de duas variáveis centradas no ponto $(\Omega'_{x0} = 0, \Omega'_{y0} = 0)$, onde obtém-se a seguinte expressão para a integral do lado direito da Eq. (2.21),

$$\begin{aligned}
\int_S f_{lm}(\Omega'_x, \Omega'_y) d\Omega' &= \int_S \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{i=0}^n \frac{n!}{i!(n-i)!} (\Omega'_x)^i (\Omega'_y)^{n-i} \frac{\partial^n}{\partial \Omega'_x{}^i \partial \Omega'_y{}^{n-i}} f_{lm}(0, 0) \right] d\Omega' \\
&= f_{lm}(0, 0) \int_S 1 d\Omega' + \frac{\partial}{\partial \Omega'_x} f_{lm}(0, 0) \int_S \Omega'_x d\Omega' \\
&+ \frac{\partial}{\partial \Omega'_y} f_{lm}(0, 0) \int_S \Omega'_y d\Omega' + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2}{\partial \Omega'^2_x} f_{lm}(0, 0) \int_S \Omega'^2_x d\Omega' \\
&+ \frac{2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial \Omega'_x \partial \Omega'_y} f_{lm}(0, 0) \int_S (\Omega'_x)(\Omega'_y) d\Omega' \\
&+ \frac{1}{2!} \frac{\partial^2}{\partial \Omega'^2_y} f_{lm}(0, 0) \int_S \Omega'^2_y d\Omega' + \dots \quad (2.24)
\end{aligned}$$

Agora, aproxima-se as integrais da Eq. (2.24) através da relação Eq. (2.23), de modo a obter

$$\begin{aligned}
\sum_{\tilde{m}=0}^N w_{\tilde{m}} f_{lm}(\Omega'_{\tilde{m}}) &= \sum_{\tilde{m}=0}^N w_{\tilde{m}} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{i=0}^n \frac{n!}{i!(n-i)!} (\Omega'_{x\tilde{m}})^i (\Omega'_{y\tilde{m}})^{n-i} \frac{\partial^n}{\partial \Omega'^i_x \partial \Omega'^{n-i}_y} f_{lm}(0, 0) \right] \\
&= f_{lm}(0, 0) \sum_{\tilde{m}=0}^N w_{\tilde{m}} + \frac{\partial}{\partial \Omega'_x} f_{lm}(0, 0) \sum_{\tilde{m}=0}^N w_{\tilde{m}} \Omega'_{x\tilde{m}} \\
&+ \frac{\partial}{\partial \Omega'_y} f_{lm}(0, 0) \sum_{\tilde{m}=0}^N w_{\tilde{m}} \Omega'_{y\tilde{m}} + \frac{1}{2!} \frac{\partial^2}{\partial \Omega'^2_x} f_{lm}(0, 0) \sum_{\tilde{m}=0}^N w_{\tilde{m}} \Omega'^2_{x\tilde{m}} \\
&+ \frac{2}{2!} \frac{\partial^2}{\partial \Omega'_x \partial \Omega'_y} f_{lm}(0, 0) \sum_{\tilde{m}=0}^N w_{\tilde{m}} (\Omega'_{x\tilde{m}})(\Omega'_{y\tilde{m}}) \\
&+ \frac{1}{2!} \frac{\partial^2}{\partial \Omega'^2_y} f_{lm}(0, 0) \sum_{\tilde{m}=0}^N w_{\tilde{m}} \Omega'^2_{y\tilde{m}} + \dots \quad (2.25)
\end{aligned}$$

Observa-se que ao expandir a função $f_{lm}(\Omega'_x, \Omega'_y)$ em séries de Taylor, foi possível reescrevê-la em termos de polinômios em Ω_x e Ω_y . Desta forma, deseja-se que a quadratura numérica seja capaz de aproximar a integral sobre esses polinômios para o maior grau possível, ou seja, procura-se uma quadratura numérica que integre

exatamente o máximo de termos possíveis da expansão de $f_{lm}(\Omega'_x, \Omega'_y)$ em polinômios em Ω_x e Ω_y .

Neste sentido, assume-se que a função $f_{lm}(\Omega'_x, \Omega'_y)$ possa ser escrita em termos de um polinômio de grau L em Ω_x e Ω_y , onde L é dado pela soma das potências de Ω_x e Ω_y . A quadratura numérica procurada deve aproximar exatamente a integral polinomial, de maneira que o erro de aproximação pela quadratura é dado por

$$\begin{aligned}
& \int_S f_{lm}(\Omega'_x, \Omega'_y) d\Omega' - \sum_{\tilde{m}=0}^N w_{\tilde{m}} f_{lm}(\Omega'_{\tilde{m}}) = \\
& \int_S \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{i=0}^n \frac{n!}{i!(n-i)!} (\Omega'_x)^i (\Omega'_y)^{n-i} \frac{\partial^n}{\partial \Omega_x^i \partial \Omega_y^{n-i}} f_{lm}(0, 0) \right] d\Omega' \\
& - \sum_{\tilde{m}=0}^N w_{\tilde{m}} \left[\sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{i=0}^n \frac{n!}{i!(n-i)!} (\Omega'_{x\tilde{m}})^i (\Omega'_{y\tilde{m}})^{n-i} \frac{\partial^n}{\partial \Omega_x^i \partial \Omega_y^{n-i}} f_{lm}(0, 0) \right] \\
& = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{i=0}^n \frac{n!}{i!(n-i)!} \frac{\partial^n}{\partial \Omega_x^i \partial \Omega_y^{n-i}} f_{lm}(0, 0) \times \\
& \left[\int_S (\Omega'_x)^i (\Omega'_y)^{n-i} d\Omega' - \sum_{\tilde{m}=0}^N w_{\tilde{m}} (\Omega'_{x\tilde{m}})^i (\Omega'_{y\tilde{m}})^{n-i} \right] \\
& = \sum_{n=L+1}^{\infty} \frac{1}{n!} \sum_{i=0}^n \frac{n!}{i!(n-i)!} \frac{\partial^n}{\partial \Omega_x^i \partial \Omega_y^{n-i}} f_{lm}(0, 0) \times \\
& \left[\int_S (\Omega'_x)^i (\Omega'_y)^{n-i} d\Omega' - \sum_{\tilde{m}=0}^N w_{\tilde{m}} (\Omega'_{x\tilde{m}})^i (\Omega'_{y\tilde{m}})^{n-i} \right] + \mathcal{O}(\Omega'^{L+2}). \quad (2.26)
\end{aligned}$$

Assim, se um conjunto de quadratura numérica integrar exatamente tais funções polinomiais até grau L , espera-se que este conjunto forneça soluções precisas para os problemas de interesse quando o integrando puder ser bem aproximado por uma série de mesma ordem. Entende-se que, se o conjunto de quadratura não integrar exatamente essas funções, erros de aproximação na fonte de espalhamento, e consequentemente erros na solução da equação de transporte podem ser produzidos.

Neste sentido, uma vez que a função $f_{lm}(\Omega'_x, \Omega'_y)$ é aproximada por um polinômio de grau L em Ω_x e Ω_y , reescreve-se a integral do lado esquerdo da Eq. (2.24) como

$$\int_S \Omega_x^l \Omega_y^m d\Omega = \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (\sin \theta \cos \phi)^l (\sin \theta \sin \phi)^m \sin \theta d\theta d\phi, \quad l + m \leq L, \quad (2.27)$$

A resolução analítica da Eq. (2.27), dependente dos valores l e m , é feita abaixo. Para isso, inicialmente define-se

$$\begin{aligned} \xi &= \cos \theta & \rightarrow & \quad d\xi = -\sin \theta d\theta \\ \xi^2 &= (\cos \theta)^2 & \rightarrow & \quad \xi^2 = 1 - (\sin \theta)^2 \quad \rightarrow \quad \sin \theta = \sqrt{1 - \xi^2} \end{aligned} \quad (2.28)$$

e substitui-se no lado direito da Eq. (2.27), onde obtém-se

$$\begin{aligned} & \int_0^{2\pi} \int_0^\pi (\sin \theta \cos \phi)^l (\sin \theta \sin \phi)^m \sin \theta d\theta d\phi = \\ & \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 (\cos \phi \sqrt{1 - \xi^2})^l (\sin \phi \sqrt{1 - \xi^2})^m d\xi d\phi = \\ & \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 (\sqrt{1 - \xi^2})^{l+m} (\cos \phi)^l (\sin \phi)^m d\xi d\phi = \\ & \int_0^{2\pi} (\cos \phi)^l (\sin \phi)^m d\phi \int_{-1}^1 (\sqrt{1 - \xi^2})^{l+m} d\xi. \end{aligned} \quad (2.29)$$

Note que a integral dupla da Eq. (2.27) foi escrita como um produto de duas integrais dependentes, respectivamente, da variável azimutal ϕ e da variável polar $\xi = \cos \theta$. Agora, para obter-se a solução analítica da integral com respeito a variável azimutal ϕ da Eq. (2.29), parte-se da definição da função Gamma [112]

$$\Gamma(s)\Gamma(z) = \int_0^\infty \int_0^\infty t^{s-1} u^{z-1} e^{-(t+u)} dt du, \quad (2.30)$$

onde define-se $t = x^2$ e $u = y^2$, e substitui-se na equação para obter

$$\begin{aligned} \Gamma(s)\Gamma(z) &= \int_0^\infty \int_0^\infty x^{2s-2} y^{2z-2} e^{-(x^2+y^2)} 2x 2y dx dy \\ &= 4 \int_0^\infty \int_0^\infty x^{2s-1} y^{2z-1} e^{-(x^2+y^2)} dx dy. \end{aligned} \quad (2.31)$$

Faz-se uma mudança de coordenadas para polares e assume-se que $y = r \sin \phi$ e $x = r \cos \phi$, onde tem-se que o determinante da Jacobiana é dado por

$$\frac{\partial(x, y)}{\partial(r, \phi)} = \begin{vmatrix} \cos \phi & \sin \phi \\ -r \sin \phi & r \cos \phi \end{vmatrix} = r(\cos \phi)^2 + r(\sin \phi)^2 = r, \quad (2.32)$$

e o diferencial da área para coordenadas polares como

$$dA = \left| \frac{\partial(x, y)}{\partial(r, \phi)} \right| dr d\phi = r dr d\phi. \quad (2.33)$$

Desta forma, reescreve-se a Eq. (2.31) em coordenadas polares como

$$\begin{aligned} \Gamma(s)\Gamma(z) &= 4 \left(\int_0^{\pi/2} \int_0^{\infty} r^{2s-1} (\cos \phi)^{2s-1} r^{2z-1} (\sin \phi)^{2z-1} e^{-r^2} r dr d\phi \right) \\ &= 4 \left(\int_0^{\pi/2} (\cos \phi)^{2s-1} (\sin \phi)^{2z-1} d\phi \int_0^{\infty} r^{2s+2z-1} e^{-r^2} dr \right). \end{aligned} \quad (2.34)$$

Agora, assume-se $\delta = r^2$ na segunda integral da Eq. (2.34), onde obtém-se

$$2 \int_0^{\infty} r^{2s+2z-1} e^{-r^2} dr = \int_0^{\infty} \delta^{s+z-1} e^{-\delta} d\delta, \quad (2.35)$$

que de acordo com a definição de função Gamma, tem-se

$$\int_0^{\infty} \delta^{s+z-1} e^{-\delta} d\delta = \Gamma(s+z). \quad (2.36)$$

Logo, substituindo-se a Eq. (2.36) na Eq. (2.34), obtém-se

$$\Gamma(s)\Gamma(z) = 2 \left(\int_0^{\pi/2} (\cos \phi)^{2s-1} (\sin \phi)^{2z-1} d\phi \right) \Gamma(s+z) \quad (2.37)$$

$$\frac{\Gamma(s)\Gamma(z)}{2\Gamma(s+z)} = \left(\int_0^{\pi/2} (\cos \phi)^{2s-1} (\sin \phi)^{2z-1} d\phi \right) = \frac{1}{2} \beta(s, z), \quad (2.38)$$

$$(2.39)$$

onde $\beta(s, z)$ é a função Beta [111]. Agora, seja $2s - 1 = l \rightarrow s = \frac{l+1}{2}$ e $2z - 1 = m \rightarrow z = \frac{m+1}{2}$ na equação acima, tem-se

$$\int_0^{\pi/2} (\cos \phi)^l (\sin \phi)^m d\phi = \frac{\Gamma\left(\frac{l+1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{m+1}{2}\right)}{2\Gamma\left(\frac{l+m+2}{2}\right)}, \quad (2.40)$$

para l e m par. Caso l ou m for ímpar, a integral resulta em zero. A solução analítica para a primeira integral da Eq. (2.29) obtida neste trabalho, verifica a solução encontrada por Abu-Shumays [3]

$$\int_0^{2\pi} (\cos \phi)^l (\sin \phi)^m d\phi = [1 + (-1)^l][1 + (-1)^m] \frac{\Gamma\left(\frac{l+1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{m+1}{2}\right)}{2\Gamma\left(\frac{l+m+2}{2}\right)} \quad (2.41)$$

se l e m par, ou

$$\int_0^{2\pi} (\cos \phi)^l (\sin \phi)^m d\phi = 0 \quad \text{se } l \text{ ou } m \text{ ímpar.} \quad (2.42)$$

Agora, para o tratamento da segunda integral da Eq. (2.29) onde

$$\int_{-1}^1 (\sqrt{1-\xi^2})^{l+m} d\xi = 2 \int_0^1 (\sqrt{1-\xi^2})^{l+m} d\xi = 2 \int_0^{\pi/2} (\sin \theta)^{l+m} \sin \theta d\theta, \quad (2.43)$$

tem-se que, quando l ou m ímpar, de acordo com a Eq. (2.42), a integração sobre a variável ϕ resulta em zero, e desta forma o fator que multiplica a Eq. (2.43) será sempre igual a zero. Portanto, considera-se l e m pares, e neste caso, escreve-se $l+m = 2h$ com $h = 0, 1, 2, \dots$, e substitui-se na integral direita da Eq. (2.43) de maneira que a mesma fique reescrita como

$$\begin{aligned} 2 \int_0^{\pi/2} (\sin \theta)^{l+m} \sin \theta d\theta &= 2 \int_0^{\pi/2} (\sin \theta)^{2h+1} d\theta \\ &= 2 \int_0^{\pi/2} (\sin \theta)^{2(h+1)-1} (\cos \theta)^{2 \cdot \frac{1}{2}-1} d\theta \\ &= 2 \frac{\Gamma(h+1)\Gamma(1/2)}{2\Gamma(h+3/2)} = \frac{\Gamma(h+1)\sqrt{\pi}}{\Gamma(h+3/2)}, \end{aligned} \quad (2.44)$$

mas $h = \frac{l+m}{2}$, logo

$$\frac{\Gamma(h+1)\sqrt{\pi}}{\Gamma(h+3/2)} = \frac{\Gamma\left(\frac{l+m+2}{2}\right)\sqrt{\pi}}{\Gamma\left(\frac{l+m+3}{2}\right)}, \quad (2.45)$$

e finalmente obtém-se, de acordo com [1, 3]

$$2 \int_0^1 (\sqrt{1-\xi^2})^{l+m} d\xi = 2 \int_0^{\pi/2} (\sin \theta)^{l+m} \sin \theta d\theta = \frac{\Gamma\left(\frac{l+m+2}{2}\right)\sqrt{\pi}}{\Gamma\left(\frac{l+m+3}{2}\right)}. \quad (2.46)$$

A solução analítica final para a Eq. (2.29) é dada pelo produto da Eq. (2.41) pela Eq. (2.46), que resulta em

$$\begin{aligned} \int_{\Omega} \Omega_x^l \Omega_y^m d\Omega &= \int_0^{2\pi} \int_0^{\pi} (\sin \theta \cos \phi)^l (\sin \theta \sin \phi)^m \sin \theta d\theta d\phi = \\ &= [1 + (-1)^l][1 + (-1)^m] \frac{\Gamma\left(\frac{l+1}{2}\right) \Gamma\left(\frac{m+1}{2}\right) \sqrt{\pi}}{2\Gamma\left(\frac{l+m+3}{2}\right)}, \\ &= 0 \quad \text{se } l \text{ ou } m \text{ ímpar.} \end{aligned} \quad (2.47)$$

Através da Eq. (2.47) é possível obter a solução exata para a integral polinomial em Ω_x e Ω_y de grau L , de forma que o erro de aproximação via quadratura numérica possa ser estimado.

2.2 Esquemas de quadraturas numéricas multidimensionais

Procura-se um conjunto de quadratura numérica capaz de integrar polinômios em Ω_x e Ω_y de ordem tão alta quanto possível, de forma a minimizar o erro de aproximação numérica da integral angular do termo de espalhamento da equação de transporte. Neste sentido, estuda-se nas próximas subseções, alguns dos

conjuntos de quadratura que são comumente utilizados na resolução da equação de transporte, e em seguida, mostra-se a ordem de precisão que estes conjuntos de quadratura conseguem integrar funções polinomiais em termos dos cossenos diretores dados pela Eq. (2.29).

2.2.1 Quadratura simétrica de nível LQ_N

A quadratura simétrica de nível (LQ_N), requer que o conjunto de direções (μ, η, ξ) seja invariante sob todas rotações de 90 graus em torno dos eixos μ, η ou ξ . Assim, cada conjunto de coordenadas deve ser simétrico em relação à origem, e além disso, o conjunto de pontos em cada eixo deve ser o mesmo. Desta forma, o conjunto de quadratura é definido em um octante e então é refletido nos outros octantes fazendo mudanças de sinais apropriadamente. O número de direções (ordenadas) por octante, é dado pela relação $M = N(N + 2)/8$, onde N é a ordem da quadratura, que deve ser par. As direções são dispostas na esfera unitária em um padrão triangular, com $N/2$ níveis diferentes por hemisfério e $N/2 - i + 1$ pontos em cada i nível, como pode ser visto na Figura 2.1.

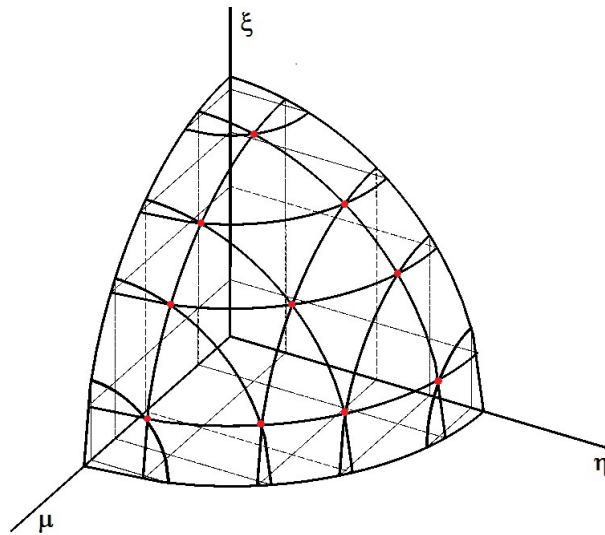


Figura 2.1: Quadratura simétrica de nível LQ_N para $N=8$.

Pode ser demonstrado que uma vez definida a primeira ordenada, todas as outras ordenadas são determinadas pela relação [30, 62, 64],

$$\mu_i^2 = \mu_1^2 + (i - 1) \frac{2(1 - 3\mu_1^2)}{N - 2} \quad 1 \leq i \leq N/2, \quad (2.48)$$

onde μ_1 é a projeção do primeiro ponto base no intervalo $0 < \mu_1^2 \leq 1/3$. A escolha de μ_1 é arbitrária e de acordo com a literatura, não está claro como obter o seu valor, exceto em $N = 2$, caso em que o único valor disponível é de $\mu_1^2 = 1/3$. Este único grau de liberdade na localização da ordenada juntamente com os pesos de cada ordenada são escolhidos ao exigir que o conjunto de quadratura seja capaz de integrar a mais elevada ordem de funções harmônicos esféricos sobre a esfera unitária. Uma vez determinado uma ordenada, ou direção (μ_i, η_i, ξ_i) , todas as outras direções podem ser construídas pela Eq. (2.48) e através da permutação de suas componentes. Tais grupos de permutação são compostos por classes de 1, 3 ou 6 pontos cada, de modo que dentro de uma determinada classe, todos os pontos têm o mesmo peso. Esta condição é conhecida como simetria rotacional, como pode ser observado na Figura 2.2.

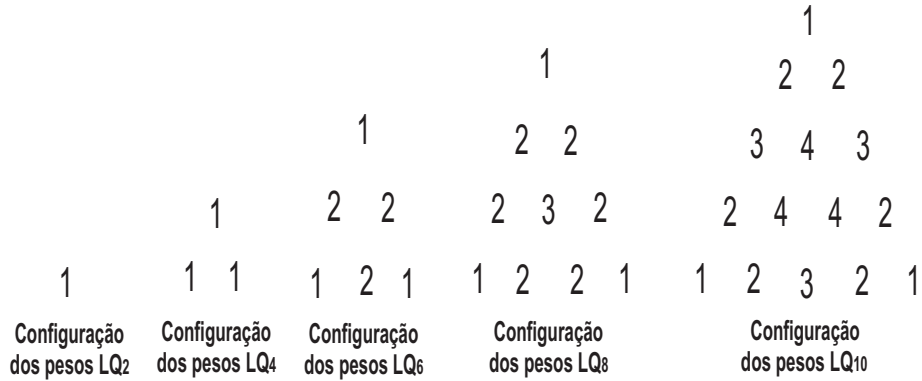


Figura 2.2: Configuração dos pesos da quadratura simétrica de nível LQ_N para um octante.

Apresenta-se na tabela abaixo o conjunto de direções e pesos da quadratura simétrica de nível LQ_N para algumas ordens de quadratura N .

Tabela 2.1: Quadratura simétrica de nível LQ_N .

μ	η	w	μ	η	w
N=2			N=8		
5,773503E-01	5,773503E-01	2,500000E-01	9,511897E-01	2,182179E-01	3,024692E-02
N=4			7,867958E-01	2,182179E-01	2,268517E-02
8,688902E-01	3,500212E-01	8,333333E-02	5,773503E-01	2,182179E-01	2,268517E-02
3,500212E-01	3,500212E-01	8,333333E-02	2,182179E-01	2,182179E-01	3,024692E-02
3,500212E-01	8,688902E-01	8,333333E-02	7,867958E-01	5,773503E-01	2,268517E-02
N=6			5,773503E-01	5,773503E-01	2,314815E-02
9,261807E-01	2,666355E-01	4,403157E-02	2,182179E-01	5,773503E-01	2,268517E-02
6,815075E-01	2,666355E-01	3,930177E-02	5,773503E-01	7,867958E-01	2,268517E-02
2,666355E-01	2,666355E-01	4,403157E-02	2,182179E-01	7,867958E-01	2,268517E-02
6,815075E-01	6,815075E-01	3,930177E-02	2,182179E-01	9,511897E-01	3,024692E-02
2,666355E-01	6,815075E-01	3,930177E-02			
2,666355E-01	9,261807E-01	4,403157E-02			

No entanto, vale ressaltar que, quando aumentada a ordem da quadratura simétrica de nível tal que $N > 20$, alguns dos pesos deste conjunto de quadratura decrescem, e eventualmente, tornam-se negativos, a qual conduz a soluções fisicamente impossíveis [62]. Neste sentido, estuda-se outras diferentes quadraturas, de modo a contornar o problema encontrado na quadratura simétrica de nível.

2.2.2 Conjuntos de quadratura Legendre-Chebyshev

Nesta seção, apresenta-se dois diferentes esquemas de quadraturas numéricas Legendre-Chebyshev ($P_N T_N$) [62]. Ambas quadraturas numéricas são geradas através do produto de um conjunto de quadratura unidimensional definida ao longo do eixo polar $\xi = \cos \theta$ com um conjunto de quadratura unidimensional na variável azimutal ϕ , onde o que diferencia uma quadratura da outra, é a maneira que as direções (nós) e pesos das quadraturas unidimensionais são relacionadas. As quadraturas Legendre-Chebyshev utilizam a quadratura de Gauss-Legendre unidimensional no tratamento da variável polar e a quadratura de Chebyshev de primeira classe para a variável azimutal. O uso desses conjuntos de quadratura não apresenta

pesos negativos, ignorando o problema encontrado na quadratura simétrica de nível LQ_N quando $N > 20$.

Para a construção dos conjuntos de quadratura $P_N T_N$, visando-se integrar funções polinomiais dadas pela Eq. (2.27) com máxima precisão possível, aproxima-se a variável polar dada pela Eq. (2.46), onde tem-se que

$$2 \int_0^1 (\sqrt{1 - \xi^2})^{l+m} d\xi = 2 \int_0^1 (1 - \xi^2)^h d\xi, \quad (2.49)$$

através da quadratura de Gauss-Legendre tal que

$$\int_{-1}^1 f(x) dx \simeq \sum_{j=1}^N w_j f(x_j), \quad (2.50)$$

com $f(x) = (1 - \xi^2)^h$. Como a Eq. (2.49) é escrita como uma integral polinomial de potências pares em $\xi = \cos \theta$, a quadratura de Gauss-Legendre é considerada ótima para aproximar essa classe de funções. Neste sentido, obtém-se os polinômios de Legendre através da seguinte fórmula de recorrência [67, 78]

$$(j + 1)P_{j+1}(\xi) = (2j + 1)\xi P_j(\xi) - jP_{j-1}(\xi) \quad (2.51)$$

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

As ordenadas $\xi = \cos \theta$ são dadas pelas raízes dos polinômios de Legendre P_N e os pesos associados a cada nível ξ_i , com $i = 1, \dots, N/2$, são determinados por meio da seguinte fórmula [67, 78]

$$\omega_i = \frac{2}{(1 - \xi_i^2) \left[\left(\frac{dP_N}{d\xi} \right)_{\xi_i} \right]^2}. \quad (2.52)$$

Com relação a discretização da variável azimutal da Eq. (2.41), procura-se uma quadratura numérica tal que

$$\int_0^{2\pi} g(\sin \phi, \cos \phi) d\phi \simeq \sum_{i=1}^N w_i g(\sin \phi_i, \cos \phi_i). \quad (2.53)$$

Neste sentido, faz-se uso da quadratura de Chebyshev, onde a variável angular azimutal é definida pelas raízes dos polinômios de Chebyshev (T_N) de primeira espécie

$$T_l[\cos(\varpi)] \equiv \cos(l\varpi), \quad (2.54)$$

estes, que satisfazem a condição de ortogonalidade

$$\int_{-1}^1 T_l(y)T_k(y)(1-y^2)^{-1/2}dy = \begin{cases} 0, & l \neq k \\ \pi, & l = k = 0 \\ \pi/2, & l = k \neq 0 \end{cases} \quad (2.55)$$

onde

$$y = \cos(\varpi). \quad (2.56)$$

Nas subseções seguintes, apresenta-se os dois diferentes esquemas de quadratura numérica do tipo $P_N T_N$ gerados pelo produto das quadraturas unidimensionais discutidas.

2.2.2.1 *Quadratura de Legendre-Chebyshev quadrangular*

A quadratura numérica do tipo $P_N T_N$ que será apresentada nesta subseção, é construída de maneira que tanto a ordem da quadratura unidimensional de Chebyshev T_N quanto a ordem da quadratura de Gauss-Legendre P_N necessitam ser iguais. Assim, para cada nível polar ξ , que é definido como as raízes dos polinômios de Legendre P_N de ordem N , são associados N pontos provenientes da quadratura de Chebyshev. Determina-se o conjunto discreto de ângulos azimutais para cada nível ξ_i através da relação [25, 67]

$$\varpi_j = \frac{\pi}{2} \left(1 - \frac{N - 2j + 1}{N} \right), \quad (2.57)$$

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

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

$$\mu_{i,j} = \sqrt{1 - \xi_i^2} \cos(\varpi_j), \quad (2.58)$$

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

$$\eta_{i,j} = \sqrt{1 - \mu_{i,j}^2 - \xi_i^2}. \quad (2.59)$$

Os pesos da quadratura correspondente são dadas em termos dos pesos da quadratura de Gauss-Legendre ω_i como [25, 62]

$$\omega_{i,j} = \frac{\omega_i}{N}, \quad (2.60)$$

de maneira que para cada nível ξ_i , as direções correspondentes tem o mesmo peso.

Apresenta-se na tabela abaixo o conjunto de quadratura $P_N T_N$ quadrangular para algumas ordens de quadratura N .

Tabela 2.2: Quadratura Legendre-Chebyshev $P_N T_N$.

μ	η	w	μ	η	w
N=2			N=8		
5,773503E-01	5,773503E-01	2,500000E-01	5,443104E-02	2,736433E-01	6,326784E-03
N=4			1,550065E-01	2,319836E-01	6,326784E-03
1,945464E-01	4,696764E-01	4,348186E-02	2,319836E-01	1,550065E-01	6,326784E-03
4,696765E-01	1,945463E-01	4,348186E-02	2,736433E-01	5,443103E-02	6,326784E-03
3,598879E-01	8,688461E-01	8,151814E-02	1,179163E-01	5,928054E-01	1,389881E-02
8,688462E-01	3,598878E-01	8,151814E-02	3,357973E-01	5,025562E-01	1,389881E-02
N=6			5,025562E-01	3,357973E-01	1,389881E-02
9,349804E-02	3,489394E-01	1,427704E-02	5,928054E-01	1,179163E-01	1,389881E-02
2,554414E-01	2,554414E-01	1,427704E-02	1,659777E-01	8,344262E-01	1,960667E-02
3,489394E-01	9,349802E-02	1,427704E-02	4,726645E-01	7,073924E-01	1,960667E-02
1,941664E-01	7,246389E-01	3,006346E-02	7,073924E-01	4,726645E-01	1,960667E-02
5,304725E-01	5,304725E-01	3,006346E-02	8,344262E-01	1,659777E-01	1,960667E-02
7,246389E-01	1,941664E-01	3,006346E-02	1,917800E-01	9,641432E-01	2,266774E-02
2,513426E-01	9,380233E-01	3,899283E-02	5,461433E-01	8,173612E-01	2,266774E-02
6,866808E-01	6,866807E-01	3,899283E-02	8,173612E-01	5,461432E-01	2,266774E-02
9,380233E-01	2,513426E-01	3,899283E-02	9,641432E-01	1,917800E-01	2,266774E-02

A quadratura Legendre-Chebyshev quadrangular gera um total de $M = 2(N \times N)$ direções discretas na esfera unitária, onde as direções em cada octante seguem um padrão quadrangular, como pode ser visto na Figura 2.3.

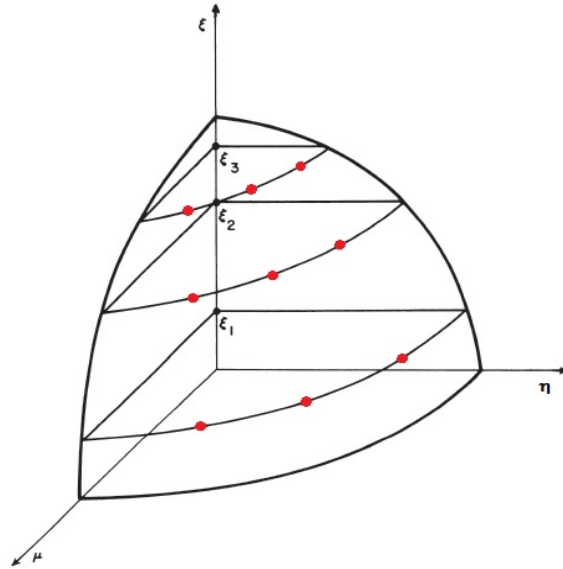


Figura 2.3: Quadratura P_6T_6 quadrangular.

2.2.2.2 Quadratura de Legendre-Chebyshev triangular

Na quadratura Legendre-Chebyshev triangular, diferentemente da quadratura produto $P_N T_N$ quadrangular, as quadraturas unidimensionais de Gauss-Legendre e de Chebyshev são combinadas tal que, uma vez definido os ξ_i níveis polares para uma certa ordem N , a discretização da variável angular azimutal é feita de modo que no primeiro nível polar, usa-se a quadratura de Chebyshev de ordem $N = 2$, para o segundo nível polar a quadratura de ordem $N = 4$, para o terceiro nível polar a quadratura de ordem $N = 6$, e assim por diante. Desta forma, a quadratura resultante irá apresentar a mesma configuração das direções (μ, η, ξ) de acordo com a quadratura simétrica de nível LQ_N apresentada na seção anterior,

onde tem-se um total de $M = N(N + 2)/8$ direções discretas por octante dispostas em um padrão triangular (veja a Figura 2.4).

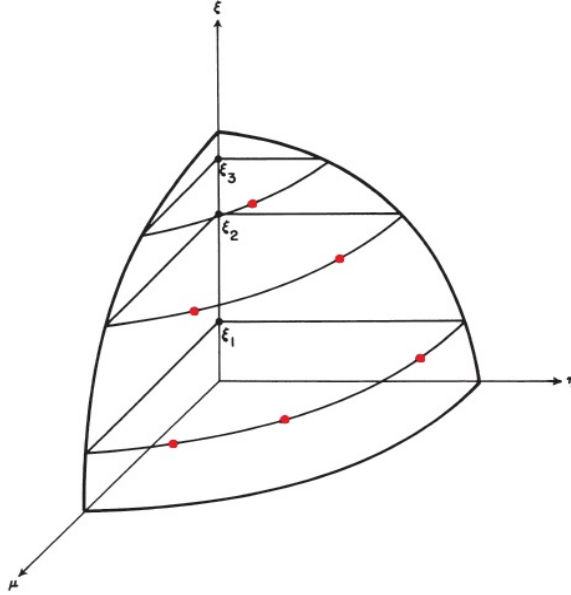


Figura 2.4: Quadratura $P_N T_N S_6$.

Na quadratura Legendre-Chebyshev triangular, cuja notação será definida por $P_N T_N S_N$, a determinação do conjunto de ângulos azimutais seguem a relação [25, 62, 67]

$$\varpi_{i,j} = \frac{\pi}{2} \left(1 - \frac{N - 2j - 2i + 3}{N - 2i + 2} \right), \quad (2.61)$$

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

Os pesos da quadratura correspondente $\omega_{i,j}$ são dadas em termos dos pesos de quadratura de Gauss-Legendre ω_i como

$$\omega_{i,j} = \frac{\omega_i}{N - 2i + 2}. \quad (2.62)$$

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

$$\mu_{i,j} = \sqrt{1 - \xi_i^2} \cos(\varpi_{i,j}), \quad (2.63)$$

com $i = 1, \dots, N/2$ e $j = 1, \dots, N - 2i + 2$. Os pontos $\eta_{i,j}$ são determinados pela Eq. (2.59).

Apresenta-se na tabela abaixo o conjunto de quadratura $P_N T_N S_N$ para algumas ordens de quadratura N .

Tabela 2.3: Quadratura Legendre-Chebyshev $P_N T_N S_N$.

μ	η	w	μ	η	w
N=2			N=8		
5,773503E-01	5,773503E-01	2,500000E-01	1,917800E-01	9,641432E-01	2,266774E-02
N=6			5,461433E-01	8,173612E-01	2,266774E-02
3,598879E-01	8,688461E-01	8,151814E-02	8,173612E-01	5,461432E-01	2,266774E-02
8,688462E-01	3,598878E-01	8,151814E-02	9,641432E-01	1,917800E-01	2,266774E-02
3,594748E-01	3,594748E-01	8,696371E-02	2,201964E-01	8,217842E-01	2,614222E-02
N=6			6,015878E-01	6,015878E-01	2,614222E-02
2,513426E-01	9,380233E-01	3,899283E-02	8,217842E-01	2,201964E-01	2,614222E-02
6,866808E-01	6,866807E-01	3,899283E-02	2,313012E-01	5,584105E-01	2,779763E-02
9,380233E-01	2,513426E-01	3,899283E-02	5,584105E-01	2,313012E-01	2,779763E-02
2,870897E-01	6,930957E-01	4,509520E-02	1,972858E-01	1,972858E-01	2,530713E-02
6,930957E-01	2,870896E-01	4,509520E-02			
2,554414E-01	2,554414E-01	4,283112E-02			

2.2.3 Quadratura *Quadruple Range QR*

A quadratura *Quadruple Range (QR)* é uma quadratura produto proposta por Abu-Shumays [3, 1] com o objetivo de integrar precisamente funções para problemas altamente heterogêneos com inúmeras singularidades nos contornos. Esta quadratura foi desenvolvida para o tratamento de problemas bidimensionais onde o ângulo azimutal ϕ é dividido em quatro intervalos. Estes intervalos dividem o hemisfério superior ($\theta \in [0, \pi]$) da esfera unitária em quatro quadrantes, onde seus tratamentos são feitos separadamente, de modo que as coordenadas e os pesos da quadratura são determinados para o intervalo principal $\phi \in [0, \pi/2]$ e então estendidos para os outros intervalos [3].

Para construir a quadratura QR , transforma-se a integral Eq. (2.43) sobre o ângulo polar θ como

$$\int_0^\pi (\sin \theta)^{l+m} \sin \theta d\theta = 2 \int_0^{\pi/2} (\sin \theta)^k \sin \theta d\theta \quad (2.64)$$

onde $k = l + m$. Assumindo-se que

$$\begin{aligned} x = \sin \theta &\quad \rightarrow \quad dx = \cos \theta d\theta \\ x^2 = (\sin \theta)^2 &\quad \rightarrow \quad x^2 = 1 - (\cos \theta)^2 \quad \rightarrow \quad \cos \theta = \sqrt{1 - x^2}, \end{aligned} \quad (2.65)$$

e substituindo-se na Eq. (2.64) obtém-se

$$2 \int_0^{\pi/2} (\sin \theta)^k \sin \theta d\theta = \int_0^1 x^k \frac{2x}{\sqrt{1-x^2}} dx. \quad (2.66)$$

A integral da equação acima, é então aproximada pela quadratura de Gauss-Christoffel, onde

$$\int_0^1 f(x)w(x) dx \simeq \sum_{i=1}^N w_i f(x_i), \quad (2.67)$$

com

$$f(x) = x^k, \quad w(x) = \frac{2x}{\sqrt{1-x^2}}. \quad (2.68)$$

A construção analítica e o código computacional em FORTRAN para gerar a quadratura de Gauss-Christoffel pode ser encontrada na Ref.[2]. Ainda, de acordo com as referências [2, 3], a quadratura de Gauss-Christoffel é exata por integrar funções polinomiais dadas na Eq. (2.64) até $l + m \leq 2N - 1$. Mostra-se na Tabela (2.4) algumas das coordenadas e pesos para essa quadratura.

No tratamento da variável azimutal ϕ , deseja-se aproximar, tão precisamente quanto possível, a integral dada pela Eq. (2.40). Desta forma, a quadratura procurada é definida como

$$\int_0^{\pi/2} f(\cos \phi, \sin \phi) d\phi \simeq \sum_{i=1}^N w_i f(\cos \phi_i, \sin \phi_i), \quad (2.69)$$

Tabela 2.4: Quadratura com respeito a integração da variável polar em geometria Cartesiana bidimensional.

X(i)	w(i)	X(i)	w(i)
$N = 1$		$N = 8$	
7,853981633974E-01	1,000000000000E+00	4,619235546733E-02	3,535298053836E-03
$N = 2$		$N = 9$	
3,993735638824E-01	2,505459190576E-01	1,495785939930E-01	1,939781153201E-02
9,144479484660E-01	7,494540809424E-01	2,974141685414E-01	5,120081207156E-02
$N = 3$		$N = 10$	
2,311522961279E-01	8,530082397263E-02	4,714033535760E-01	9,615210566300E-02
6,399711962341E-01	3,414562579328E-01	6,494576043473E-01	1,471910521216E-01
9,544967673433E-01	5,732429180946E-01	8,085613275367E-01	1,956194174053E-01
$N = 4$		$N = 11$	
1,492491465731E-01	3,605010432091E-02	9,279142834478E-01	2,332109926667E-01
4,452174134056E-01	1,651009783738E-01	9,918094732391E-01	2,536925104860E-01
7,657198751837E-01	3,388394165669E-01	$N = 12$	
9,718403838896E-01	4,600095007383E-01	3,738717543137E-02	2,321532538025E-03
$N = 5$		1,218673184482E-01	1,295685275068E-02
1,039469054750E-01	1,765116967436E-02	2,449791366336E-01	3,503122447209E-02
3,218997600306E-01	8,726300032090E-02	3,944837657444E-01	6,774755109636E-02
5,925641316724E-01	1,993860321943E-01	5,551788717533E-01	1,073193796372E-01
8,367574981863E-01	3,127359798582E-01	7,104369578734E-01	1,483922364818E-01
9,808766137327E-01	3,829638179523E-01	8,440015993099E-01	1,853051377127E-01
$N = 6$		9,417816602326E-01	2,130391465706E-01
7,642225770190E-02	9,602183026857E-03	9,934143180700E-01	2,278869387406E-01
2,418380224706E-01	4,982286016750E-02	$N = 13$	
4,624149310771E-01	1,216972042400E-01	3,087344674321E-02	1,585962741949E-03
6,917637890192E-01	2,077474677705E-01	1,011256691908E-01	8,966281037954E-03
8,801887364310E-01	2,835447130159E-01	2,049120334874E-01	2,469133544735E-02
9,861717557162E-01	3,275855717792E-01	3,337559301018E-01	4,884013052964E-02
$N = 7$		4,769246984678E-01	7,941386493165E-02
5,849788427341E-02	5,651443322490E-03	6,222949084152E-01	1,131174844298E-01
1,876744099204E-01	3,029834441270E-02	7,574090067647E-01	1,461301662904E-01
3,673808738342E-01	7,742885116751E-02	8,705939190886E-01	1,747226071284E-01
5,691413298688E-01	1,397678418675E-01	9,520192454053E-01	1,957168918510E-01
7,600739892315E-01	2,041795195416E-01	9,945898978712E-01	2,068152756119E-01
9,084990189032E-01	2,566694985682E-01		
9,895378462167E-01	2,860045011201E-01		

Nota: $X(i) = \sin \theta_i$.

onde as coordenadas ϕ_i e pesos w_i são encontrados pela solução de um sistema não-linear de equações e incógnitas, cujo sistema é resolvido pelo método iterativo de Newton. O processo para obter estas coordenadas e pesos não é apresentado em detalhes aqui, mas pode ser encontrado em Abu-Shumays [3]. Mostra-se algumas das coordenadas e pesos para essa quadratura na Tabela (2.5).

De acordo com Abu-Shumays [3], a quadratura unidimensional Eq. (2.69) na variável azimutal ϕ é exata por integrar funções polinomiais para $l + m \leq N_\phi - 1$, onde N_ϕ é a ordem da quadratura. Portanto, fixado um grau de precisão $L = l + m$

Tabela 2.5: Quadratura com respeito a integração da variável azimutal em geometria Cartesiana bidimensional.

X(i)	w(i)	X(i)	w(i)
$N = 1$		$N = 8$	
7,07106781187E-01	1,57079632679E+00	3,24869788463E-02	8,26105878919E-02
$N = 2$		$N = 9$	
3,28861319306E-01	7,85398163397E-01	1,63951256940E-01	1,78010819682E-01
9,44378225429E-01	7,85398163397E-01	3,70037938547E-01	2,45365013149E-01
$N = 3$		$N = 10$	
1,79705750550E-01	4,41492408805E-01	6,00618666309E-01	2,79411742675E-01
7,07106781187E-01	6,87811509185E-01	7,99535626274E-01	2,79411742675E-01
9,83720409069E-01	4,41492408805E-01	9,29016643573E-01	2,45365013149E-01
$N = 4$		$N = 11$	
1,11919417802E-01	2,79049509269E-01	9,86468441131E-01	1,78010819682E-01
4,99008815360E-01	5,06348654128E-01	9,99472158795E-01	8,26105878919E-02
8,66596908714E-01	5,06348654128E-01	$N = 12$	
9,93717285710E-01	2,79049509269E-01	2,60886177621E-02	6,64555994585E-02
$N = 5$		$N = 13$	
7,60839341001E-02	1,91320724703E-01	1,32824656907E-01	1,45296593486E-01
3,59915255224E-01	3,74855576614E-01	3,05325234799E-01	2,05144486413E-01
7,07106781187E-01	4,38443724162E-01	5,10423681971E-01	2,41615952092E-01
9,32984999374E-01	3,74855576614E-01	7,07106781187E-01	2,53771063895E-01
9,97101416593E-01	1,91320724703E-01	8,59923057537E-01	2,41615952092E-01
$N = 6$		$N = 14$	
5,49823833982E-02	1,38991227102E-01	9,52248129951E-01	2,05144486413E-01
2,68645060598E-01	2,84984797595E-01	9,91139551485E-01	1,45296593486E-01
5,65871339345E-01	3,61422138701E-01	9,99659634087E-01	6,64555994585E-02
8,24493558076E-01	3,61422138701E-01	$N = 15$	
9,63239238931E-01	2,84984797595E-01	2,14063664984E-02	5,45988342772E-02
9,98487324665E-01	1,38991227102E-01	1,09678208079E-01	1,20668935327E-01
$N = 7$		$N = 16$	
4,15504673952E-02	1,05403262712E-01	2,55406277071E-01	1,73450649536E-01
2,07031268158E-01	2,22573419243E-01	4,35996579025E-01	2,09351736725E-01
4,54812160314E-01	2,96659466192E-01	6,21758783706E-01	2,27328007532E-01
7,07106781187E-01	3,21524030502E-01	7,83208793927E-01	2,27328007532E-01
8,90587389778E-01	2,96659466192E-01	8,99948322449E-01	2,09351736725E-01
9,78334326294E-01	2,22573419243E-01	9,66833819037E-01	1,73450649536E-01
9,99136406433E-01	1,05403262712E-01	9,93967147683E-01	1,20668935327E-01
		9,99770857484E-01	5,45988342772E-02

Nota: $X(i) = \sin \phi_i$ ou $X(i) = \cos \phi_i$.

na Eq. (2.27), para que a quadratura QR gerada pela combinação das quadraturas unidimensionais na variável ϕ e na variável θ sejam compatíveis, o dobro de coordenadas e pesos são necessários para a variável ϕ do que para a variável θ [3]. Apresenta-se na Tabela (2.6) a quadratura QR de forma que a mesma seja compatível com tal requisito.

Na Tabela (2.6), N_θ representa a ordem da quadratura unidimensional com respeito a variável polar θ , enquanto que N_ϕ representa a ordem da quadratura

Tabela 2.6: Quadratura *Quadruple Range QR*.

μ	η	w	μ	η	w
	$N_\theta = 1; N_\phi = 2$			$N_\theta = 4; N_\phi = 8$	
2,5828707E-01	7,4171292E-01	1,2500000E-01	4,8486538E-03	1,4917036E-01	4,7398256E-04
7,4171292E-01	2,5828707E-01	1,2500000E-01	2,4469585E-02	1,4722957E-01	1,0213463E-03
	$N_\theta = 2; N_\phi = 4$				
4,4697656E-02	3,9686441E-01	1,1127272E-02	5,5227846E-02	1,3865494E-01	1,4077945E-03
1,9929092E-01	3,4609593E-01	2,0190967E-02	8,9641823E-02	1,1933000E-01	1,6031394E-03
3,4609593E-01	1,9929092E-01	2,0190967E-02	1,1933000E-01	8,9641823E-02	1,6031394E-03
3,9686441E-01	4,4697656E-02	1,1127272E-02	1,3865494E-01	5,5227846E-02	1,4077945E-03
1,0234448E-01	9,0870273E-01	3,3284836E-02	1,4722957E-01	2,4469585E-02	1,0213463E-03
4,5631758E-01	7,9245784E-01	6,0396923E-02	1,4917036E-01	4,8486538E-03	4,7398256E-04
7,9245784E-01	4,5631758E-01	6,0396923E-02	1,4463768E-02	4,4498240E-01	2,1707283E-03
9,0870273E-01	1,0234448E-01	3,3284836E-02	7,2993954E-02	4,3919292E-01	4,6775256E-03
	$N_\theta = 3; N_\phi = 6$				
1,2709304E-02	2,3080263E-01	1,8869515E-03	1,6474733E-01	4,1361438E-01	6,4473673E-03
6,2097922E-02	2,2265496E-01	3,8689670E-03	2,6740588E-01	3,5596718E-01	7,3420008E-03
1,3080245E-01	1,9058357E-01	4,9066842E-03	3,5596718E-01	2,6740588E-01	7,3420008E-03
1,9058357E-01	1,3080245E-01	4,9066842E-03	4,1361438E-01	1,6474733E-01	6,4473673E-03
2,2265496E-01	6,2097922E-02	3,8689670E-03	4,3919292E-01	7,2993954E-02	4,6775256E-03
2,3080263E-01	1,2709304E-02	1,8869515E-03	4,4498240E-01	1,4463768E-02	2,1707283E-03
3,5187141E-02	6,3900312E-01	7,5534019E-03	2,4875925E-02	7,6531569E-01	4,4550210E-03
1,7192510E-01	6,1644536E-01	1,5487341E-02	1,2554073E-01	7,5535849E-01	9,5997617E-03
3,6214135E-01	5,2765212E-01	1,9641287E-02	2,8334540E-01	7,1136650E-01	1,3232036E-02
5,2765212E-01	3,6214135E-01	1,9641287E-02	4,5990565E-01	6,1222031E-01	1,5068107E-02
6,1644536E-01	1,7192510E-01	1,5487341E-02	6,1222031E-01	4,5990565E-01	1,5068107E-02
6,3900312E-01	3,5187141E-02	7,5534019E-03	7,1136650E-01	2,8334540E-01	1,3232036E-02
5,2480507E-02	9,5305292E-01	1,2680787E-02	7,5535849E-01	1,2554073E-01	9,5997617E-03
2,5642084E-01	9,1940873E-01	2,6000428E-02	7,6531569E-01	2,4875925E-02	4,4550210E-03
5,4012236E-01	7,8697643E-01	3,2974147E-02	3,1572157E-02	9,7132740E-01	6,0481512E-03
7,8697643E-01	5,4012236E-01	3,2974147E-02	1,5933445E-01	9,5868986E-01	1,3032667E-02
9,1940873E-01	2,5642084E-01	2,6000428E-02	3,5961781E-01	9,0285589E-01	1,7963856E-02
9,5305292E-01	5,2480507E-02	1,2680787E-02	5,8370547E-01	7,7702100E-01	2,0456512E-02
			7,7702100E-01	5,8370547E-01	2,0456512E-02
			9,0285589E-01	3,5961781E-01	1,7963856E-02
			9,5868986E-01	1,5933445E-01	1,3032667E-02
			9,7132740E-01	3,1572157E-02	6,0481512E-03

unidimensional com respeito a variável azimutal ϕ . Desta forma, ao utilizarmos essa quadratura, temos um total de $N_\theta * N_\phi$ direções discretas por octante.

2.3 Análise de precisão das quadraturas numéricas na integração de funções polinomiais nos cossenos diretores

Nesta seção faz-se uma análise do desempenho das quadraturas numéricas estudadas nas seções anteriores na integração de funções polinomiais na direção dos cossenos diretores Ω_x e Ω_y . Para fins de cálculos, apresenta-se na tabela abaixo, o número de direções por octante relacionado a cada ordem de uma dada quadratura.

Tabela 2.7: Quantidade de direções discretas por octante para dadas ordens de quadratura numérica.

LQ_N		$P_N T_N S_N$		$P_N T_N$		QR	
ordem	# direções	ordem	# direções	ordem	# direções	ordem	# direções
N=2	1	N=2	1	N=2	1	$N_\theta = 1; N_\phi = 2$	2
N=4	3	N=4	3	N=4	4	$N_\theta = 2; N_\phi = 4$	8
N=6	6	N=6	6	N=6	9	$N_\theta = 3; N_\phi = 6$	18
N=8	10	N=8	10	N=8	16	$N_\theta = 4; N_\phi = 8$	32
N=12	21	N=12	21	N=12	36	$N_\theta = 5; N_\phi = 10$	50
N=16	36	N=16	36	N=16	64	$N_\theta = 6; N_\phi = 12$	72
N=20	55	N=20	55	N=20	100	$N_\theta = 7; N_\phi = 14$	98

A quadratura simétrica de nível proposta por Carlson [30], é exata por integrar polinômios dados na Eq. (2.47) para baixos valores de l e m , de fato, para $l + m \leq N$ (veja Tabela 2.8).

Observa-se da Tabela 2.8 que, no exemplo em que $l + m = 8$, os conjuntos de quadratura simétrica de nível LQ_2 e LQ_4 , não conseguem aproximar exatamente a integral das funções polinomiais dadas pela Eq. (2.47), necessitando-se aumentar sua ordem para LQ_8 ou LQ_{16} . Ainda, se tomado o exemplo em que $l + m = 16$, apenas a quadratura simétrica de nível LQ_{16} aproxima exatamente a integral das funções polinomiais dadas pela Eq. (2.47), porém consegue-se 1 dígito significativo de concordância com a solução analítica ao utilizar a quadratura LQ_8 .

Tabela 2.8: Aproximação das funções polinomiais nos cossenos diretores dados pela

Eq. (2.47), através da quadratura LQ_N .

$L = l + m$	Analítica	LQ_2	LQ_4	LQ_8	LQ_{16}
$l=2, m=0$	0,3333333333	0,3333333333	0,3333333333	0,3333333333	0,3333333333
$l=2, m=2$	0,0666666667	0,1111111111	0,0666666667	0,0666666667	0,0666666667
$l=4, m=0$	0,2000000000	0,1111111111	0,2000000000	0,2000000000	0,2000000000
$l=4, m=2$	0,0285714286	0,0370370370	0,0276673158	0,0285714286	0,0285714286
$l=4, m=4$	0,0095238095	0,0123456843	0,0057786546	0,0095238095	0,0095238095
$l=6, m=0$	0,1428571429	0,0370370370	0,1446652354	0,1428571429	0,1428571429
$l=6, m=2$	0,0158730159	0,0123456843	0,0181113194	0,0158730159	0,0158730159
$l=8, m=0$	0,1111111111	0,0123456843	0,1084425765	0,1111111111	0,1111111111
$l=8, m=2$	0,0101010101	0,0041152285	0,0133333333	0,0100661072	0,0101010101
$l=8, m=4$	0,0023310023	0,0013717443	0,0016693884	0,0022543189	0,0023310023
$l=8, m=6$	0,0007770008	0,0004572477	0,0002315970	0,0008125547	0,0007770008
$l=8, m=8$	0,0003199415	0,0001524159	0,0000048813	0,0003441309	0,0003199415
$l=10, m=10$	0,0000649505	0,0000169351	0,0000045136	0,0000695045	0,0000648357
$l=12, m=10$	0,0000310633	0,0000056450	0,0000019802	0,0000328728	0,0000309846

Nota: $\mu^l \eta^m = \mu^m \eta^l$

Sabe-se que os conjuntos de quadratura unidimensionais de Gauss-Legendre e de Chebyshev, são capazes de integrar exatamente funções polinomiais até grau $2N - 1$. Desta forma, mostra-se no exemplo da Tabela 2.9, que a quadratura Legendre-Chebyshev $P_N T_N$, gerada pelo produto das quadraturas unidimensionais citadas, também é capaz de integrar funções polinomiais dadas na Eq. (2.47) para $l + m \leq 2N - 1$. Ainda, observa-se que, por exemplo, no caso em que $l + m = 14$, a quadratura $P_8 T_8$ já é suficiente por aproximar a integral sobre as funções polinomiais nos cossenos diretores, uma vez que para $N = 8$, a quadratura é capaz de integrar funções polinomiais até grau $2 * 8 - 1 = 15$.

Tabela 2.9: Aproximação das funções polinomiais nos cossenos diretores dados pela Eq.(2.47) através da quadratura $P_N T_N$.

$L = l + m$	Analítica	$P_2 T_2$	$P_4 T_4$	$P_8 T_8$	$P_{12} T_{12}$	$P_{20} T_{20}$
$l=2, m=0$	0,3333333333	0,3333333333	0,3333333333	0,3333333333	0,3333333333	0,3333333333
$l=2, m=2$	0,0666666667	0,1111111111	0,0666666667	0,0666666667	0,0666666667	0,0666666667
$l=4, m=0$	0,2000000000	0,1111111111	0,2000000000	0,2000000000	0,2000000000	0,2000000000
$l=4, m=4$	0,0095238095	0,0123456843	0,0062585028	0,0095238095	0,0095238095	0,0095238095
$l=6, m=0$	0,1428571429	0,0370370370	0,1428571429	0,1428571429	0,1428571429	0,1428571429
$l=6, m=6$	0,0016650017	0,0013717430	0,0006097458	0,0016650017	0,0016650017	0,0016650017
$l=8, m=0$	0,1111111111	0,0123456843	0,1063945694	0,1111111111	0,1111111111	0,1111111111
$l=8, m=6$	0,0007770008	0,0004572477	0,0002695701	0,0007770008	0,0007770008	0,0007770008
$l=8, m=8$	0,0003199415	0,0001524159	0,0000595987	0,0003107761	0,0003199415	0,0003199415
$l=10, m=0$	0,0909090909	0,0041152285	0,0800388836	0,0909090909	0,0909090909	0,0909090909
$l=12, m=10$	0,0000310633	0,0000056450	0,0000025767	0,0000285262	0,0000310633	0,0000310633
$l=16, m=14$	0,0000014274	0,0000000697	0,0000000246	0,0000011056	0,0000014157	0,0000014274

Nota: $\mu^l \eta^m = \mu^m \eta^l$

O conjunto de direções e pesos da quadratura Legendre-Chebyshev $P_N T_N S_N$ satisfazem apenas as condições de momento μ^2 ou η^2 na Eq. (2.47). No entanto, a medida que aumenta-se a ordem de quadratura ($N \geq 16$), mais dígitos significativos de precisão são obtidos na aproximação da integral Eq. (2.47), para qualquer soma de l e m tal que $l + m > 2$ (veja Tabela 2.10).

De fato, a quadratura $P_N T_N S_N$ satisfaz as condições de momento de primeira ordem (μ^2 ou η^2), porém para ordem de quadratura $P_N T_N S_N$ com $2 < N \leq 8$ obtém-se 1 a 4 dígitos significativos de precisão em relação a solução analítica, já para $N = 16$ e $N = 32$ chega-se a obter 7 e 18 dígitos, respectivamente. Nota-se que na Tabela 2.10, as soluções são apresentadas com 10 dígitos, porém a verificação computacional foi feita com 18 dígitos de precisão.

Tabela 2.10: Aproximação das funções polinomiais nos cossenos diretores dados pela

Eq. (2.47) através da quadratura $P_N T_N S_N$.

$L = l + m$	Análítica	$P_N T_N S_2$	$P_N T_N S_4$	$P_N T_N S_8$	$P_N T_N S_{16}$	$P_N T_N S_{30}$
$l=2, m=0$	0,3333333333	0,3333333333	0,3333333333	0,3333333333	0,3333333333	0,3333333333
$l=2, m=2$	0,0666666667	0,1111111111	0,0695709662	0,0667433340	0,0666681738	0,0666667031
$l=4, m=0$	0,2000000000	0,1111111111	0,1970957088	0,1999233343	0,1999985004	0,1999999710
$l=4, m=2$	0,0285714286	0,0370370370	0,0289467266	0,0285744118	0,0285714436	0,0285714279
$l=4, m=4$	0,0095238095	0,0123456843	0,0063312485	0,0094930092	0,0095237438	0,0095238091
$l=6, m=0$	0,1428571429	0,0370370370	0,1417312541	0,1428481993	0,1428571041	0,1428571513
$l=6, m=2$	0,0158730159	0,0123456843	0,0187997574	0,0159040475	0,0158730811	0,0158730156
$l=8, m=0$	0,1111111111	0,0123456843	0,1060793383	0,1110793901	0,1111110528	0,1111111192
$l=8, m=2$	0,0101010101	0,0041152285	0,0137966715	0,0101179682	0,0101010203	0,0101010098
$l=8, m=4$	0,0023310023	0,0013717443	0,0018302497	0,0023084589	0,0023309906	0,0023310023
$l=8, m=6$	0,0007770008	0,0004572477	0,0002697532	0,0007846897	0,0007770022	0,0007770008
$l=8, m=8$	0,0003199415	0,0001524159	0,0005962409	0,0003172116	0,0003199375	0,0003199415
$l=10, m=10$	0,0000649505	0,0000169351	0,0000058274	0,0000610249	0,0000649524	0,0000649505
$l=12, m=10$	0,0000310633	0,0000056450	0,0000025767	0,0000289959	0,0000310639	0,0000310633

Nota: $\mu^l \eta^m = \mu^m \eta^l$

A quadratura QR gerada na seção anterior, integra exatamente funções polinomiais dadas na Eq. (2.47) para $l + m \leq 2N_\theta - 1$ (veja Tabela 2.11). Nota-se que para a quadratura QR tal que $N_\theta \geq 4$, nas situações em que as mesmas não conseguem integrar exatamente as funções polinomiais nos cossenos diretores para dado grau $L = m+n$, essas quadraturas conseguem aproximar a solução analítica em até 4 a 7 dígitos significativos de precisão, dependendo da situação. Por exemplo, para $l + m = 12$, a quadratura QR com $N_\theta = 4$; $N_\phi = 8$, integra as funções polinomiais de acordo com a teoria, até grau $2 * 4 - 1 = 7$, mas consegue aproximar a solução analítica nesse exemplo em até 4 dígitos significativos de precisão. Já a quadratura QR com $N_\theta = 6$; $N_\phi = 12$ deveria integrar até grau $2 * 6 - 1 = 11$, mas consegue uma aproximação em até 7 dígitos significativos de precisão em relação a solução analítica no exemplo em questão.

Tabela 2.11: Aproximação das funções polinomiais nos cossenos diretores dados pela

Eq. (2.47) através da quadratura QR .

$L = l + m$	Analítica	$N_\theta = 2;$ $N_\phi = 4$	$N_\theta = 4;$ $N_\phi = 8$	$N_\theta = 5;$ $N_\phi = 10$	$N_\theta = 6;$ $N_\phi = 12$	$N_\theta = 7;$ $N_\phi = 14$
l=2, m=0	0,3333333333	0,3333333333	0,3333333333	0,3333333333	0,3333333333	0,3333333333
l=2, m=2	0,0666666667	0,0662812729	0,0666666667	0,0666666667	0,0666666667	0,0666666667
l=4, m=0	0,2000000000	0,1989356987	0,2000000000	0,2000000000	0,2000000000	0,2000000000
l=4, m=2	0,0285714286	0,0277432138	0,0285714286	0,0285714286	0,0285714286	0,0285714286
l=4, m=4	0,0095238095	0,0082854526	0,0095235568	0,0095238095	0,0095238095	0,0095238095
l=6, m=0	0,1428571429	0,1372921436	0,1428571429	0,1428571429	0,1428571429	0,1428571429
l=6, m=2	0,0158730159	0,0146199956	0,0158725961	0,0158730159	0,0158730159	0,0158730159
l=6, m=4	0,0043290043	0,0034629706	0,0043270734	0,0043289965	0,0043290043	0,0043290043
l=6, m=6	0,0016650017	0,0010805410	0,0016615140	0,0016649323	0,0016650015	0,0016650017
l=8, m=0	0,1111111111	0,0999707322	0,1111081677	0,1111111111	0,1111111111	0,1111111111
l=8, m=2	0,0101010101	0,0087581154	0,0100965060	0,0101009920	0,0101010101	0,0101010101
l=8, m=4	0,0023310023	0,0018150497	0,0023263061	0,0023309055	0,0023310020	0,0023310023
l=8, m=6	0,0007770008	0,0004517762	0,0007725730	0,0007768102	0,0007769979	0,0007770007
l=8, m=8	0,0003199415	0,0001412723	0,0003158752	0,0003196738	0,0003199328	0,0003199414
l=10, m=0	0,0909090909	0,0748089973	0,0908685457	0,0909090909	0,0909090909	0,0909090909

Nota: $\mu^l \eta^m = \mu^m \eta^l$

Uma análise mais ampla do desempenho que as quadraturas numéricas estudadas apresentam na integração das funções polinomiais nos cossenos diretores é feita tomando-se um exemplo qualquer. Neste sentido, fixa-se o grau $L = 6$ na Eq. (2.47), onde observa-se que a quadratura simétrica de nível LQ_6 , que possui 6 direções por octante, aproxima exatamente a integral dada pela Eq. (2.47) até grau $L \leq 6$, o que está de acordo com a literatura.

No entanto, a quadratura $P_N T_N$ de ordem $N = 4$, o que gera 4 direções por octante, já é o suficiente por integrar exatamente as funções polinomiais dadas pela Eq. (2.47) até grau $L \leq 6$.

Com respeito a quadratura $P_N T_N S_N$, altas ordens de quadratura $N \geq 16$, são necessárias para integrar funções polinomiais dadas pela Eq. (2.47)

com muita precisão. Por outro lado, se desejar-se aproximar integral para o exemplo em questão, onde $l + m = 6$, com precisão de 9 dígitos, a quadratura $P_N T_N S_{16}$ que gera um total de 36 direções em um único octante, é necessária.

A quadratura QR aproxima exatamente as funções polinomiais dadas pela Eq.(2.47) tal que $l + m = 6$, se $N_\theta = 4$, uma vez que, de acordo com Abu-Shumays [1], esta quadratura é exata por integrar funções polinomiais para grau até $L \leq 2N_\theta - 1$. Logo se $N_\theta = 4$, para que a quadratura seja compatível, deve-se ter $N_\phi = 8$, o que gera um total de 32 direções por octante.

Através da análise feita para o exemplo dado, a quadratura $P_N T_N$ apresentou o melhor desempenho em relação as outras, uma vez que, para baixas ordens de quadratura, aproxima as funções polinomiais dadas pela Eq. (2.47) exatamente. Porém, muitas vezes, na resolução da equação de transporte, integrar altas ordens polinomiais não é suficiente para determinar uma solução precisa para o problema, já que outras variáveis podem influenciar na sua solução, como o efeito raio, que será discutido mais adiante.

3 SOLUÇÃO ADO DA EQUAÇÃO BIDIMENSIONAL DE TRANSPORTE EM ORDENADAS DISCRETAS

Como mencionado nos capítulos anteriores, o principal interesse deste trabalho está relacionado a resolução de problemas bidimensionais de transporte de nêutrons em ordenadas discretas, onde o sistema de equações resultante da discretização angular, é tratado através do uso da técnica nodal juntamente com o método ADO proposto por Barichello e Siewert [18].

Na abordagem proposta, a variável angular da equação de transporte Eq. (2.1) é tratada através do método de ordenadas discretas, desenvolvido por Wick [113] e Chandrasekhar [32]. Neste sentido, faz-se uma discretização do conjunto de direções $\boldsymbol{\Omega} = (\mu, \eta, \xi)$, onde substitui-se o domínio contínuo das variáveis angulares (μ, η, ξ) por um conjunto de valores discretos (μ_k, η_k, ξ_k) , denominado ordenadas discretas, e aproxima-se o termo integral da fonte de espalhamento da Eq. (2.1) por uma quadratura numérica, tal que as direções discretas $\boldsymbol{\Omega}_k = (\mu_k, \eta_k, \xi_k)$ são associadas a pesos w_k , ou seja

$$\int_S \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' \approx \sum_{k=1}^M w_k \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}_k). \quad (3.1)$$

Como discutido no capítulo anterior, existem diferentes esquemas de quadraturas, e suas escolhas em princípio podem ser arbitrárias. Entretanto, a precisão com que estas quadraturas aproximam o termo integral da fonte de espalhamento dependerá da respectiva ordem, associada ao número de direções discretas e pesos. Restrições às direções $\boldsymbol{\Omega}_k$ e pesos w_k podem ser feitas por exemplo, de forma que certas propriedades sejam satisfeitas, como a simetria [74].

Escreve-se a versão bidimensional da Eq. (2.1) que considera o espalhamento isotrópico em meio homogêneo, em ordenadas discretas como

$$\mu_m \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_m) + \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_m) + \sigma_t \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_m) = Q(x, y) + \sigma_s \sum_{k=1}^M w_k \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_k), \quad (3.2)$$

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

A partir da solução da Eq. (3.2), pretende-se determinar o fluxo escalar de nêutrons, que de acordo com Lewis e Miller [64], é definido como

$$\phi(\mathbf{r}) = \int_S \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) d\mathbf{\Omega}, \quad (3.3)$$

ou na aproximação em ordenadas discretas correspondentes pode ser reescrito como

$$\phi(\mathbf{r}) = \sum_{k=1}^M w_k \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_k). \quad (3.4)$$

Os problemas de transporte estudados como casos de teste neste trabalho, são definidos em um domínio retangular D , com $x \in [0, a]$ e $y \in [0, b]$. Um processo de integração, que pode ser definido no domínio todo ou em subregiões do mesmo (nodos) é aplicado, juntamente com o método ADO na determinação do fluxo angular médio. Para isto, considera-se o domínio subdividido em τ regiões (ou nodos), definidos de forma que $x \in [a_{\tau-1}, a_\tau]$ e $y \in [b_{\tau-1}, b_\tau]$.

Para facilitar a determinação da solução para a equação bidimensional em ordenadas discretas, Eq. (3.2), opta-se por ordenar as direções e os pesos da quadratura de forma que, para $m = 1, \dots, M/2$, $\mathbf{\Omega}_m$ represente as direções incidentes (entrada) do fluxo de nêutrons em uma determinada fronteira, e $\mathbf{\Omega}_{m+M/2}$ represente as direções emergentes (saída) [15, 24]. Desta forma, a Eq. (3.2) é reescrita na forma de dois conjuntos, onde cada um está associado a $M/2$ equações discretas.

Neste sentido, optando-se por analisar o fluxo angular médio de nêutrons mais significativo em relação a variável x , associa-se as direções $(w_m, \mathbf{\Omega}_m)$ definidas para $\mu_m > 0$ aos índices $m = 1, \dots, M/2$ e $\mu_m < 0$ aos índices $m = M/2 + 1, \dots, M$, de modo que a Eq. (3.2) seja reescrita da forma

$$\begin{aligned} \mu_m \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_m) + \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_m) + \sigma_t \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_m) = \\ Q(x, y) + \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})] \end{aligned} \quad (3.5)$$

e

$$\begin{aligned} -\mu_m \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) + \eta_{m+M/2} \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) + \sigma_t \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) = \\ Q(x, y) + \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})], \end{aligned} \quad (3.6)$$

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

Por outro lado, se a variação do fluxo angular médio for mais significativo em relação a variável y , associa-se as direções $(w_m, \mathbf{\Omega}_m)$ definidas por $\eta_m > 0$ aos índices $m = 1, \dots, M/2$ e $\eta_m < 0$ aos índices $m = M/2 + 1, \dots, M$, de maneira que a Eq. (3.2) seja reescrita da forma

$$\begin{aligned} \mu_m \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_m) + \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_m) + \sigma_t \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_m) = \\ Q(x, y) + \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})] \end{aligned} \quad (3.7)$$

e

$$\begin{aligned} \mu_{m+M/2} \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) - \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) + \sigma_t \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) = \\ Q(x, y) + \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})], \end{aligned} \quad (3.8)$$

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

A relevância na escolha do ordenamento dos conjuntos de direções ficará mais evidente no decorrer do trabalho, onde será feita a integração transversal das equações, afim de obter sistemas de equações unidimensionais nas variáveis x e y .

3.1 Equações nodais unidimensionais

A partir das Eqs. (3.5)-(3.8), utiliza-se a técnica nodal juntamente com o método ADO para construir as soluções dos problemas aqui abordados. Inicialmente integra-se as Eqs. (3.5)-(3.8) em cada uma das variáveis espaciais de modo a obter as chamadas equações nodais integradas transversalmente. Este processo de integração, que é a base dos métodos nodais, reduz o sistema de equações diferenciais parciais de duas variáveis em dois sistemas de equações diferenciais ordinárias, um na variável x e o outro na variável y .

Desta forma, objetivando-se obter um sistema de equações nodais unidimensionais dependentes da variável x , para cada nodo do domínio em estudo, integra-se as Eqs. (3.5) e (3.6) na variável $y \in [b_{\tau-1}, b_{\tau}]$,

$$\mu_m \frac{d}{dx} \Psi_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_m) + \frac{\eta_m}{b_{\tau} - b_{\tau-1}} [\Psi(x, b_{\tau}, \mathbf{\Omega}_m) - \Psi(x, b_{\tau-1}, \mathbf{\Omega}_m)] + \sigma_t \Psi_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_m) = Q_{y\tau}(x) + \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})] \quad (3.9)$$

e

$$- \mu_m \frac{d}{dx} \Psi_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) + \frac{\eta_{m+M/2}}{b_{\tau} - b_{\tau-1}} [\Psi(x, b_{\tau}, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) - \Psi(x, b_{\tau-1}, \mathbf{\Omega}_{m+M/2})] + \sigma_t \Psi_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) = Q_{y\tau}(x) + \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})] \quad (3.10)$$

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

$$\Psi_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{1}{b_{\tau} - b_{\tau-1}} \int_{b_{\tau-1}}^{b_{\tau}} \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_m) dy \quad (3.11)$$

e a fonte integrada

$$Q_{y\tau}(x) = \frac{1}{b_\tau - b_{\tau-1}} \int_{b_{\tau-1}}^{b_\tau} Q(x, y) dy. \quad (3.12)$$

De forma análoga, para obter o sistema de equações nodais unidimensionais dependentes da variável y , para cada nodo τ do domínio em estudo, integra-se as Eqs. (3.7) e (3.8) na variável $x \in [a_{\tau-1}, a_\tau]$,

$$\begin{aligned} \eta_m \frac{d}{dy} \Psi_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_m) + \frac{\mu_m}{a_\tau - a_{\tau-1}} [\Psi(a_\tau, y, \mathbf{\Omega}_m) - \Psi(a_{\tau-1}, y, \mathbf{\Omega}_m)] + \sigma_t \Psi_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_m) = \\ Q_{x\tau}(y) + \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})] \end{aligned} \quad (3.13)$$

e

$$\begin{aligned} -\eta_m \frac{d}{dy} \Psi_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) + \frac{\mu_{m+M/2}}{a_\tau - a_{\tau-1}} [\Psi(a_\tau, y, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) - \Psi(a_{\tau-1}, y, \mathbf{\Omega}_{m+M/2})] + \\ \sigma_t \Psi_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) = Q_{x\tau}(y) + \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})] \end{aligned} \quad (3.14)$$

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

$$\Psi_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{1}{a_\tau - a_{\tau-1}} \int_{a_{\tau-1}}^{a_\tau} \Psi(x, y, \mathbf{\Omega}_m) dx \quad (3.15)$$

e a fonte integrada

$$Q_{x\tau}(y) = \frac{1}{a_\tau - a_{\tau-1}} \int_{a_{\tau-1}}^{a_\tau} Q(x, y) dx. \quad (3.16)$$

Nota-se que nas Eqs. (3.9),(3.10), (3.13) e (3.14), os fluxos angulares $\Psi(x, b_\tau, \mathbf{\Omega}_m)$, $\Psi(x, b_{\tau-1}, \mathbf{\Omega}_m)$, $\Psi(a_\tau, y, \mathbf{\Omega}_m)$ e $\Psi(a_{\tau-1}, y, \mathbf{\Omega}_m)$, podem ser conhecidos apenas nas direções incidentes, quando se tratarem do contorno do domínio, e desconhecidos nas direções restantes e no interior dos nodos. Logo, os sistemas de equações em ordenadas discretas nas variáveis x e y possuem mais incógnitas do que equações, de forma que equações auxiliares para tornar os sistemas determináveis devem ser propostas. A busca de equações auxiliares para representar exatamente as dependências espaciais desses termos de fuga transversais, de maneira a reduzir o

erro de aproximação, tem sido investigada por vários pesquisadores. Neste sentido, vários métodos têm sido propostos, como o método SGF-CN [21] cuja aproximação é feita de forma constante, o método SGF-LN [36] que aproxima por polinômios de primeiro grau, o método SGF-ExpN [70] que aproxima por funções exponenciais ou os métodos AHOTN e AHOTC propostos por Azmy [9, 10, 11]. No contexto da abordagem ADO, cita-se o trabalho de Cabrera [24, 75] que faz aproximações de forma constante e Prolo Filho [79, 80] que faz o uso de combinações de funções para a aproximação dos fluxos desconhecidos nos contornos. Neste trabalho, será utilizado aproximações constantes como feito por Cabrera [24].

3.2 Aproximações do fluxo no contorno por funções constantes

Aqui, estende-se a proposta iniciada por Cabrera [24] e aproxima-se os fluxos desconhecidos nos contornos através de funções constantes. Na abordagem proposta, as relações entre os fluxos desconhecidos nos contornos são introduzidas no termo não-homogêneo do problema, de maneira que as Eqs. (3.9) e (3.10), integradas em relação a $y \in [b_{\tau-1}, b_\tau]$, são reescritas como

$$\mu_m \frac{d}{dx} \Psi_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_m) + \sigma_t \Psi_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_m) = Q_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_m) + \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})] \quad (3.17)$$

e

$$- \mu_m \frac{d}{dx} \Psi_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) + \sigma_t \Psi_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) = Q_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) + \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})], \quad (3.18)$$

para $m = 1, \dots, M/2$, e o termo fonte da forma

$$Q_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_m) = Q_{y\tau}(x) - \frac{\eta_m}{b_\tau - b_{\tau-1}} [\Psi(x, b_\tau, \mathbf{\Omega}_m) - \Psi(x, b_{\tau-1}, \mathbf{\Omega}_m)], \quad (3.19)$$

para $m = 1, \dots, M$, onde $Q_{y\tau}(x)$ é dado pela Eq. (3.12). Note que, em virtude das quadraturas numéricas estudadas no Capítulo 2 preservarem simetria em relação a variável azimutal, utiliza-se aqui, a relação $\eta_m = \eta_{m+M/2}$, para $m = 1, \dots, M/2$.

O mesmo procedimento é feito com as Eqs. (3.13) e (3.14), integradas em relação a $x \in [a_{\tau-1}, a_\tau]$, onde estas passam a ser reescritas como

$$\eta_m \frac{d}{dy} \Psi_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_m) + \sigma_t \Psi_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_m) = Q_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_m) + \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})] \quad (3.20)$$

e

$$- \eta_m \frac{d}{dy} \Psi_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) + \sigma_t \Psi_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) = Q_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) + \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})], \quad (3.21)$$

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

$$Q_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_m) = Q_{x\tau}(y) - \frac{\mu_m}{a_\tau - a_{\tau-1}} [\Psi(a_\tau, y, \mathbf{\Omega}_m) - \Psi(a_{\tau-1}, y, \mathbf{\Omega}_m)] \quad (3.22)$$

para $m = 1, \dots, M$, onde $Q_{x\tau}(y)$ é dado pela Eq. (3.16). Novamente utiliza-se o fato de as quadraturas numéricas serem simétricas com respeito a variável azimutal, de maneira que $\mu_m = \mu_{m+M/2}$ para $m = 1, \dots, M/2$.

Deve-se tomar um certo cuidado no ordenamento das direções angulares das equações nodais unidimensionais em ordenadas discretas, Eqs. (3.17)-(3.22). Para facilitar o entendimento da construção das soluções para estas equações, é de extrema importância que a diferença no ordenamento das direções angulares para cada conjunto de equações, esteja bem claro. Para isto, considera-se o plano direcional $\mu\eta$, e faz-se as seguintes definições, que serão utilizados durante todo o trabalho.

Ordenamento 3.1. *Considera-se o ordenamento das direções angulares para as equações nodais integradas em relação a variável y , Eqs. (3.17)-(3.19), da forma:*

- Para $m = 1, \dots, M/4$, as direções são definidas por $(\mu > 0, \eta > 0)[\nearrow]$;
- Para $m = M/4 + 1, \dots, M/2$, as direções são definidas por $(\mu > 0, \eta < 0)[\searrow]$;
- Para $m = M/2 + 1, \dots, 3M/4$, as direções são definidas por $(\mu < 0, \eta > 0)[\nwarrow]$;
- Para $m = 3M/4 + 1, \dots, M$, as direções são definidas por $(\mu < 0, \eta < 0)[\swarrow]$.

Ordenamento 3.2. *Considera-se o ordenamento das direções angulares para as equações nodais integradas em relação a variável x , Eqs. (3.20)-(3.22), da forma*

- Para $m = 1, \dots, M/4$, as direções são definidas por $(\mu > 0, \eta > 0)[\nearrow]$;
- Para $m = M/4 + 1, \dots, M/2$, as direções são definidas por $(\mu < 0, \eta > 0)[\nwarrow]$;
- Para $m = M/2 + 1, \dots, 3M/4$, as direções são definidas por $(\mu > 0, \eta < 0)[\searrow]$;
- Para $m = 3M/4 + 1, \dots, M$, as direções são definidas por $(\mu < 0, \eta < 0)[\swarrow]$.

Prosseguindo com o desenvolvimento para a obtenção de uma solução para as equações bidimensionais em ordenadas discretas, nota-se que os termos desconhecidos $\Psi(x, b_\tau, \Omega_m)$, $\Psi(x, b_{\tau-1}, \Omega_m)$, $\Psi(a_\tau, y, \Omega_m)$ e $\Psi(a_{\tau-1}, y, \Omega_m)$, referentes aos fluxos angulares nas fronteiras dos nodos, originados no processo de integração, são incorporados à fonte de espalhamento. Como mencionado anteriormente, alguns desses termos são determinados através das condições de contorno do problema, enquanto que os outros, como usual em abordagens nodais, podem ser determinados através de equações auxiliares. Dessa forma, a definição completa do lado direito das Eqs. (3.19) e (3.22) são adiadas até serem introduzidas as condições de contorno específicas de acordo com os problemas teste considerados.

3.3 Solução através do método ADO

A partir do sistema de equações bidimensionais em ordenadas discretas, aplicou-se a técnica nodal de maneira a reduzir o sistema de equações diferenciais parciais a um sistema de equações diferenciais ordinárias, possibilitando-se o uso do método ADO para sua resolução. A abordagem ADO, trata de encontrar uma solução para o problema homogêneo associado, através da resolução de um problema simplificado de autovalores, onde a solução é obtida de forma analítica na variável espacial. Neste sentido propõe-se soluções para as Eqs. (3.17), (3.18), (3.20) e (3.21) em termos de autofunções e exponenciais da forma

$$\Psi_{y\tau}^h(x, \mathbf{\Omega}_m) = \Phi_{y\tau}(\nu_\tau, \mathbf{\Omega}_m)e^{-x/\nu_\tau} \quad (3.23)$$

e

$$\Psi_{x\tau}^h(y, \mathbf{\Omega}_m) = \Phi_{x\tau}(\gamma_\tau, \mathbf{\Omega}_m)e^{-y/\gamma_\tau}. \quad (3.24)$$

Para iniciar a construção da solução do problema homogêneo, substitui-se a Eq. (3.23) nas Eqs. (3.17) e (3.18), onde obtém-se

$$-\frac{\mu_m}{\nu_\tau} \Phi_{y\tau}(\nu_\tau, \mathbf{\Omega}_m) + \sigma_t \Phi_{y\tau}(\nu_\tau, \mathbf{\Omega}_m) = \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Phi_{y\tau}(\nu_\tau, \mathbf{\Omega}_k) + \Phi_{y\tau}(\nu_\tau, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})] \quad (3.25)$$

e

$$\frac{\mu_m}{\nu_\tau} \Phi_{y\tau}(\nu_\tau, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) + \sigma_t \Phi_{y\tau}(\nu_\tau, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) = \sigma_s \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Phi_{y\tau}(\nu_\tau, \mathbf{\Omega}_k) + \Phi_{y\tau}(\nu_\tau, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})], \quad (3.26)$$

para $m = 1, \dots, M/2$. Agora, define-se

$$U_{y\tau}(\nu_\tau, \mathbf{\Omega}_m) = \Phi_{y\tau}(\nu_\tau, \mathbf{\Omega}_m) + \Phi_{y\tau}(\nu_\tau, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) \quad (3.27)$$

e

$$V_{y\tau}(\nu_\tau, \boldsymbol{\Omega}_m) = \Phi_{y\tau}(\nu_\tau, \boldsymbol{\Omega}_m) - \Phi_{y\tau}(\nu_\tau, \boldsymbol{\Omega}_{m+M/2}), \quad (3.28)$$

de maneira que ao somar-se as Eqs. (3.25) e (3.26), obtém-se

$$V_{y\tau}(\nu_\tau, \boldsymbol{\Omega}_m) = \frac{\nu_\tau}{\mu_m} \sigma_t U_{y\tau}(\nu_\tau, \boldsymbol{\Omega}_m) - \frac{2\sigma_s \nu_\tau}{\mu_m} \sum_{k=1}^{M/2} w_k U_{y\tau}(\nu_\tau, \boldsymbol{\Omega}_k), \quad (3.29)$$

para $m = 1, \dots, M/2$. Destaca-se que $\eta_m = \eta_{m+M/2}$, já comentado anteriormente.

Por outro lado, ao subtrair-se a Eq. (3.25) da Eq. (3.26), levando em conta as definições dadas nas Eqs. (3.27) e (3.28), obtém-se outra relação entre as componentes dos vetores $U_{y\tau}$ e $V_{y\tau}$, na forma

$$V_{y\tau}(\nu_\tau, \boldsymbol{\Omega}_m) = \frac{\mu_m}{\nu_\tau \sigma_t} U_{y\tau}(\nu_\tau, \boldsymbol{\Omega}_m). \quad (3.30)$$

Finalmente, substitui-se a Eq. (3.30) na Eq. (3.29) para obter um problema de autovalores de dimensão $M/2 \times M/2$,

$$[\mathbf{D}_{y\tau} - \mathbf{A}_{y\tau}] \mathbf{U}_{y\tau} = \lambda_{y\tau} \mathbf{U}_{y\tau}, \quad (3.31)$$

onde

$$\lambda_{y\tau} = \frac{1}{\nu_\tau^2}. \quad (3.32)$$

Aqui, $\mathbf{U}_{y\tau}$ é o autovetor associado ao autovalor $\lambda_{y\tau}$ onde $\mathbf{D}_{y\tau}$ e $\mathbf{A}_{y\tau}$ são matrizes $M/2 \times M/2$ definidas como

$$\mathbf{D}_{y\tau} = \text{diag} \left\{ \left(\frac{\sigma_t}{\mu_1} \right)^2, \left(\frac{\sigma_t}{\mu_2} \right)^2, \dots, \left(\frac{\sigma_t}{\mu_{M/2}} \right)^2 \right\}, \quad (3.33)$$

e

$$A_{y\tau}(i, j) = \frac{2w_j \sigma_s \sigma_t}{\mu_i^2}, \quad (3.34)$$

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

Da solução do problema de autovalores dado pela Eq. (3.31), obtém-se o conjunto $\{\lambda_j, \mathbf{U}_j\}$ para $j = 1, \dots, M/2$, possibilitando-se encontrar as constantes de separação $\nu_{j,\tau}$, representadas na Eq. (3.32). Ainda, utiliza-se a Eq. (3.30) para encontrar as componentes do vetor $\mathbf{V}_{y\tau}$, e então, determina-se as autofunções $\Phi_{y\tau}$ a partir da soma das Eqs. (3.27) e (3.28)

$$\Phi_{y\tau}(\nu_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{U_{y\tau}(\nu_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_m) + V_{y\tau}(\nu_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_m)}{2} \quad (3.35)$$

e a partir da subtração das Eqs. (3.27) e (3.28)

$$\Phi_{y\tau}(\nu_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) = \frac{U_{y\tau}(\nu_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_m) - V_{y\tau}(\nu_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_m)}{2}. \quad (3.36)$$

Nota-se que, a partir de um problema com M equações, obteve-se um problema de autovalores de dimensão $M/2 \times M/2$. De acordo com a Eq. (3.32) pode-se tomar os valores positivos de $\nu_{j,\tau}$, para escrever a solução do problema homogêneo, Eqs. (3.17) e (3.18), para $m = 1, \dots, M/2$, através da superposição de soluções, na forma geral, como

$$\begin{aligned} \Psi_{y\tau}^h(x, \mathbf{\Omega}_m) = & \\ & \sum_{j=1}^{M/2} [A_{j,\tau} \Phi_{y\tau}(\nu_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(x-a_{\tau-1})/\nu_{j,\tau}} + A_{j+M/2,\tau} \Phi_{y\tau}(\nu_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(a_{\tau}-x)/\nu_{j,\tau}}] \end{aligned} \quad (3.37)$$

e

$$\begin{aligned} \Psi_{y\tau}^h(x, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) = & \\ & \sum_{j=1}^{M/2} [A_{j,\tau} \Phi_{y\tau}(\nu_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(x-a_{\tau-1})/\nu_{j,\tau}} + A_{j+M/2,\tau} \Phi_{y\tau}(\nu_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(a_{\tau}-x)/\nu_{j,\tau}}], \end{aligned} \quad (3.38)$$

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

Agora, para determinar-se a solução homogênea através do método ADO para o sistema de equações integradas em relação a variável x , Eqs. (3.20)

e (3.21), o processo é análogo. Neste sentido, obtém-se o problema de autovalores da forma

$$[\mathbf{D}_{x\tau} - \mathbf{A}_{x\tau}]\mathbf{U}_{x\tau} = \lambda_{x\tau}\mathbf{U}_{x\tau}, \quad (3.39)$$

com

$$\lambda_{x\tau} = \frac{1}{\gamma_\tau^2}, \quad (3.40)$$

onde, $\mathbf{D}_{x\tau}$ e $\mathbf{A}_{x\tau}$ são matrizes $M/2 \times M/2$, da forma,

$$\mathbf{D}_{x\tau} = \text{diag} \left\{ \left(\frac{\sigma_t}{\eta_1} \right)^2, \left(\frac{\sigma_t}{\eta_2} \right)^2, \dots, \left(\frac{\sigma_t}{\eta_{M/2}} \right)^2 \right\}, \quad (3.41)$$

e as entradas de $\mathbf{A}_{x\tau}$ são expressas, para $i = 1, \dots, M/2$ e $j = 1, \dots, M/2$, como

$$A_{x\tau}(i, j) = \frac{2w_j \sigma_s \sigma_t}{\eta_i^2}. \quad (3.42)$$

De modo análogo ao anterior, aqui as autofunções $\Phi_{x\tau}$ são determinadas a partir da relação

$$\Phi_{x\tau}(\gamma_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{U_{x\tau}(\gamma_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_m) + V_{x\tau}(\gamma_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_m)}{2} \quad (3.43)$$

e

$$\Phi_{x\tau}(\gamma_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) = \frac{U_{x\tau}(\gamma_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_m) - V_{x\tau}(\gamma_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_m)}{2}. \quad (3.44)$$

Desta forma, escreve-se a solução para o problema homogêneo, Eqs. (3.20) e (3.21), para $m = 1, \dots, M/2$ na forma geral

$$\begin{aligned} \Psi_{x\tau}^h(y, \mathbf{\Omega}_m) = & \\ & \sum_{j=1}^{M/2} [C_{j,\tau} \Phi_{x\tau}(\gamma_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(y-b_{\tau-1})/\gamma_{j,\tau}} + C_{j+M/2,\tau} \Phi_{x\tau}(\gamma_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(b_\tau-y)/\gamma_{j,\tau}}] \end{aligned} \quad (3.45)$$

e

$$\Psi_{x\tau}^h(y, \Omega_{m+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} [C_{j,\tau} \Phi_{x\tau}(\gamma_{j,\tau}, \Omega_{m+M/2}) e^{-(y-b_{\tau-1})/\gamma_{j,\tau}} + C_{j+M/2,\tau} \Phi_{x\tau}(\gamma_{j,\tau}, \Omega_m) e^{-(b_{\tau}-y)/\gamma_{j,\tau}}], \quad (3.46)$$

onde os coeficientes $C_{j,\tau}$, para $j = 1, \dots, M$, também devem ser determinados [16].

Cabe ainda salientar que formas simplificadas dos problemas de autovalores Eqs. (3.31) e (3.39), na forma de perturbações de matriz diagonal, foram recentemente derivadas [77].

3.4 Problemas de transporte de nêutrons de fonte-fixa

Uma vez que o problema formulado pela Eq. (3.2) tem um termo de fonte não-homogêneo, uma solução particular tem de ser definida. Em adição a este termo fonte, as expressões para a solução particular dependerão dos valores dos fluxos angulares sobre os contornos, de acordo com as Eqs. (3.19) e (3.22), onde em algumas direções, como dito anteriormente, podem ser determinados pelas condições de contorno conhecidas.

Neste ponto, considera-se os problemas teste de fonte-fixa, cuja fonte externa de nêutrons está localizada na região definida em $[0, a_s] \times [0, b_s]$, dentro do domínio D , de acordo com a figura abaixo.

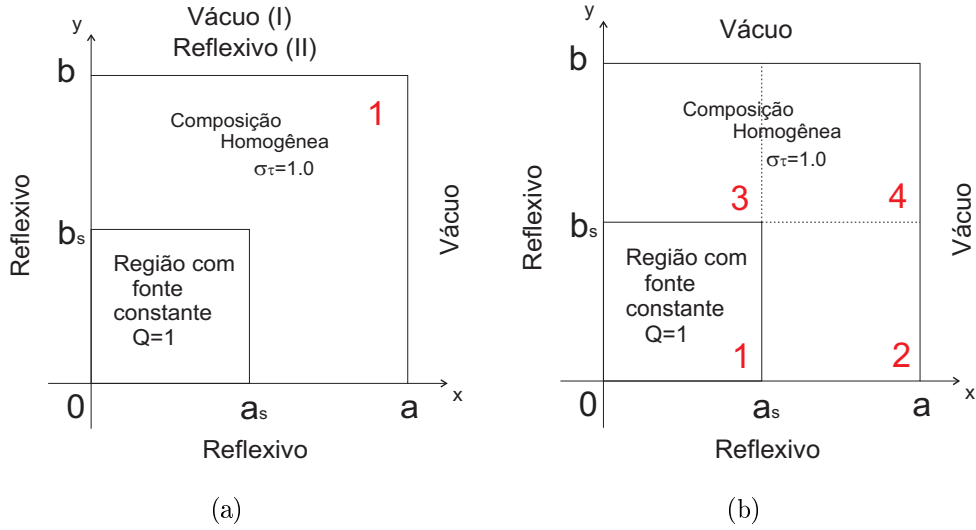


Figura 3.1: (a) *Problemas I e II*: Domínio representado por apenas uma região, com a fonte de nêutrons localizada no interior do domínio. (b) *Problema III*: Domínio representado em 4 regiões, com a fonte de nêutrons localizada na região (nodo) 1.

Note que em todos os problemas teste considerados neste trabalho, o domínio de estudo é composto por material homogêneo e o que diferencia os problemas está na escolha da condição de contorno em $y = b$ entre o *problema I e II*, e na divisão do domínio em regiões, *problema III*. Considera-se para todos os problemas teste, a fonte externa de nêutrons da forma

$$Q(x, y) = \begin{cases} 1, & \text{for } x \in [0, a_s] \text{ e } y \in [0, b_s] \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (3.47)$$

3.5 Solução particular baseada em aproximações constantes

Propõe-se neste trabalho, aproximações constantes simples para os fluxos angulares desconhecidos nas direções de saída no contorno do domínio. Desta forma, divide-se o estudo dos problemas em duas subseções, onde na primeira subseção é tratado dos problemas cujo domínio é definido em uma única região, e esta

é representada por um único nodo. Na segunda subsecção é tratado o *problema III*, este que considera o domínio espacial dividido em 4 regiões, onde cada região é representada por um nodo [16, 75].

3.5.1 Esquema nodal para o domínio completo

Nesta subsecção determina-se a solução para o fluxo angular de nêutrons para os *problemas I e II*, estes que são definidos sem subdivisões do domínio espacial, ou seja, o domínio é considerado um único nodo. Nesse sentido, as integrações transversais nas variáveis espaciais x e y são feitas considerando-se o domínio todo do problema, de maneira que a solução para o fluxo angular médio será definida também no domínio todo.

Agora, a partir das condições de contorno dos problemas considerados, alguns dos fluxos angulares apresentados nas Eqs. (3.19) e (3.22), são conhecidos para certas direções angulares, onde para o *problema I*, tem-se que

$$\begin{aligned} \Psi(x, b, \Omega_m) = 0 \quad \text{para } m = M/4 + 1, \dots, M/2 \\ \text{e} \quad m = 3M/4 + 1, \dots, M, \end{aligned} \quad (3.48)$$

$$\begin{aligned} \Psi(x, 0, \Omega_m) = \Psi(x, 0, \Omega_{m+M/4}) \quad \text{para } m = 1, \dots, M/4 \\ \text{e} \quad m = M/2 + 1, \dots, 3M/4, \end{aligned} \quad (3.49)$$

$$\begin{aligned} \Psi(a, y, \Omega_m) = 0 \quad \text{para } m = M/4 + 1, \dots, M/2 \\ \text{e} \quad m = 3M/4 + 1, \dots, M, \end{aligned} \quad (3.50)$$

$$\begin{aligned} \Psi(0, y, \Omega_m) = \Psi(0, y, \Omega_{m+M/4}) \quad \text{para } m = 1, \dots, M/4 \\ \text{e} \quad m = M/2 + 1, \dots, 3M/4. \end{aligned} \quad (3.51)$$

Enfatiza-se que as Eqs. (3.48) e (3.49) seguem o Ordenamento 3.1, enquanto que as Eqs. (3.50) e (3.51) seguem o Ordenamento 3.2.

Já para o *problema II*, tem-se das condições de contorno que

$$\begin{aligned} \Psi(x, b, \mathbf{\Omega}_m) = \Psi(x, b, \mathbf{\Omega}_{m+M/4}) & \text{ para } m = 1, \dots, M/4 \\ \text{e } m = M/2 + 1, \dots, 3M/4, & \end{aligned} \quad (3.52)$$

$$\begin{aligned} \Psi(x, 0, \mathbf{\Omega}_m) = \Psi(x, 0, \mathbf{\Omega}_{m+M/4}) & \text{ para } m = 1, \dots, M/4 \\ \text{e } m = M/2 + 1, \dots, 3M/4, & \end{aligned} \quad (3.53)$$

$$\begin{aligned} \Psi(a, y, \mathbf{\Omega}_m) = 0 & \text{ para } m = M/4 + 1, \dots, M/2 \\ \text{e } m = 3M/4 + 1, \dots, M, & \end{aligned} \quad (3.54)$$

$$\begin{aligned} \Psi(0, y, \mathbf{\Omega}_m) = \Psi(0, y, \mathbf{\Omega}_{m+M/4}) & \text{ para } m = 1, \dots, M/4 \\ \text{e } m = M/2 + 1, \dots, 3M/4. & \end{aligned} \quad (3.55)$$

Aqui, as Eqs. (3.52) e (3.53) seguem o Ordenamento 3.1, enquanto que as Eqs. (3.54) e (3.55) seguem o Ordenamento 3.2.

Agora, em relação aos fluxos angulares desconhecidos nos contornos, estes que são definidos nas direções de saída do nodo (domínio), propõe-se as seguintes aproximações como equações auxiliares

$$\Psi(x, b, \mathbf{\Omega}_m) = I_m, \quad (3.56)$$

$$\Psi(x, 0, \mathbf{\Omega}_m) = J_m, \quad (3.57)$$

$$\Psi(a, y, \mathbf{\Omega}_m) = L_m \quad (3.58)$$

e

$$\Psi(0, y, \mathbf{\Omega}_m) = M_m, \quad (3.59)$$

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

Em continuidade no processo de resolução dos problemas teste, considerando-se o Ordenamento 3.1, substitui-se a Eq. (3.47) na Eq. (3.12), e o resultante

deste, juntamente com as condições de contorno dos problemas, Eqs.(3.48)-(3.55), e as aproximações para os fluxos angulares definidos nas Eqs. (3.56)-(3.57), substitui-se na Eq. (3.19), onde obtém-se as seguintes equações para o termo de fonte, para os problemas integrados em y

$$Q_y(x, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{b_s}{b} + \frac{\eta_m}{b}[J_m - I_m], \quad m = 1, \dots, M/4$$

$$\text{e } m = M/2 + 1, \dots, 3M/4, \quad (3.60)$$

e

$$Q_y(x, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{b_s}{b} + \frac{\eta_m}{b}[J_m - X_m], \quad m = M/4 + 1, \dots, M/2$$

$$\text{e } m = 3M/4 + 1, \dots, M, \quad (3.61)$$

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

$$Q_y(x, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{\eta_m}{b}[J_m - I_m], \quad m = 1, \dots, M/4$$

$$\text{e } m = M/2 + 1, \dots, 3M/4, \quad (3.62)$$

e

$$Q_y(x, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{\eta_m}{b}[J_m - X_m], \quad m = M/4 + 1, \dots, M/2$$

$$\text{e } m = 3M/4 + 1, \dots, M, \quad (3.63)$$

para $x \in [a_s, a]$. Nas Eqs. (3.61) e (3.63), devido a geometria dos problemas estudados nessa seção, considera-se $X_m = 0$ para o *problema I*, e $X_m = I_m$ para o *problema II*.

Agora, considerando-se o Ordenamento 3.2, substitui-se a Eq. (3.47) na Eq. (3.16), e novamente, o resultante deste, juntamente com as condições de contorno dos problemas, Eqs.(3.48)-(3.55), e as aproximações para os fluxos angulares definidos nas Eqs. (3.58)-(3.59), substitui-se na Eq. (3.22), onde obtém-se as seguintes equações para o termo de fonte, para os problemas integrados em x ,

$$Q_x(y, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{a_s}{a} + \frac{\mu_m}{a}[M_m - L_m], \quad m = 1, \dots, M/4$$

$$\text{e } m = M/2 + 1, \dots, 3M/4, \quad (3.64)$$

e

$$Q_x(y, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{a_s}{a} + \frac{\mu_m}{a} M_m, \quad m = M/4 + 1, \dots, M/2$$

$$\text{e } m = 3M/4 + 1, \dots, M, \quad (3.65)$$

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

$$Q_x(y, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{\mu_m}{a} [M_m - L_m], \quad m = 1, \dots, M/4$$

$$\text{e } m = M/2 + 1, \dots, 3M/4, \quad (3.66)$$

e

$$Q_x(y, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{\mu_m}{a} M_m, \quad m = M/4 + 1, \dots, M/2$$

$$\text{e } m = 3M/4 + 1, \dots, M, \quad (3.67)$$

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

Uma vez definido o termo de fonte, e como este, é da forma constante para uma dada direção do fluxo angular, em todos os problemas aqui considerados, propõe-se para as Eqs. (3.17), (3.18), (3.20) e (3.21), soluções particulares da forma constante no espaço como

$$\Psi_y^p(x, \mathbf{\Omega}_m) = \begin{cases} O_m, & \text{para } x \in [0, a_s] \\ P_m, & \text{para } x \in [a_s, a] \end{cases} \quad (3.68)$$

e

$$\Psi_x^p(y, \mathbf{\Omega}_m) = \begin{cases} R_m, & \text{para } y \in [0, b_s] \\ S_m, & \text{para } y \in [b_s, b], \end{cases} \quad (3.69)$$

para $m = 1, \dots, M$, tal que, substituindo nas Eqs. (3.17) e (3.18), e nas Eqs. (3.20) e (3.21), respectivamente, obtém-se que O_m , P_m , R_m e S_m devem satisfazer os seguintes sistemas lineares $M \times M$, para $x \in [0, a]$ e $y \in [0, b]$,

$$\sigma_t O_m - \sigma_s \sum_{k=1}^M w_k O_k = Q_y(x, \mathbf{\Omega}_m), \quad \text{para } x \in [0, a_s], \quad (3.70)$$

$$\sigma_t P_m - \sigma_s \sum_{k=1}^M w_k P_k = Q_y(x, \mathbf{\Omega}_m), \quad \text{para } x \in [a_s, a], \quad (3.71)$$

$$\sigma_t R_m - \sigma_s \sum_{k=1}^M w_k R_k = Q_x(y, \mathbf{\Omega}_m), \quad \text{para } y \in [0, b_s] \quad (3.72)$$

e

$$\sigma_t S_m - \sigma_s \sum_{k=1}^M w_k S_k = Q_x(y, \mathbf{\Omega}_m), \quad \text{para } y \in [b_s, b], \quad (3.73)$$

onde $Q_y(x, \mathbf{\Omega}_m)$ e $Q_x(y, \mathbf{\Omega}_m)$ são dados nas Eqs. (3.60)-(3.67).

3.5.2 Solução geral dos *problemas I e II*

Até o momento, a solução homogênea e a solução particular para as Eqs. (3.17), (3.18), (3.20) e (3.21) estão definidas. Portanto, a solução geral para os *problemas I e II*, estes que consideram o domínio como um único nodo, pode ser escrita, para $m = 1, \dots, M/2$, como

$$\begin{aligned} \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_m) = \sum_{j=1}^{M/2} [A_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-x/\nu_j} + \\ A_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(a_s-x)/\nu_j}] + O_m, \end{aligned} \quad (3.74)$$

$$\begin{aligned} \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} [A_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-x/\nu_j} + \\ A_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(a_s-x)/\nu_j}] + O_{m+M/2} \end{aligned} \quad (3.75)$$

para $x \in (0, a_s)$,

$$\begin{aligned} \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_m) = \sum_{j=1}^{M/2} [B_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(x-a_s)/\nu_j} + \\ B_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(a-x)/\nu_j}] + P_m, \end{aligned} \quad (3.76)$$

$$\Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} [B_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(x-a_s)/\nu_j} + B_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(a-x)/\nu_j}] + P_{m+M/2} \quad (3.77)$$

para $x \in (a_s, a)$,

$$\Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_m) = \sum_{j=1}^{M/2} [C_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-y/\gamma_j} + C_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(b_s-y)/\gamma_j}] + R_m, \quad (3.78)$$

$$\Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} [C_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-y/\gamma_j} + C_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(b_s-y)/\gamma_j}] + R_{m+M/2} \quad (3.79)$$

para $y \in (0, b_s)$, e

$$\Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_m) = \sum_{j=1}^{M/2} [D_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(y-b_s)/\gamma_j} + D_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(b-y)/\gamma_j}] + S_m, \quad (3.80)$$

$$\Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} [D_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(y-b_s)/\gamma_j} + D_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(b-y)/\gamma_j}] + S_{m+M/2}, \quad (3.81)$$

para $y \in (b_s, b)$.

Neste ponto, as equações auxiliares definidas pelas Eqs. (3.56)-(3.59) são integradas, para todo x e y , respectivamente, e então definidas em termos da solução geral do problema integrado como

$$I_m = \sum_{j=1}^{M/2} [D_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(b-b_s)/\gamma_j} + D_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2})] + S_m, \quad (3.82)$$

$$J_m = \sum_{j=1}^{M/2} [C_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m) + C_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-b_s/\gamma_j}] + R_m, \quad (3.83)$$

$$L_m = \sum_{j=1}^{M/2} [B_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(a-a_s)/\nu_j} + B_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2})] + P_m \quad (3.84)$$

e

$$M_m = \sum_{j=1}^{M/2} [A_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m) + A_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-a_s/\nu_j}] + O_m, \quad (3.85)$$

tal que, substituindo no sistema definido pelas Eqs. (3.70)-(3.73), tem-se um acoplamento entre os problemas integrados em x e em y .

Para a solução estar completamente estabelecida, os $8M$ coeficientes da solução geral tem de ser determinados. Neste sentido, $4M$ equações são obtidas através do sistema definido nas Eqs. (3.70)-(3.73), como

$$\begin{aligned} \sigma_t O_m - \sigma_s \sum_{k=1}^M w_k O_k + \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\eta_m}{b} [-C_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m) - C_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-b_s/\gamma_j} + \\ D_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(b-b_s)/\gamma_j} + D_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2})] + \frac{\eta_m}{b} (S_m - R_m) = \frac{b_s}{b}, \end{aligned} \quad (3.86)$$

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

$$\begin{aligned} \sigma_t O_m - \sigma_s \sum_{k=1}^M w_k O_k + \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\eta_m}{b} [-C_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) - \\ C_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-b_s/\gamma_j}] - \frac{R_m \eta_m}{b} = \frac{b_s}{b}, \end{aligned} \quad (3.87)$$

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

$$\begin{aligned} \sigma_t P_m - \sigma_s \sum_{k=1}^M w_k P_k + \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\eta_m}{b} [-C_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m) - C_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-b_s/\gamma_j} + \\ D_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(b-b_s)/\gamma_j} + D_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2})] + \frac{\eta_m}{b} (S_m - R_m) = 0, \end{aligned} \quad (3.88)$$

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

$$\sigma_t P_m - \sigma_s \sum_{k=1}^M w_k P_k + \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\eta_m}{b} [-C_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) - C_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-b_s/\gamma_j}] - \frac{R_m \eta_m}{b} = 0, \quad (3.89)$$

para $m = M/4 + 1, \dots, M/2$ e $m = 3M/4 + 1, \dots, M$. Nota-se que as equações acima seguem o Ordenamento (3.1). Prosseguindo, tem-se as seguintes equações restantes que compõem o sistema

$$\sigma_t R_m - \sigma_s \sum_{k=1}^M w_k R_k + \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\mu_m}{a} [-A_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m) - A_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-a_s/\nu_j} + B_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(a-a_s)/\nu_j} + B_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2})] + \frac{\mu_m}{a} (P_m - O_m) = \frac{a_s}{a}, \quad (3.90)$$

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

$$\sigma_t R_m - \sigma_s \sum_{k=1}^M w_k R_k + \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\mu_m}{a} [-A_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) - A_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-a_s/\nu_j}] - \frac{O_m \mu_m}{a} = \frac{a_s}{a}, \quad (3.91)$$

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

$$\sigma_t S_m - \sigma_s \sum_{k=1}^M w_k S_k + \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\mu_m}{a} [-A_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m) - A_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-a_s/\nu_j} + B_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(a-a_s)/\nu_j} + B_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2})] + \frac{\mu_m}{a} (P_m - O_m) = 0, \quad (3.92)$$

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

$$\sigma_t S_m - \sigma_s \sum_{k=1}^M w_k S_k + \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\mu_m}{a} [-A_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) - A_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-a_s/\nu_j}] - \frac{O_m \mu_m}{a} = 0, \quad (3.93)$$

para $m = M/4 + 1, \dots, M/2$ e $m = 3M/4 + 1, \dots, M$. Nota-se que aqui, as Eqs.(3.90)-(3.93) seguem o Ordenamento (3.2).

O sistema de equações descrito acima foi apresentado para a escolha da configuração do *problema I*, caso deseja-se encontrar a solução para o *problema II*, devido a geometria dos problemas, substitui-se as Eqs. (3.87) e (3.89), respectivamente, pelas seguintes equações

$$\sigma_t O_m - \sigma_s \sum_{k=1}^M w_k O_k + \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\eta_m}{b} [-C_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) - C_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-b_s/\gamma_j} + D_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(b-b_s)/\gamma_j} + D_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m)] + \frac{\eta_m}{b} (S_m - R_m) = \frac{b_s}{b}, \quad (3.94)$$

e

$$\sigma_t P_m - \sigma_s \sum_{k=1}^M w_k P_k + \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\eta_m}{b} [-C_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) - C_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-b_s/\gamma_j} + D_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(b-b_s)/\gamma_j} + D_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m)] + \frac{\eta_m}{b} (S_m - R_m) = 0, \quad (3.95)$$

para $m = M/4 + 1, \dots, M/2$ e $m = 3M/4 + 1, \dots, M$. Com relação as Eqs. (3.90)-(3.93), permanecem as mesmas.

Obtém-se M equações através da substituição da versão integrada das condições de contorno reflexivas em $x = 0$ e $y = 0$, nas Eqs. (3.74)-(3.75) e Eqs.(3.78)-(3.79), respectivamente,

$$\sum_{j=1}^{M/2} [A_j [\Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m) - \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2})] + A_{j+M/2} e^{-a_s/\nu_j} [\Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) - \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m)]] + O_m - O_{m+M/2} = 0 \quad (3.96)$$

e

$$\sum_{j=1}^{M/2} [C_j [\Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m) - \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2})] + C_{j+M/2} e^{-b_s/\gamma_j} [\Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) - \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m)]] + R_m - R_{m+M/2} = 0, \quad (3.97)$$

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

Através das condições de continuidade em $x = a_s$ e $y = b_s$, gera-se outras $2M$ equações, na forma

$$\sum_{j=1}^{M/2} [A_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-a_s/\nu_j} + A_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) - B_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m) - B_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(a-a_s)/\nu_j}] + O_m - P_m = 0, \quad (3.98)$$

$$\sum_{j=1}^{M/2} [A_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-a_s/\nu_j} + A_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m) - B_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) - B_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(a-a_s)/\nu_j}] + O_{m+M/2} - P_{m+M/2} = 0, \quad (3.99)$$

$$\sum_{j=1}^{M/2} [C_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-b_s/\gamma_j} + C_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) - D_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m) - D_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(b-b_s)/\gamma_j}] + R_m - S_m = 0 \quad (3.100)$$

e

$$\sum_{j=1}^{M/2} [C_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-b_s/\gamma_j} + C_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m) - D_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) - D_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(b-b_s)/\gamma_j}] + R_{m+M/2} - S_{m+M/2} = 0, \quad (3.101)$$

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

As M equações restantes, são obtidas através da versão nodal das condições de contorno de vácuo em $x = a$ e $y = b$, caso escolhido a configuração do *problema I*. Se desejar-se determinar a solução para o *problema II*, de acordo com a Fig. (3.1), tem-se condição de vácuo em $x = a$ e condição de reflexão em $y = b$. Neste sentido, afim de obter as equações para o *problema I*, substitui-se a versão nodal das condições de contorno de vácuo nas Eqs. (3.77) e (3.81), respectivamente,

onde obtém-se

$$\sum_{j=1}^{M/2} [B_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(a-a_s)/\nu_j} + B_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m)] + P_{m+M/2} = 0 \quad (3.102)$$

e

$$\sum_{j=1}^{M/2} [D_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(b-b_s)/\gamma_j} + D_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m)] + S_{m+M/2} = 0, \quad (3.103)$$

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

Para o *problema II*, de acordo com a Fig. (3.1), introduz-se a condição de reflexão em $y = b$, assim, a Eq. (3.103) é substituída pela equação abaixo

$$\sum_{j=1}^{M/2} [D_j e^{-(b-b_s)/\gamma_j} [\Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m) - \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2})] + D_{j+M/2} [\Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) - \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m)]] + S_m - S_{m+M/2} = 0, \quad (3.104)$$

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

Através das Eqs.(3.86)-(3.104), consegue-se determinar os $8M$ coeficientes da solução geral, tanto para o *problema I* quanto para o *problema II*. Escreve-se então, explicitamente, a solução geral para o fluxo angular integrado na direção x como

$$\Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_m) = \Psi_y^h(x, \mathbf{\Omega}_m) + \Psi_y^p(x, \mathbf{\Omega}_m), \quad \text{para } m = 1, \dots, M, \quad (3.105)$$

e a solução geral para o fluxo angular integrado na direção y como

$$\Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_m) = \Psi_x^h(y, \mathbf{\Omega}_m) + \Psi_x^p(y, \mathbf{\Omega}_m), \quad \text{para } m = 1, \dots, M. \quad (3.106)$$

3.5.3 Esquema nodal para o domínio em regiões

Nesta subseção determina-se a solução para o fluxo angular de nêutrons para o *problema III*, este que é definido no domínio subdividido em 4 regiões, onde

cada região do domínio é representada por um nodo [77]. Neste sentido, os nodos do problema, definidos em $x \in [a_{\tau-1}, a_\tau]$ e $y \in [b_{\tau-1}, b_\tau]$, são representados da forma

- Nodo 1 ($\tau = 1$): $x \in [0, a_s]$ e $y \in [0, b_s]$;
- Nodo 2 ($\tau = 2$): $x \in [a_s, a]$ e $y \in [0, b_s]$;
- Nodo 3 ($\tau = 3$): $x \in [0, a_s]$ e $y \in [b_s, b]$;
- Nodo 4 ($\tau = 4$): $x \in [a_s, a]$ e $y \in [b_s, b]$.

Na construção das soluções gerais para as equações nodais unidimensionais para o problema cujo domínio espacial é subdividido em nodos, mantém-se por enquanto, os fluxos angulares desconhecidos nos contornos dos nodos, implícitos no termo de fonte das equações integradas em x e y , Eqs. (3.19) e (3.22), respectivamente. Novamente, as soluções particulares para as Eqs. (3.17), (3.18), (3.20) e (3.21), que considera o domínio espacial subdividido em τ nodos, são propostas da forma constante como

$$\Psi_{y\tau}^p(x, \mathbf{\Omega}_m) = E_{m,\tau} \quad (3.107)$$

e

$$\Psi_{x\tau}^p(y, \mathbf{\Omega}_m) = F_{m,\tau} \quad (3.108)$$

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

Substitui-se a solução particular Eq. (3.107) nas Eqs. (3.17) e (3.18), e a solução particular Eq. (3.108) nas Eqs. (3.20) e (3.21), onde obtém-se que $E_{m,\tau}$ e $F_{m,\tau}$ devem satisfazer um sistema linear $M \times M$, para cada nodo τ , da forma

$$\sigma_t E_{m,\tau} - \sigma_s \sum_{k=1}^M w_k E_{k,\tau} = Q_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_m) \quad (3.109)$$

e

$$\sigma_t F_{m,\tau} - \sigma_s \sum_{k=1}^M w_k F_{k,\tau} = Q_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_m), \quad (3.110)$$

onde $Q_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_m)$ e $Q_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_m)$ são dados pelas Eqs. (3.19) e (3.22), respectivamente. Note que os fluxos angulares desconhecidos nos contornos dos nodos, ainda não foram definidos.

3.5.4 Solução geral do *problema III*

A solução homogênea e a solução particular para o *problema III* estão definidas. Portanto, a solução geral para este que considera o domínio subdividido em 4 nodos, pode ser escrita, para cada nodo τ , como

$$\begin{aligned} \Psi_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_m) = \sum_{j=1}^{M/2} [A_{j,\tau} \Phi_{y\tau}(\nu_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(x-a_{\tau-1})/\nu_{j,\tau}} + \\ A_{j+M/2,\tau} \Phi_{y\tau}(\nu_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(a_{\tau-x})/\nu_{j,\tau}}] + E_{m,\tau}, \end{aligned} \quad (3.111)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{y\tau}(x, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} [A_{j,\tau} \Phi_{y\tau}(\nu_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(x-a_{\tau-1})/\nu_{j,\tau}} + \\ A_{j+M/2,\tau} \Phi_{y\tau}(\nu_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(a_{\tau-x})/\nu_{j,\tau}}] + E_{m+M/2,\tau}, \end{aligned} \quad (3.112)$$

$$\begin{aligned} \Psi_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_m) = \sum_{j=1}^{M/2} [C_{j,\tau} \Phi_{x\tau}(\gamma_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(y-b_{\tau-1})/\gamma_{j,\tau}} + \\ C_{j+M/2,\tau} \Phi_{x\tau}(\gamma_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(b_{\tau-y})/\gamma_{j,\tau}}] + F_{m,\tau} \end{aligned} \quad (3.113)$$

e

$$\begin{aligned} \Psi_{x\tau}(y, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} [C_{j,\tau} \Phi_{x\tau}(\gamma_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(y-b_{\tau-1})/\gamma_{j,\tau}} + \\ C_{j+M/2,\tau} \Phi_{x\tau}(\gamma_{j,\tau}, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(b_{\tau-y})/\gamma_{j,\tau}}] + F_{m+M/2,\tau} \end{aligned} \quad (3.114)$$

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

Neste momento, os fluxos angulares desconhecidos nos contornos dos nodos, que estavam implícitos nos termos de fonte das equações integradas em x e em y , são agora, definidos em termos da solução geral do problema integrado, para cada nodo τ , onde

• Nodo 1:

$$\begin{aligned}
\Psi(a_s, y, \mathbf{\Omega}_m) &= \Psi_{y1}(a_s, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\Omega} \cdot \underline{n} > 0, \\
\Psi(a_s, y, \mathbf{\Omega}_m) &= \Psi_{y2}(a_s, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\Omega} \cdot \underline{n} < 0, \\
\Psi(x, b_s, \mathbf{\Omega}_m) &= \Psi_{x1}(b_s, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\Omega} \cdot \underline{n} > 0, \\
\Psi(x, b_s, \mathbf{\Omega}_m) &= \Psi_{x3}(b_s, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\Omega} \cdot \underline{n} < 0, \\
\Psi(0, y, \mathbf{\Omega}_m) &= \Psi_{y1}(0, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\Omega} \cdot \underline{n} > 0 \\
&\text{e} \\
\Psi(x, 0, \mathbf{\Omega}_m) &= \Psi_{x1}(0, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\Omega} \cdot \underline{n} > 0.
\end{aligned} \tag{3.115}$$

• Nodo 2:

$$\begin{aligned}
\Psi(a_s, y, \mathbf{\Omega}_m) &= \Psi_{y1}(a_s, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\Omega} \cdot \underline{n} < 0, \\
\Psi(a_s, y, \mathbf{\Omega}_m) &= \Psi_{y2}(a_s, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\Omega} \cdot \underline{n} > 0, \\
\Psi(x, b_s, \mathbf{\Omega}_m) &= \Psi_{x2}(b_s, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\Omega} \cdot \underline{n} > 0, \\
\Psi(x, b_s, \mathbf{\Omega}_m) &= \Psi_{x4}(b_s, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\Omega} \cdot \underline{n} < 0, \\
\Psi(a, y, \mathbf{\Omega}_m) &= \Psi_{y2}(a, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\Omega} \cdot \underline{n} > 0 \\
&\text{e} \\
\Psi(x, 0, \mathbf{\Omega}_m) &= \Psi_{x2}(0, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\Omega} \cdot \underline{n} > 0.
\end{aligned} \tag{3.116}$$

- Nodo 3:

$$\begin{aligned}
\Psi(a_s, y, \mathbf{\Omega}_m) &= \Psi_{y3}(a_s, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\mathbf{\Omega}} \cdot \underline{\mathbf{n}} > 0, \\
\Psi(a_s, y, \mathbf{\Omega}_m) &= \Psi_{y4}(a_s, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\mathbf{\Omega}} \cdot \underline{\mathbf{n}} < 0, \\
\Psi(x, b_s, \mathbf{\Omega}_m) &= \Psi_{x1}(b_s, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\mathbf{\Omega}} \cdot \underline{\mathbf{n}} < 0, \\
\Psi(x, b_s, \mathbf{\Omega}_m) &= \Psi_{x3}(b_s, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\mathbf{\Omega}} \cdot \underline{\mathbf{n}} > 0, \\
\Psi(0, y, \mathbf{\Omega}_m) &= \Psi_{y3}(0, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\mathbf{\Omega}} \cdot \underline{\mathbf{n}} > 0
\end{aligned} \tag{3.117}$$

e

$$\Psi(x, b, \mathbf{\Omega}_m) = \Psi_{x3}(b, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\mathbf{\Omega}} \cdot \underline{\mathbf{n}} > 0.$$

- Nodo 4:

$$\begin{aligned}
\Psi(a_s, y, \mathbf{\Omega}_m) &= \Psi_{y3}(a_s, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\mathbf{\Omega}} \cdot \underline{\mathbf{n}} < 0, \\
\Psi(a_s, y, \mathbf{\Omega}_m) &= \Psi_{y4}(a_s, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\mathbf{\Omega}} \cdot \underline{\mathbf{n}} > 0, \\
\Psi(x, b_s, \mathbf{\Omega}_m) &= \Psi_{x2}(b_s, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\mathbf{\Omega}} \cdot \underline{\mathbf{n}} < 0, \\
\Psi(x, b_s, \mathbf{\Omega}_m) &= \Psi_{x4}(b_s, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\mathbf{\Omega}} \cdot \underline{\mathbf{n}} > 0, \\
\Psi(a, y, \mathbf{\Omega}_m) &= \Psi_{y4}(a, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\mathbf{\Omega}} \cdot \underline{\mathbf{n}} > 0
\end{aligned} \tag{3.118}$$

e

$$\Psi(x, b, \mathbf{\Omega}_m) = \Psi_{x4}(b, \mathbf{\Omega}_m) \quad \text{para } \underline{\mathbf{\Omega}} \cdot \underline{\mathbf{n}} > 0.$$

Aqui, $\underline{\mathbf{\Omega}} \cdot \underline{\mathbf{n}} > 0$ representa as direções emergentes (saída) no contorno do nodo e $\underline{\mathbf{\Omega}} \cdot \underline{\mathbf{n}} < 0$ representa as direções incidentes (entrada) no contorno do nodo.

Note que para a solução do *problema III* estar completamente estabelecida, os $16M$ coeficientes da solução geral Eqs. (3.111)-(3.114), devem ser determinados. Neste sentido, $8M$ coeficientes são obtidos através da substituição das equações auxiliares Eqs. (3.115)-(3.118) nos termos de fonte dados pelas Eqs. (3.19) e (3.22), e o resultante destas, nos sistemas $M \times M$ dados pelas Eqs. (3.109)-(3.110). Através das versões integradas das condições de contorno do problema, são obtidos outros $4M$ coeficientes, sendo os $4M$ coeficientes remanescentes obtidos através das

condições de continuidade nas interfaces dos nodos (regiões). Desta forma, escreve-se um único sistema linear acoplado de dimensão $16M \times 16M$, onde determina-se os coeficientes que constroem a solução geral para os fluxos angulares integrados, para cada região do domínio espacial do problema estudado.

Com a solução completamente estabelecida para os três problemas teste, no capítulo seguinte apresenta-se os resultados numéricos para o fluxo escalar médio de nêutrons e compara-se os resultados obtidos com outras formulações existentes na literatura.

4 RESULTADOS NUMÉRICOS

No capítulo anterior, foram determinadas as soluções para três problemas teste de transporte de nêutrons, através da utilização da técnica nodal juntamente com a abordagem ADO. As soluções particulares que compõem a solução geral dos problemas, foram propostas da forma constante, e os fluxos desconhecidos nos contornos dos nodos do domínio espacial, estes que surgiram da integração transversal nas variáveis x e y via técnica nodal, foram escritos em termos das soluções gerais dos respectivos problemas. Neste capítulo, através do uso dos diferentes esquemas de quadraturas numéricas estudadas, apresenta-se os resultados numéricos obtidos para o fluxo escalar médio para os nodos definidos nos três problemas apresentados.

A fim de validar o método proposto, caracteriza-se os três problemas teste considerados da seguinte forma:

- *Problema I e II*: Considera-se a região retangular definida por $a = b = 1$ cm, e a fonte unitária $Q = 1$ localizada na região $[0, a_s] \times [0, b_s]$ com $a_s = b_s = 0,52$ cm. Ainda, são utilizados como parâmetros, a seção de choque total como $\sigma_t = 1,0$ cm^{-1} e a seção de choque de espalhamento como $\sigma_s = 0,5$ cm^{-1} , $\sigma_s = 0,1$ cm^{-1} e $\sigma_s = 0,05$ cm^{-1} , para se comparar os resultados com os da literatura [80, 104].
- *Problema III*: Considera-se o domínio retangular definido em $a = b = 1$ cm, com subdivisões em 4 regiões, onde na região 1 definida em $[0, a_s] \times [0, b_s]$ com $a_s = b_s = 0,5$ cm, está localizada a fonte externa de nêutrons $Q = 1$. Ainda, são utilizados como parâmetros, a seção de choque total como $\sigma_t = 1,0$ cm^{-1} e a seção de choque de espalhamento como $\sigma_s = 0,9$ cm^{-1} e $\sigma_s = 0,3$ cm^{-1} , para efeitos de comparação com o método AHOT [10].

Na formulação proposta neste trabalho, o problema bidimensional é decomposto em problemas unidimensionais em termos de fluxos angulares médios nas variáveis x e y . Portanto, os fluxos escalares também devem ser expressos em termos destas médias. Neste sentido, avalia-se o fluxo escalar de nêutrons, já escrito em ordenadas discretas como

$$\phi_y(x) = \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+M/2})] \quad (4.1)$$

e

$$\phi_x(y) = \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_x(y, \Omega_k) + \Psi_x(y, \Omega_{k+M/2})]. \quad (4.2)$$

A implementação computacional da solução em ordenadas discretas dos problemas propostos, foi feita em linguagem **FORTRAN**, onde definiu-se primeiramente o esquema de quadratura numérica a ser utilizado, em seguida, utilizou-se as subrotinas do pacote **EISPACK** [95] para o cálculo das autofunções e constantes de separação, e subrotinas do pacote **LINPACK** [37] para a resolução dos sistemas lineares. Após a determinação da solução geral dos problemas, avaliou-se então, o fluxo escalar definido pelas Eqs. (4.1) e (4.2).

Nas duas seções seguintes, para fins de comparações, serão apresentados os resultados numéricos obtidos para o fluxo escalar de nêutrons para os *problemas I* e *II* (Fig. (3.1)), através da utilização da quadratura simétrica de nível LQ_N , estes que foram publicados no artigo [103]. Na terceira e última seção que compõe este capítulo, apresenta-se e compara-se os resultados numéricos para o *problema III*, obtidos através da abordagem ADO e do código fornecido pelo Prof. Dr. Y. Azmy, AHOT [10], utilizando-se das quatro quadraturas apresentadas neste trabalho.

É importante salientar que os resultados que serão apresentados para os *problemas I* e *II*, foram gerados através de abordagens distintas. No trabalho de Tsai e Loyalka [104], os resultados são gerados a partir da resolução da equação integral de transporte de nêutrons, enquanto que o código TWOTRAN-II [61], trabalha

diretamente com o problema bidimensional, e os fluxos escalares são obtidos através de métodos puramente numéricos. Já o método ADO, é um método nodal que trata o problema bidimensional através de problemas unidimensionais cujos fluxos escalares são obtidos em termos de médias nas variáveis espaciais.

4.1 Resultados numéricos para o *problema I*

Apresenta-se nas Tabelas (4.1)-(4.3), os resultados numéricos obtidos neste trabalho para o *problema I*, este que considera o domínio com condições de contorno do tipo reflexivas em $x = 0$ e $y = 0$, e em seguida, compara-se com os resultados presentes na literatura [80, 104].

Tabela 4.1: Fluxos escalares $\phi_y(x) = \phi_x(y)$, para $x = y = 0, 5$.

σ_s	Tsai and Loyalka [104]	TWO TRAN-II [104]	Ref. [80]	Este trabalho
	N=5,7,9,11,15	N=4,8,16	N=2,4,6,8,12,16	N=2,4,6,8,12,16
0,50	0,359604	0,337412	0,2772	0,304
	0,358422	0,337707	0,3022	0,320
	0,357414	0,339794	0,3041	0,320
	0,356678		0,3047	0,320
	0,355885		0,3052	0,320
			0,3061	0,321
0,10	0,258802	0,239483	0,2049	0,219
	0,259150	0,241676	0,2173	0,226
	0,259131	0,244032	0,2179	0,226
	0,259030		0,2182	0,225
	0,258906		0,2187	0,226
			0,2193	0,227
0,05	0,250097	0,231102	0,1984	0,212
	0,250569	0,233421	0,2098	0,218
	0,250636	0,235787	0,2104	0,217
	0,250591		0,2107	0,217
	0,250529		0,2112	0,218
			0,2118	0,218

Na primeira coluna da Tabela (4.1) são listados os resultados que constam na referência [104], os quais foram obtidos através da solução numérica da equação integral. Na coluna dois, são apresentados os resultados gerados numericamente a partir do código TWO TRAN-II [61]. Já na coluna três, os resultados foram obtidos pelo método ADO [80], no entanto, destaca-se que na referência, o domínio do problema foi considerado completo, com fonte externa localizada na região

central e condições de vácuo em todo o contorno. Observa-se que os resultados obtidos neste trabalho através do método ADO considerando o domínio com condições de contorno do tipo reflexivas, concordam em um a dois dígitos com os resultados obtidos pelo método ADO que considera o problema em um domínio todo [80].

Vale enfatizar que as comparações são feitas através de grandezas diferentes, enquanto que os resultados apresentados na referência [104] são obtidos pontualmente, os resultados via método ADO são obtidos em termos de médias.

Tabela 4.2: Fluxos escalares $\phi_y(x) = \phi_x(y)$, para $x = y = 0, 7$.

σ_s	Tsai and Loyalka [104] N=5,7,9,11,15	TWO TRAN-II [104] N=4,8,16	Este trabalho N=2,4,6,8,12,16
0,50	0,149801	0,157320	0,210
	0,139050	0,139581	0,199
	0,138539	0,133426	0,190
	0,138460		0,184
	0,137048		0,178
			0,175
0,10	0,093601	0,100591	0,144
	0,083932	0,085131	0,130
	0,083759	0,078914	0,122
	0,083911		0,117
	0,082774		0,112
			0,110
0,05	0,088990	0,095914	0,138
	0,079448	0,080662	0,124
	0,079301	0,074448	0,116
	0,079469		0,112
	0,078362		0,107
			0,105

Verifica-se nas Tabelas (4.1)-(4.3) uma concordância em geral de um dígito dos resultados obtidos neste trabalho em comparação com os outros métodos presentes na literatura.

Na seção seguinte, apresenta-se os resultados numéricos obtidos para o *problema II*, onde comparações são feitas com os obtidos na literatura.

Tabela 4.3: Fluxos escalares $\phi_y(x) = \phi_x(y)$, para $x = y = 0, 98$.

σ_s	Tsai and Loyalka [104]	TWO TRAN-II [104]	Este trabalho
	N=5,7,9,11,15	N=4,8,16	N=2,4,6,8,12,16
0,50	0,054250	0,045536	0,112
	0,053812	0,048085	0,092
	0,053558	0,052366	0,085
	0,053442		0,082
	0,053413		0,081
			0,080
0,10	0,032577	0,025670	0,072
	0,032669	0,028969	0,055
	0,032655	0,032432	0,050
	0,032637		0,048
	0,032622		0,047
			0,047
0,05	0,030823	0,023777	0,069
	0,030952	0,027299	0,052
	0,030956	0,030978	0,047
	0,030945		0,045
	0,030931		0,045
			0,045

4.2 Resultados numéricos para o *problema II*

Apresenta-se nas Tabelas (4.4)-(4.6), os resultados numéricos obtidos neste trabalho pelo método ADO, considerando o domínio com condições de contorno do tipo reflexivas em três contornos do domínio, $x = 0$, $y = 0$ e $y = b$, e em seguida, compara-se com os resultados presentes na literatura [104].

Novamente, verifica-se nas Tabelas (4.4)-(4.6) uma concordância de um dígito dos resultados obtidos neste trabalho em comparação com os outros métodos presentes na literatura. Observa-se que os resultados numéricos para os fluxos escalares obtidos nesse trabalho, através do método ADO, são apresentados para $\phi_y(x)$ e $\phi_x(y)$, e eles concordam entre si em um a dois dígitos. Essas diferenças são obtidas,

uma vez que através da técnica nodal, integrações transversais nas variáveis x e y foram feitas, de modo que o problema bidimensional de transporte foi reduzido a problemas unidimensionais cujas soluções são dadas em termos de médias na variável x e y , entretanto, devido a geometria imposta pelo *problema II*, há uma perda na simetria dos problemas unidimensionais resultantes da aplicação da técnica nodal, de maneira que as soluções gerais para o *problema II* apresentam esta pequena diferença quando o fluxo escalar é dado em media nas variáveis x e y .

Tabela 4.4: Fluxos escalares $\phi_y(x)$ e $\phi_x(y)$, para $x = y = 0, 5$.

σ_s	Tsai and Loyalka [104]		TWOTRAN-II [104]		Este trabalho		
	N		N		N	$\phi_y(x)$	$\phi_x(y)$
0,50	5	0,431998	4	0,410822	2	0,358	0,347
	7	0,430350	8	0,409623	4	0,389	0,376
	9	0,429096	16	0,410466	6	0,392	0,380
	11	0,428217			8	0,393	0,382
	15	0,427286			12	0,394	0,383
					16	0,395	0,384
0,10	5	0,288564	4	0,270651	2	0,242	0,235
	7	0,288871	8	0,271301	4	0,255	0,249
	9	0,288835	16	0,273029	6	0,257	0,251
	11	0,288726			8	0,257	0,252
	15	0,288589			12	0,258	0,253
					16	0,259	0,253
0,05	5	0,277246	4	0,259679	2	0,233	0,226
	7	0,277697	8	0,260457	4	0,245	0,239
	9	0,277757	16	0,262222	6	0,246	0,240
	11	0,277709			8	0,246	0,241
	15	0,277640			12	0,247	0,242
					16	0,248	0,243

Todos os resultados apresentados até aqui, mostram no geral, um a dois dígitos de concordância com os resultados presentes na literatura, para os problemas considerados. Pode-se dizer que o método ADO, mostrou-se com características positivas, pois nenhum processo iterativo foi utilizado, ainda, considerou-se o domínio dos problemas como um único nodo, e expressou-se as soluções em termos de mé-

dias. O tempo computacional levado para gerar todos os resultados de cada tabela, não ultrapassou 8 segundos em um computador Intel Core i5, 2.5GHz, 6Gb(RAM), o que demonstra a eficiência computacional do método ADO.

Tabela 4.5: Fluxos escalares $\phi_y(x)$ e $\phi_x(y)$, para $x = y = 0, 7$.

σ_s	Tsai and Loyalka [104]		TWOTRAN-II [104]		Este trabalho		
	N		N		N	$\phi_y(x)$	$\phi_x(y)$
0,50	5	0,228936	4	0,244215	2	0,271	0,282
	7	0,216711	8	0,223360	4	0,270	0,276
	9	0,216011	16	0,211823	6	0,263	0,269
	11	0,215789			8	0,258	0,264
	15	0,213950			12	0,253	0,260
					16	0,251	0,258
0,10	5	0,128126	4	0,142411	2	0,174	0,178
	7	0,117764	8	0,125095	4	0,163	0,164
	9	0,117625	16	0,114679	6	0,156	0,156
	11	0,117777			8	0,151	0,152
	15	0,116436			12	0,147	0,149
					16	0,145	0,147
0,05	5	0,120663	4	0,134817	2	0,166	0,169
	7	0,110484	8	0,117822	4	0,155	0,155
	9	0,110379	16	0,107477	6	0,148	0,148
	11	0,110553			8	0,143	0,144
	15	0,109257			12	0,139	0,141
					16	0,137	0,139

Tabela 4.6: Fluxos escalares $\phi_y(x)$ e $\phi_x(y)$, para $x = y = 0, 98$.

σ_s	Tsai and Loyalka [104]		TWOTRAN-II [104]		Este trabalho		
	N		N		N	$\phi_y(x)$	$\phi_x(y)$
0,50	5	0,130265	4	0,116577	2	0,175	0,240
	7	0,129550	8	0,120535	4	0,156	0,213
	9	0,129076	16	0,126068	6	0,149	0,202
	11	0,128816			8	0,145	0,197
	15	0,128644			12	0,144	0,196
					16	0,143	0,196
0,10	5	0,068694	4	0,057436	2	0,108	0,141
	7	0,068912	8	0,063123	4	0,089	0,112
	9	0,068898	16	0,067962	6	0,083	0,103
	11	0,068876			8	0,081	0,100
	15	0,068824			12	0,080	0,099
					16	0,080	0,100
0,05	5	0,064231	4	0,052648	2	0,102	0,133
	7	0,064507	8	0,058881	4	0,084	0,104
	9	0,064521	16	0,063719	6	0,078	0,096
	11	0,064500			8	0,076	0,093
	15	0,064468			12	0,075	0,092
					16	0,075	0,093

4.3 Resultados numéricos para o *problema III*

Para observar o desempenho das quadraturas estudadas na solução da equação bidimensional de transporte de nêutrons em ordenadas discretas, e para posteriormente fazer uma análise assintótica espacial e angular do erro de discretização numérica, gerou-se resultados numéricos para o fluxo escalar médio em cada região (nodo) do domínio espacial do *problema III*, através da utilização do método ADO e do código computacional AHOT [10], que são apresentados nas Tabelas (4.7)-(4.12). O método AHOT é um método nodal que trabalha com o domínio espacial dividido em uma malha numérica, onde os sistemas de equações resultantes da integração transversal são resolvidos localmente para cada célula da malha iterativamente [9, 10]. Os resultados obtidos através do código AHOT também são dados em termos de médias, onde determina-se o fluxo angular e escalar para cada célula da malha, sendo o fluxo na região de interesse representado pela média da soma dos fluxos de cada célula que compõe a região. Desta forma, os resultados que serão comparados nesta seção, são obtidos através de mesmas grandezas, o que facilita a análise da eficácia do método ADO.

Note que, como o método ADO aplicado ao *problema III* considera cada região do domínio espacial como um nodo, pode-se dizer que os resultados obtidos através do método são determinados através de uma malha espacial (2×2), enquanto que o método AHOT considera diferentes malhas espaciais. Entretanto, enfatiza-se que as soluções obtidas através do método ADO não utiliza esquemas de varredura numérica, mas são determinadas através de um sistema linear acoplado de problemas unidimensionais.

Nas tabelas seguintes, apresenta-se os resultados obtidos para o fluxo escalar médio em cada região do domínio espacial do *problema III* através dos métodos ADO e AHOT, e dos diferentes esquemas de quadratura numérica estudadas

no texto, quadratura simétrica de nível LQ_N , quadratura Legendre-Chebyshev triangular $P_N T_N S_N$, Legendre-Chebyshev quadrangular $P_N T_N$ e quadratura *quadruple range* QR , utilizados para representar as direções discretas das equações em ordenadas discretas. É importante destacar que não haviam sido implementados diferentes e altas ordens de quadraturas numéricas via código AHOT, assim como uma análise assintótica angular dos resultados, sendo estes investigados e apresentados apenas neste trabalho.

A partir da análise dos resultados da Tabela 4.7, pode-se observar que os resultados numéricos obtidos através da utilização da quadratura simétrica de nível LQ_N , mantiveram-se com $2(\pm 1)$ dígitos de concordância à medida que aumentou-se o número de direções por octante de 6 até 36, tanto através do uso do método ADO quanto através do uso do código AHOT. Note que a notação (± 1) significa que pode-se ter uma variação de uma unidade no último dígito de comparação.

Já nos resultados numéricos obtidos através da utilização das quadraturas $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$, observa-se uma concordância de $3(\pm 1)$ dígitos à medida que aumentou-se o número de direções por octante, de 36 até 105 na quadratura $P_N T_N S_N$, e de 36 até 100 na quadratura $P_N T_N$, tanto via método ADO quanto via código AHOT. Observa-se que os resultados obtidos quando fixado 36 direções por octante nas quadraturas LQ_N , $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$, obteve-se uma concordância de $3(\pm 1)$ dígitos, tanto via método ADO quanto via código AHOT.

A quadratura QR mostrou-se mais eficiente em relação as outras, mantendo-se $4(\pm 1)$ dígitos de concordância à medida que aumentou-se o número de direções por octante de 32 até 98, tanto via método ADO quanto via código AHOT, e ainda, mantiveram-se os 5 dígitos de concordância quando aumentou-se o número de direções por octante de 72 para 98 via método ADO e via código AHOT(2×2), AHOT(8×8), AHOT(16×16), AHOT(32×32) e AHOT(64×64).

Tabela 4.7: Fluxo escalar médio na região 1 para $\sigma_s = 0,9$.

Quadratura simétrica de nível LQ_N							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
1	0,80034	0,75422	0,79585	0,80814	0,81140	0,81224	0,81245
3	0,88354	0,82756	0,85889	0,86811	0,87051	0,87111	0,87127
6	0,89235	0,83620	0,86594	0,87508	0,87751	0,87813	0,87828
10	0,89665	0,84099	0,87043	0,87961	0,88209	0,88273	0,88289
36	0,89903	0,84573	0,87419	0,88327	0,88576	0,88639	0,88655
Quadratura $P_N T_N S_N$							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
1	0,80034	0,75422	0,79585	0,80814	0,81140	0,81224	0,81245
10	0,89749	0,84194	0,87135	0,88052	0,88301	0,88364	0,88380
15	0,89854	0,84395	0,87293	0,88208	0,88457	0,88521	0,88537
36	0,89935	0,84690	0,87497	0,88397	0,88643	0,88707	0,88723
55	0,89952	0,84791	0,87559	0,88448	0,88694	0,88758	0,88774
66	0,89957	0,84827	0,87580	0,88465	0,88711	0,88774	0,88790
105	0,89967	0,84898	0,87624	0,88498	0,88742	0,88806	0,88822
Quadratura $P_N T_N$							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
1	0,80034	0,75422	0,79585	0,80814	0,81140	0,81224	0,81245
9	0,89603	0,84219	0,87037	0,87945	0,88197	0,88262	0,88279
16	0,89869	0,84600	0,87401	0,88287	0,88537	0,88600	0,88617
36	0,89970	0,84847	0,87597	0,88475	0,88715	0,88779	0,88795
49	0,89980	0,84899	0,87631	0,88501	0,88743	0,88806	0,88822
64	0,89984	0,84933	0,87652	0,88516	0,88757	0,88821	0,88837
100	0,89987	0,84972	0,87677	0,88534	0,88775	0,88838	0,88854
Quadratura QR							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
2	0,85297	0,80267	0,82399	0,83085	0,83270	0,83318	0,83330
8	0,90190	0,85097	0,87859	0,88712	0,88952	0,89015	0,89031
18	0,90032	0,85052	0,87752	0,88598	0,88837	0,88900	0,88917
32	0,89984	0,85027	0,87716	0,88563	0,88798	0,88860	0,88876
50	0,89985	0,85032	0,87718	0,88563	0,88798	0,88861	0,88877
72	0,89986	0,85033	0,87719	0,88565	0,88800	0,88862	0,88878
98	0,89986	0,85033	0,87720	0,88565	0,88800	0,88862	0,88878

Comparando-se os resultados obtidos através das quadraturas QR , $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$ com 98, 105 e 100 direções por octante, respectivamente, observa-se uma concordância de $4(\pm 1)$ dígitos entre QR e $P_N T_N$ via método ADO, e $3(\pm 1)$ dígitos entre as três quadraturas via método ADO ou AHOT(32×32) e AHOT(64×64).

Pode-se ver graficamente o comportamento do fluxo escalar médio na região 1 para $\sigma_s = 0,9$, avaliado com uso dos quatro esquemas de quadraturas numéricas estudadas, na figura abaixo.

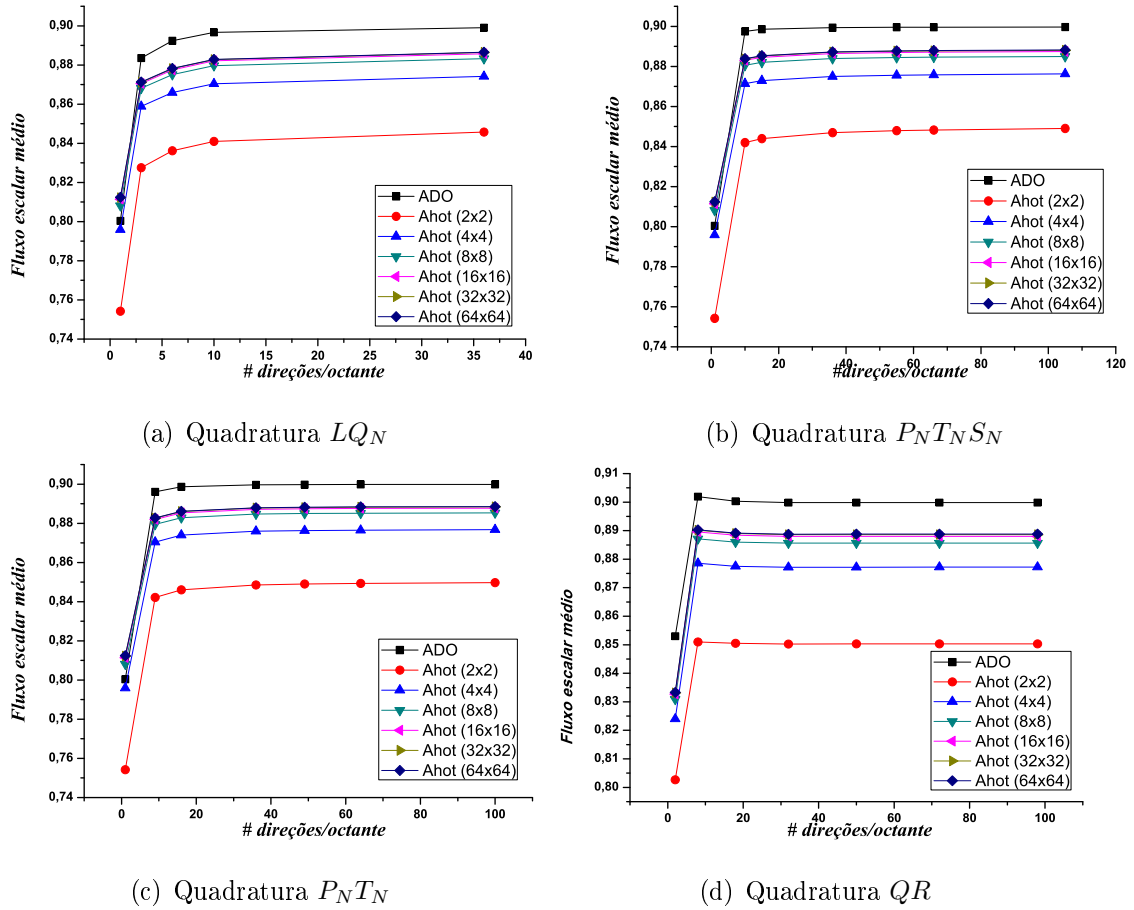


Figura 4.1: Fluxo escalar médio na região 1 para o problema III com $\sigma_s = 0,9$.

Tabela 4.8: Fluxo escalar médio nas regiões 2 e 3 para $\sigma_s = 0,9$.

Quadratura LQ_N							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
1	0,35726	0,35044	0,34434	0,34187	0,34113	0,34092	0,34087
3	0,38402	0,37373	0,37279	0,37182	0,37170	0,37169	0,37169
6	0,38464	0,37405	0,37333	0,37286	0,37290	0,37290	0,37290
10	0,38442	0,37384	0,37325	0,37328	0,37336	0,37337	0,37337
36	0,38361	0,37333	0,37324	0,37356	0,37358	0,37359	0,37359
Quadratura $P_N T_N S_N$							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
1	0,35726	0,35044	0,34434	0,34187	0,34113	0,34092	0,34087
10	0,38417	0,37364	0,37316	0,37323	0,37327	0,37328	0,37328
15	0,38381	0,37338	0,37308	0,37331	0,37333	0,37333	0,37333
36	0,38344	0,37331	0,37327	0,37352	0,37356	0,37357	0,37357
55	0,38339	0,37341	0,37340	0,37361	0,37365	0,37366	0,37366
66	0,38338	0,37346	0,37344	0,37364	0,37368	0,37369	0,37369
105	0,38338	0,37359	0,37353	0,37369	0,37374	0,37375	0,37376
Quadratura $P_N T_N$							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
1	0,35726	0,35044	0,34434	0,34187	0,34113	0,34092	0,34087
9	0,38449	0,37401	0,37340	0,37349	0,37360	0,37359	0,37359
16	0,38395	0,37369	0,37342	0,37402	0,37407	0,37409	0,37409
36	0,38351	0,37355	0,37352	0,37373	0,37378	0,37380	0,37381
49	0,38345	0,37359	0,37354	0,37372	0,37378	0,37379	0,37379
64	0,38342	0,37363	0,37356	0,37372	0,37378	0,37378	0,37378
100	0,38340	0,37370	0,37359	0,37373	0,37378	0,37379	0,37380
Quadratura QR							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
2	0,38099	0,37034	0,36985	0,36905	0,36912	0,36914	0,36914
8	0,38582	0,37584	0,37629	0,37675	0,37673	0,37672	0,37672
18	0,38335	0,37381	0,37363	0,37383	0,37394	0,37395	0,37396
32	0,38335	0,37379	0,37361	0,37371	0,37378	0,37380	0,37381
50	0,38341	0,37384	0,37367	0,37379	0,37382	0,37383	0,37383
72	0,38341	0,37385	0,37367	0,37379	0,37383	0,37384	0,37384
98	0,38341	0,37385	0,37367	0,37379	0,37383	0,37384	0,37385

Agora, a partir da análise dos resultados numéricos encontrados para o fluxo escalar médio nas regiões 2 e 3, estes que estão apresentados na Tabela 4.8, pode-se observar que os resultados obtidos através da utilização da quadratura simétrica de nível LQ_N , mantiveram-se em $3(\pm 1)$ dígitos de concordância à medida que aumentou-se o número de direções por octante de 6 até 36 através do uso do método ADO e através do uso do código AHOT.

Nos resultados numéricos obtidos através da utilização das quadraturas $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$, ganhou-se 1 dígito em relação aos obtidos para a região 1, obtendo-se uma concordância de $4(\pm 1)$ dígitos à medida que aumentou-se o número de direções por octante, de 55 até 105 na quadratura $P_N T_N S_N$, e de 49 até 100 na quadratura $P_N T_N$, via método ADO, e uma concordância de $3(\pm 1)$ dígitos via código AHOT para ambas quadraturas. Mas observa-se que os resultados obtidos quando fixado 36 direções por octante, obteve-se uma concordância de $3(\pm 1)$ dígitos através do uso das quadraturas LQ_N , $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$, tanto via método ADO quanto via código AHOT.

A quadratura QR mostrou-se novamente mais eficiente em relação as outras, mantendo-se $5(\pm 1)$ dígitos de concordância à medida que aumentou-se o número de direções por octante de 50 até 98 via método ADO e $4(\pm 1)$ dígitos de concordância via código AHOT. Ainda, mantiveram-se os 5 dígitos de concordância quando aumentou-se o número de direções por octante de 72 para 98 via código AHOT(8×8), AHOT(16×16), AHOT(32×32) e AHOT(64×64).

Em comparação aos resultados obtidos entre as quadraturas QR , $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$ com 98, 105 e 100 direções por octante, respectivamente, assim como nos resultados obtidos para a região 1, observa-se uma concordância de $4(\pm 1)$ dígitos entre QR e $P_N T_N$ via método ADO e $3(\pm 1)$ dígitos entre as três quadraturas, via método ADO ou AHOT(32×32) e AHOT(64×64).

Observa-se graficamente o comportamento do fluxo escalar médio nas regiões 2 e 3 através das quatro quadraturas estudadas para o problema em que $\sigma_s = 0,9$ na figura abaixo.

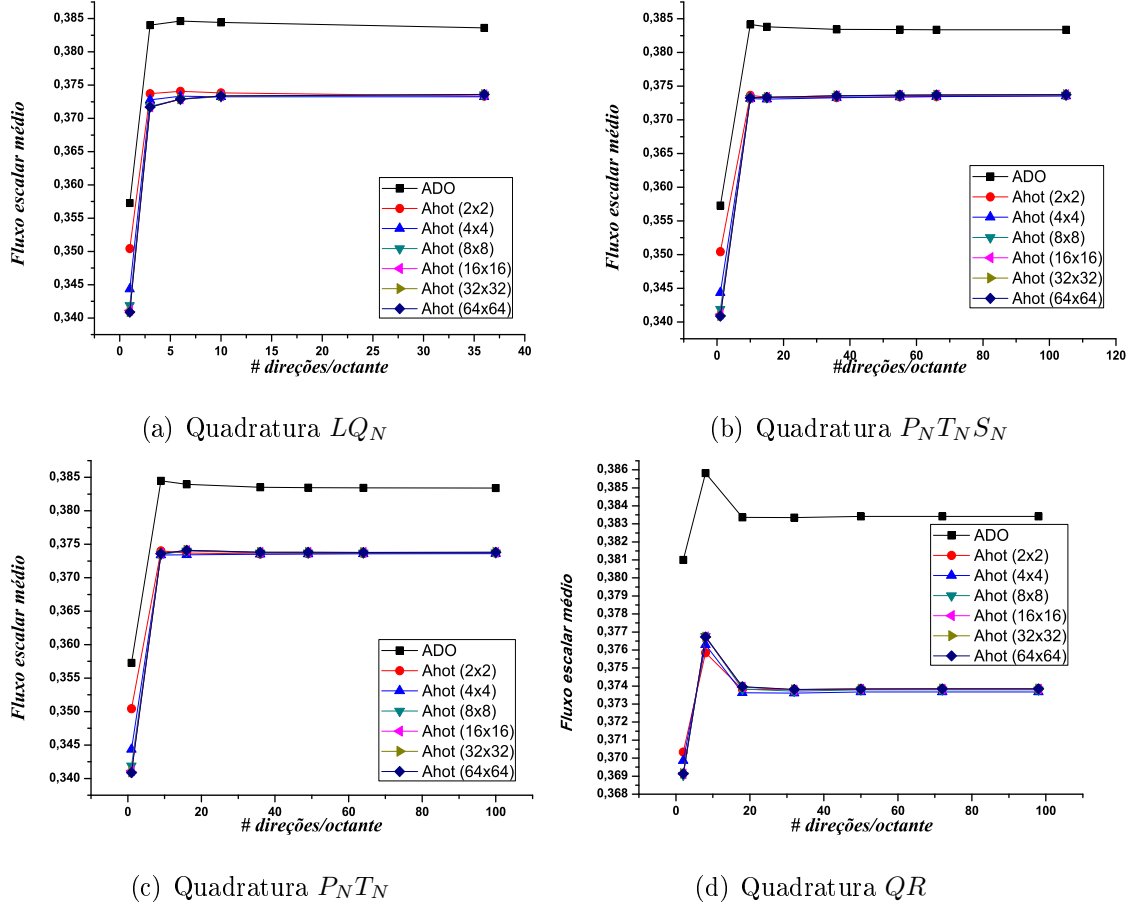


Figura 4.2: Fluxo escalar médio nas regiões 2 e 3 para o *problema III* com $\sigma_s = 0,9$.

Na tabela abaixo apresenta-se os resultados numéricos encontrados para o fluxo escalar médio na região 4 através do uso das quatro quadraturas estudadas neste capítulo via método ADO e código AHOT.

Tabela 4.9: Fluxo escalar médio na região 4 para $\sigma_s = 0,9$.

Quadratura LQ_N							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
1	0,27517	0,26344	0,28338	0,28949	0,29116	0,29160	0,29171
3	0,24136	0,23543	0,23787	0,23792	0,23766	0,23754	0,23750
6	0,22963	0,22549	0,22776	0,22676	0,22639	0,22633	0,22632
10	0,22504	0,22151	0,22396	0,22255	0,22237	0,22236	0,22235
36	0,22098	0,21769	0,21979	0,21902	0,21894	0,21888	0,21887
Quadratura $P_N T_N S_N$							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
1	0,27517	0,26344	0,28338	0,28949	0,29116	0,29160	0,29171
10	0,22494	0,22139	0,22357	0,22229	0,22215	0,22212	0,22211
15	0,22267	0,21933	0,22144	0,22037	0,22031	0,22027	0,22026
36	0,22060	0,21726	0,21949	0,21876	0,21855	0,21849	0,21847
55	0,22021	0,21683	0,21914	0,21844	0,21821	0,21815	0,21814
66	0,22011	0,21670	0,21904	0,21835	0,21811	0,21806	0,21804
105	0,21992	0,21647	0,21886	0,21817	0,21794	0,21788	0,21786
Quadratura $P_N T_N$							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
1	0,27517	0,26344	0,28338	0,28949	0,29116	0,29160	0,29171
9	0,22200	0,21883	0,22144	0,21995	0,21973	0,21979	0,21981
16	0,22072	0,21751	0,21953	0,21817	0,21820	0,21816	0,21815
36	0,22003	0,21667	0,21885	0,21836	0,21809	0,21800	0,21797
49	0,21991	0,21650	0,21879	0,21824	0,21791	0,21783	0,21781
64	0,21985	0,21640	0,21875	0,21813	0,21772	0,21777	0,21776
100	0,21978	0,21629	0,21868	0,21800	0,21778	0,21773	0,21771
Quadratura QR							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
2	0,21344	0,21157	0,20871	0,20623	0,20524	0,20495	0,20490
8	0,22024	0,21666	0,21836	0,21795	0,21776	0,21776	0,21775
18	0,21950	0,21594	0,21839	0,21731	0,21669	0,21695	0,21695
32	0,21967	0,21610	0,21846	0,21785	0,21764	0,21752	0,21749
50	0,21968	0,21611	0,21849	0,21785	0,21764	0,21761	0,21760
72	0,21968	0,21611	0,21849	0,21786	0,21766	0,21759	0,21757
98	0,21968	0,21611	0,21849	0,21785	0,21765	0,21760	0,21758

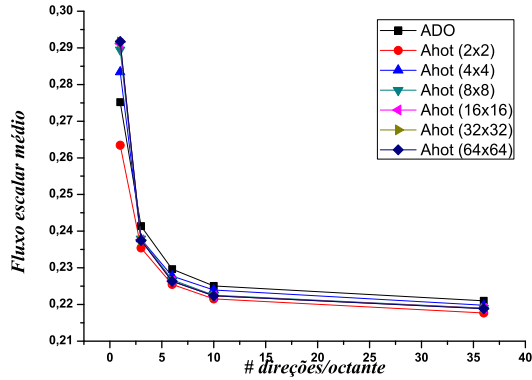
Pode-se observar de acordo com a Tabela 4.9 que os resultados numéricos obtidos através da utilização da quadratura simétrica de nível LQ_N mantiveram-se em $2(\pm 1)$ dígitos de concordância à medida que aumentou-se o número de direções por octante de 6 até 36, tanto através do uso do método ADO quanto através do uso do código AHOT.

Em relação aos resultados numéricos obtidos através da utilização das quadraturas $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$, assim como na região 1, observa-se uma concordância de $3(\pm 1)$ dígitos à medida que aumentou-se o número de direções por octante de 36 até 105 na quadratura $P_N T_N S_N$ e de 36 até 100 na quadratura $P_N T_N$ via método ADO e via código AHOT. Assim como nas Tabelas 4.7 e 4.8, observa-se que os resultados obtidos quando fixado 36 direções por octante, obteve-se uma concordância de $3(\pm 1)$ dígitos através do uso das quadraturas LQ_N , $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$, tanto via método ADO quanto via código AHOT.

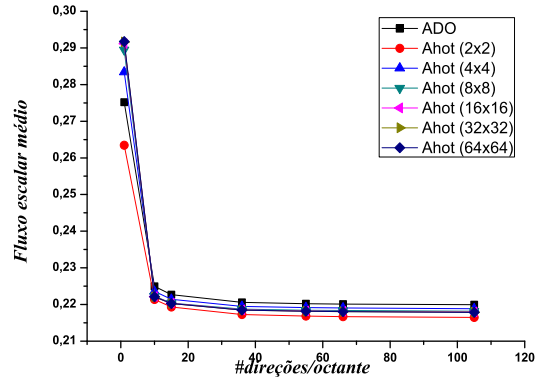
Novamente a quadratura QR mostrou-se eficiente, mantendo os 5 dígitos de concordância à medida que aumentou-se o número de direções por octante de 50 até 98 via método ADO e $4(\pm 1)$ dígitos de concordância via código AHOT.

Em comparação aos resultados obtidos entre as quadraturas QR , $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$ com 98, 105 e 100 direções por octante, respectivamente, observa-se uma concordância de $3(\pm 1)$ dígitos via método ADO e via código AHOT(16×16), AHOT(32×32) e AHOT(64×64).

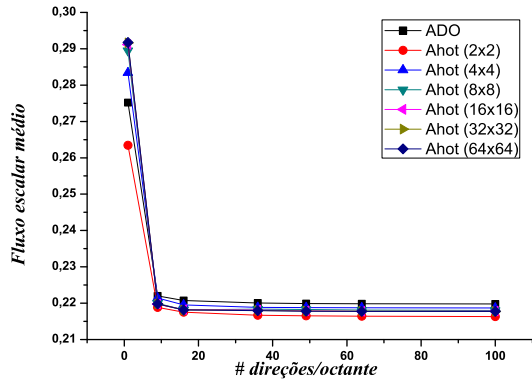
Pode-se observar graficamente o comportamento do fluxo escalar médio na região 4 através das quatro quadraturas estudadas para o problema em que $\sigma_s = 0,9$ na figura abaixo.



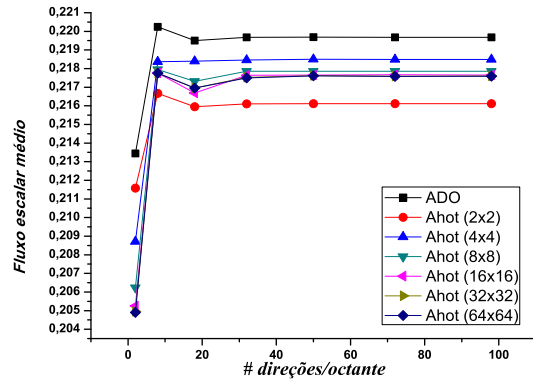
(a) Quadratura LQ_N



(b) Quadratura $P_N T_N S_N$



(c) Quadratura $P_N T_N$



(d) Quadratura QR

Figura 4.3: Fluxo escalar médio na região 4 para o *problema III* com $\sigma_s = 0,9$.

Alternativamente, gerou-se resultados para um meio mais absorvedor, com $\sigma_s = 0,3$, através dos quatro esquemas de quadratura, cujos resultados são mostrados nas tabelas a seguir.

Da análise dos resultados da Tabela 4.10, pode-se observar que, diferentemente dos resultados obtidos para a região 1 no caso em que $\sigma_s = 0,9$, aqui, os resultados numéricos através da utilização da quadratura de nível simétrica LQ_N mantiveram-se em apenas 1 dígito de concordância a medida que aumentou-se o número de direções por octante de 6 até 36, tanto através do uso do método ADO quanto através do uso do código AHOT.

Tabela 4.10: Fluxo escalar médio na região 1 para $\sigma_s = 0,3$.

Quadratura LQ_N							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
1	0,46278	0,45622	0,46769	0,47066	0,47141	0,47160	0,47165
3	0,49958	0,49205	0,49791	0,49980	0,50027	0,50039	0,50042
6	0,50496	0,49749	0,50285	0,50476	0,50523	0,50535	0,50538
10	0,50779	0,50044	0,50590	0,50774	0,50821	0,50834	0,50837
36	0,51037	0,50343	0,50894	0,51066	0,51113	0,51125	0,51128
Quadratura $P_N T_N S_N$							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
1	0,46278	0,45622	0,46769	0,47066	0,47141	0,47160	0,47165
10	0,50833	0,50100	0,50646	0,50826	0,50874	0,50886	0,50889
15	0,50949	0,50234	0,50783	0,50959	0,51009	0,51020	0,51023
36	0,51088	0,50409	0,50952	0,51123	0,51170	0,51183	0,51186
55	0,51127	0,50461	0,50998	0,51167	0,51214	0,51226	0,51229
66	0,51140	0,50479	0,51013	0,51181	0,51228	0,51240	0,51244
105	0,51165	0,50514	0,51043	0,51209	0,51255	0,51268	0,51271
Quadratura $P_N T_N$							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
1	0,46278	0,46622	0,46769	0,47066	0,47141	0,47160	0,47165
9	0,50835	0,50129	0,50659	0,50850	0,50900	0,50913	0,50916
16	0,51032	0,50348	0,50893	0,51057	0,51104	0,51116	0,51119
36	0,51147	0,50487	0,51022	0,51189	0,51233	0,51246	0,51249
49	0,51167	0,50515	0,51045	0,51210	0,51257	0,51269	0,51272
64	0,51179	0,50531	0,51059	0,51223	0,51269	0,51281	0,51284
100	0,51192	0,50550	0,51075	0,51238	0,51284	0,51296	0,51299
Quadratura QR							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
2	0,48938	0,48254	0,48577	0,48727	0,48764	0,48774	0,48777
8	0,51198	0,50547	0,51081	0,51227	0,51273	0,51285	0,51288
18	0,51225	0,50590	0,51112	0,51271	0,51316	0,51328	0,51331
32	0,51209	0,50578	0,51099	0,51261	0,51305	0,51317	0,51320
50	0,51209	0,50578	0,51099	0,51260	0,51305	0,51317	0,51320
72	0,51209	0,50579	0,51100	0,51261	0,51306	0,51317	0,51320
98	0,51209	0,50579	0,51100	0,51261	0,51306	0,51318	0,51321

O mesmo ocorre nos resultados numéricos através da utilização das quadraturas $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$, onde observou-se uma concordância de $2(\pm 1)$ dígitos em comparação aos resultados obtidos via método ADO e AHOT(64×64). Já através da quadratura QR , mantiveram-se os 5 dígitos de concordância à medida que aumentou-se o número de direções por octante de 32 até 98 via método ADO e 4 dígitos de concordância via código AHOT.

Pode-se ver graficamente o comportamento do fluxo escalar médio na região 1 através das quatro quadraturas estudadas para o problema em que $\sigma_s = 0,3$ na figura abaixo.

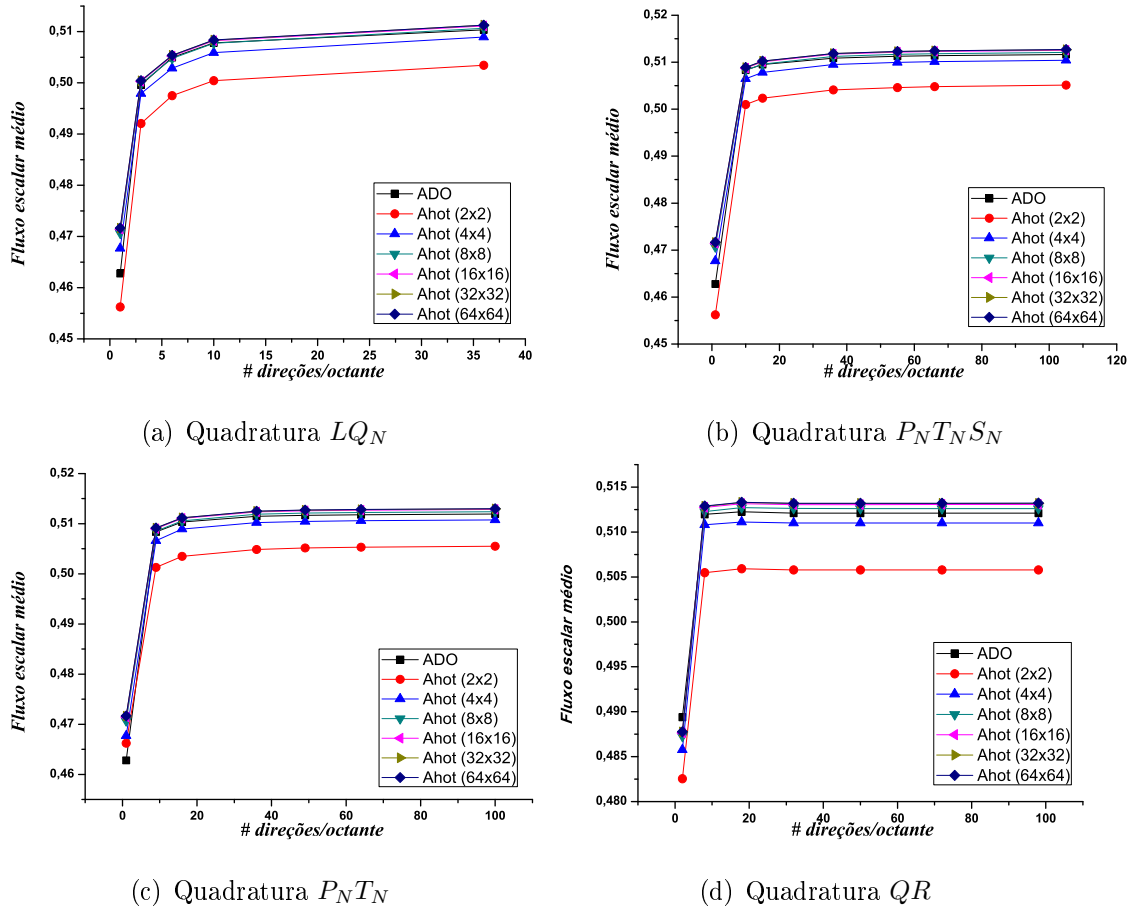


Figura 4.4: Fluxo escalar médio na região 1 para o *problema III* com $\sigma_s = 0,3$.

Tabela 4.11: Fluxo escalar médio nas regiões 2 e 3 para $\sigma_s = 0,3$.

Quadratura LQ_N							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
1	0,16852	0,16886	0,16072	0,15863	0,15810	0,15797	0,15793
3	0,17161	0,17173	0,16621	0,16440	0,16408	0,16402	0,16400
6	0,17077	0,17084	0,16542	0,16401	0,16380	0,16374	0,16372
10	0,17004	0,17004	0,16477	0,16377	0,16357	0,16351	0,16350
36	0,16910	0,16913	0,16438	0,16355	0,16327	0,16322	0,16321
Quadratura $P_N T_N S_N$							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
1	0,16852	0,16886	0,16072	0,15863	0,15810	0,15797	0,15793
10	0,16977	0,16983	0,16462	0,16364	0,16341	0,16335	0,16333
15	0,16936	0,16940	0,16440	0,16352	0,16326	0,16320	0,16319
36	0,16892	0,16895	0,16432	0,16343	0,16318	0,16312	0,16310
55	0,16884	0,16887	0,16434	0,16342	0,16317	0,16311	0,16310
66	0,16882	0,16886	0,16434	0,16341	0,16317	0,16311	0,16309
105	0,16879	0,16883	0,16435	0,16340	0,16316	0,16310	0,16309
Quadratura $P_N T_N$							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
1	0,16852	0,16886	0,16072	0,15863	0,15810	0,15797	0,15793
9	0,17001	0,17002	0,16479	0,16382	0,16365	0,16358	0,16356
16	0,16930	0,16932	0,16447	0,16388	0,16364	0,16358	0,16356
36	0,16886	0,16889	0,16437	0,16344	0,16321	0,16315	0,16314
49	0,16880	0,16883	0,16435	0,16341	0,16318	0,16312	0,16310
64	0,16878	0,16881	0,16434	0,16339	0,16316	0,16309	0,16307
100	0,16876	0,16880	0,16432	0,16337	0,16314	0,16308	0,16306
Quadratura QR							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
2	0,17357	0,17344	0,16872	0,16722	0,16712	0,16709	0,16707
8	0,16985	0,16988	0,16570	0,16493	0,16460	0,16452	0,16450
18	0,16872	0,16877	0,16428	0,16341	0,16323	0,16317	0,16316
32	0,16873	0,16877	0,16428	0,16333	0,16311	0,16306	0,16305
50	0,16876	0,16880	0,16431	0,16338	0,16314	0,16307	0,16306
72	0,16876	0,16880	0,16432	0,16338	0,16314	0,16308	0,16306
98	0,16876	0,16880	0,16431	0,16338	0,16314	0,16308	0,16306

Já na análise feita para os resultados da Tabela 4.11, faz-se praticamente as mesmas observações que no caso em que $\sigma_s = 0,9$, diferenciando-se na comparação dos resultados obtidos entre as quadraturas QR , $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$ com 98, 105 e 100 direções por octante, respectivamente, onde observou-se uma melhora nos resultados, onde mantiveram-se concordância dos 5 dígitos entre QR e $P_N T_N$ via método ADO e código AHOT. A análise entre as três quadraturas mantiveram-se em $4(\pm 1)$ dígitos de concordância via ambos os métodos.

Pode-se ver graficamente o comportamento do fluxo escalar médio nas regiões 2 e 3 através das quatro quadraturas estudadas para o problema em que $\sigma_s = 0,3$ na figura abaixo.

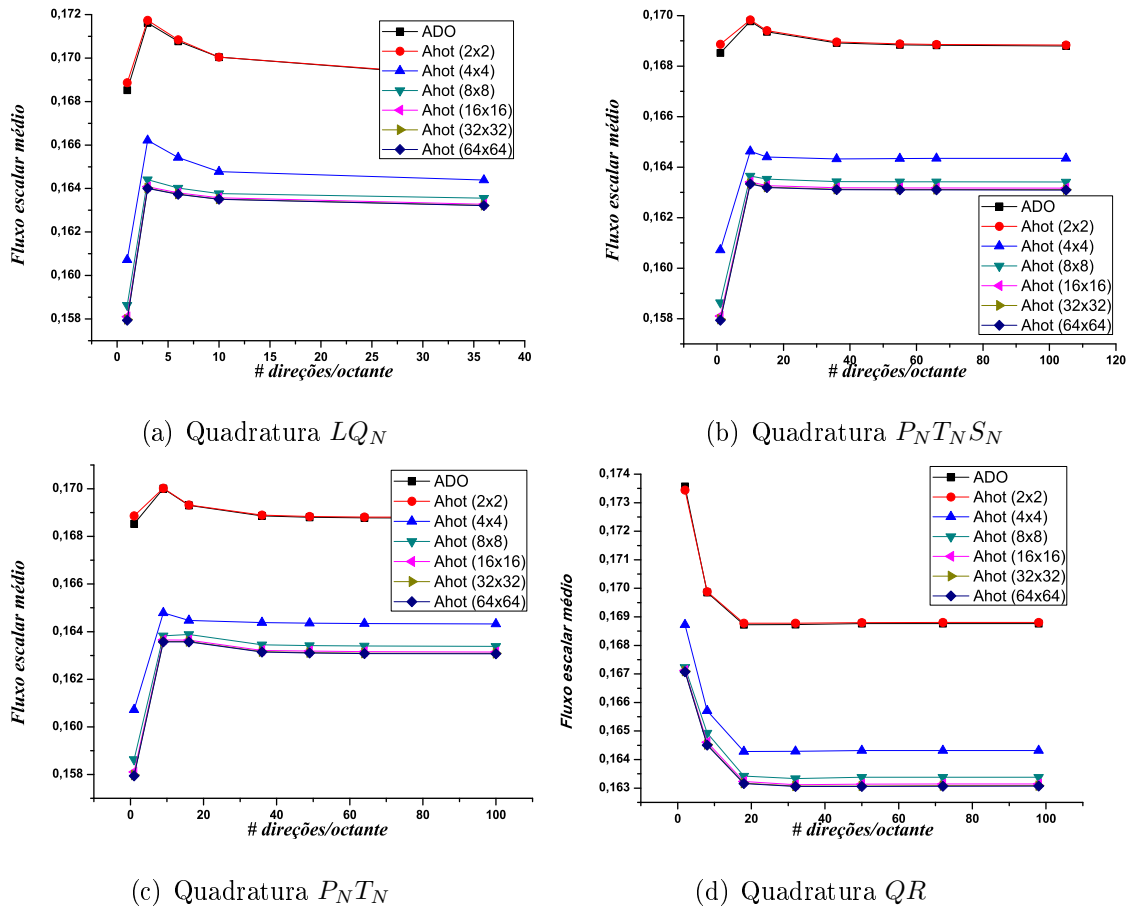


Figura 4.5: Fluxo escalar médio nas regiões 2 e 3 para o *problema III* com $\sigma_s = 0,3$.

Tabela 4.12: Fluxo escalar médio na região 4 para $\sigma_s = 0,3$.

Quadratura LQ_N							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
1	0,13119	0,12990	0,13899	0,14105	0,14154	0,14166	0,14169
3	0,10039	0,10029	0,10138	0,10136	0,10114	0,10103	0,10100
6	0,09159	0,09181	0,09322	0,09252	0,09225	0,09221	0,09221
10	0,08787	0,08819	0,08975	0,08876	0,08867	0,08867	0,08867
36	0,08432	0,08466	0,08583	0,08541	0,08544	0,08542	0,08541
Quadratura $P_N T_N S_N$							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
1	0,13119	0,12990	0,13899	0,14105	0,14154	0,14166	0,14169
10	0,08771	0,08802	0,08939	0,08850	0,08856	0,08845	0,08845
15	0,08583	0,08617	0,08743	0,08675	0,08678	0,08678	0,08677
36	0,08390	0,08420	0,08544	0,08506	0,08498	0,08496	0,08496
55	0,08347	0,08375	0,08503	0,08467	0,08458	0,08456	0,08456
66	0,08335	0,08362	0,08491	0,08455	0,08446	0,08444	0,08443
105	0,08312	0,08337	0,08469	0,08432	0,08423	0,08421	0,08420
Quadratura $P_N T_N$							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
1	0,13119	0,12990	0,13899	0,14105	0,14154	0,14166	0,14169
9	0,08552	0,08588	0,08758	0,08653	0,08642	0,08647	0,08649
16	0,08413	0,08446	0,08562	0,08471	0,08482	0,08482	0,08482
36	0,08330	0,08357	0,08474	0,08456	0,08444	0,08439	0,08438
49	0,08314	0,08340	0,08464	0,08439	0,08422	0,08418	0,08418
64	0,08304	0,08328	0,08458	0,08426	0,08410	0,08409	0,08409
100	0,08293	0,08316	0,08449	0,08109	0,08402	0,08400	0,08400
Quadratura QR							
# direções/ octante	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)
2	0,08344	0,08400	0,08269	0,08125	0,08060	0,08040	0,08037
8	0,08281	0,08304	0,08384	0,08370	0,08368	0,08370	0,08370
18	0,08264	0,08284	0,08424	0,08351	0,08334	0,08334	0,08334
32	0,08276	0,08295	0,08425	0,08391	0,08382	0,08376	0,08374
50	0,08275	0,08295	0,08427	0,08390	0,08381	0,08382	0,08381
72	0,08275	0,08295	0,08427	0,08390	0,08383	0,08380	0,08379
98	0,08275	0,08295	0,08427	0,08390	0,08382	0,08380	0,08380

Os resultados apresentados na Tabela 4.12 apresentam o mesmo comportamento dos resultados da Tabela 4.9, onde $\sigma_s = 0,9$. Desta forma, a análise dos resultados mantiveram-se a mesma, não sendo repetida aqui.

Pode-se ver graficamente o comportamento das soluções encontradas para o fluxo escalar médio na região 4 através das quatro quadraturas estudadas para o problema em que $\sigma_s = 0,3$ na figura abaixo.

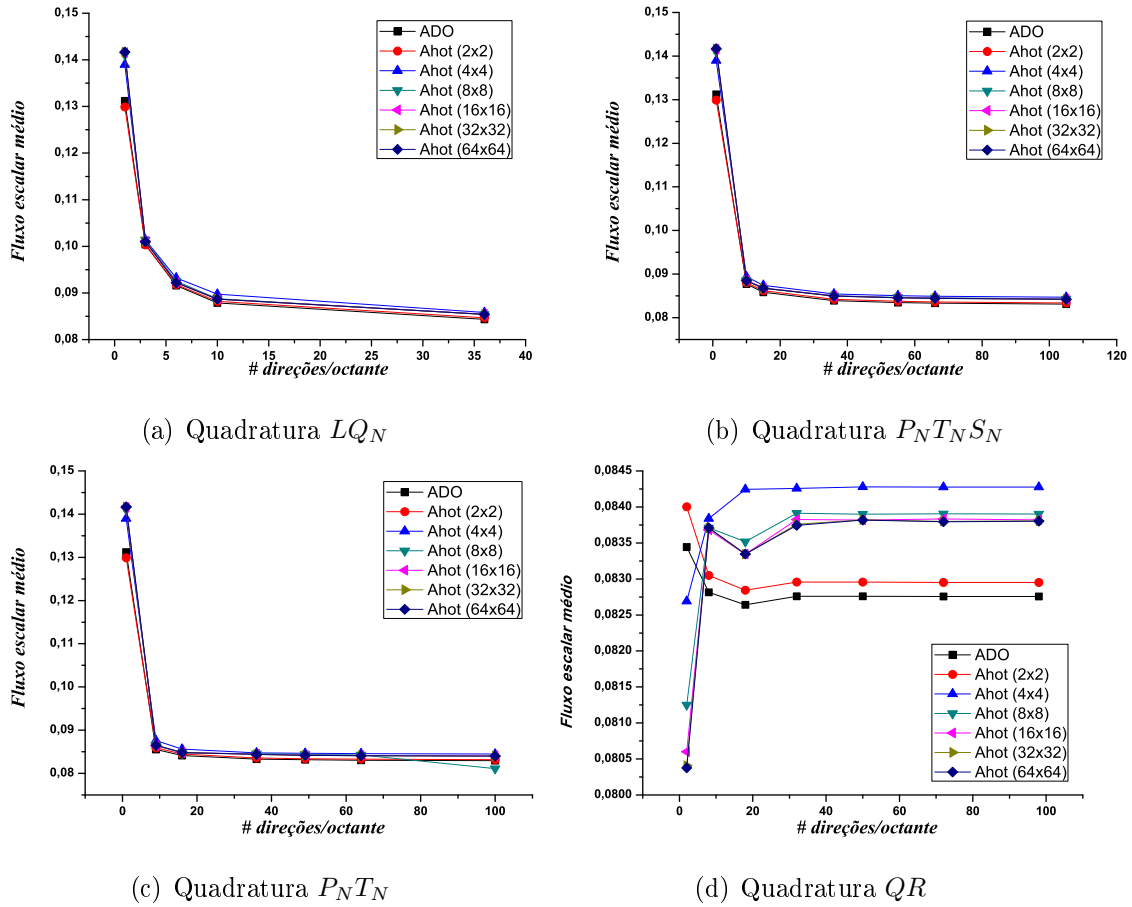


Figura 4.6: Fluxo escalar médio na região 4 para o *problema III* com $\sigma_s = 0,3$.

Com base nos resultados numéricos obtidos para o fluxo escalar médio apresentados nas Tabelas 4.7 - 4.12, observa-se que a quadratura QR mostrou-se mais eficiente em relação as outras estudadas, no sentido de obtenção de dígitos de

concordância entre os resultados numéricos, a medida que aumentou-se a ordem da quadratura. Ainda, observações aos resultados obtidos pelos dois métodos, mostram que o método ADO apresenta-se mais preciso em relação a AHOT(64×64), do que AHOT(2×2) e AHOT(4×4), nos casos em que o fluxo escalar é analisado na região 1, demonstrando a eficácia do método ADO.

Objetivando-se uma análise comparativa mais detalhada entre as diferentes quadraturas e a fim de determinar uma solução de referência, para validação e comparação com resultados numéricos via método ADO, faz-se no próximo capítulo, uma análise assintótica espacial e angular dos resultados numéricos obtidos via código AHOT.

5 COMPORTAMENTO ASSINTÓTICO DE ERRO

Com objetivo de determinar uma solução numérica de referência para eventuais comparações de resultados, neste capítulo faz-se uma análise assintótica espacial e angular das soluções numéricas para o fluxo escalar de nêutrons, obtidas via método AHOT para o *problema III*, no capítulo anterior.

Por fim, faz-se um breve estudo sobre a influência dos efeitos raio na determinação da solução da equação de transporte e a redução destes através do uso das quadraturas apresentadas neste trabalho.

5.1 Análise assintótica espacial

Nesta seção, deseja-se verificar se as soluções numéricas apresentam um comportamento assintótico, e assim, determinar uma solução de referência, com erro mínimo de discretização espacial, para que, posteriormente possa ser comparado com as soluções obtidas via método analítico ADO. Ainda, deseja-se verificar, se possível, através da análise assintótica dos dados, se os esquemas de quadraturas numéricas estudados são consistentes com a integração de altas ordens polinomiais dos cossenos diretores Ω_x e Ω_y .

Neste sentido, a partir dos resultados numéricos obtidos via código AHOT, sobre uma malha de nodos igualmente espaçados, de tamanho h , calcula-se um valor estimado para a solução exata do problema, com erro mínimo de discretização espacial via técnica de extrapolação de Richardson [87]. Assume-se que $\phi(h, ND)$ é uma aproximação numérica de ordem p para uma solução extrapolada $\phi_{ref}(ND)$, onde ND representa o número de direções discretas. Desta forma, expande-se a

aproximação numérica como

$$\phi(h, ND) = \phi_{ref}(ND) + \alpha_p(ND)h^p + O(h^{p+1}). \quad (5.1)$$

Considera-se os resultados para três diferentes malhas igualmente espaçadas de tamanhos h , rh e r^2h , onde r é a razão de refinamento, de maneira que

$$\phi(h, ND) = \phi_{ref}(ND) + h^p \alpha_p(ND) + O(h^{p+1}), \quad (5.2)$$

$$\phi(rh, ND) = \phi_{ref}(ND) + (rh)^p \alpha_p(ND) + O(h^{p+1}) \quad (5.3)$$

e

$$\phi(r^2h, ND) = \phi_{ref}(ND) + (r^2h)^p \alpha_p(ND) + O(h^{p+1}). \quad (5.4)$$

Ignora-se por enquanto, os termos de ordem superior, e reescreve-se as equações acima como

$$h^p \alpha_p(ND) = \phi(h, ND) - \phi_{ref}(ND), \quad (5.5)$$

$$(rh)^p \alpha_p(ND) = \phi(rh, ND) - \phi_{ref}(ND) \quad (5.6)$$

e

$$(r^2h)^p \alpha_p(ND) = \phi(r^2h, ND) - \phi_{ref}(ND). \quad (5.7)$$

Subtrai-se uma equação da outra, tal que

$$\begin{aligned} \phi(rh, ND) - \phi(h, ND) &= \alpha_p(ND)((rh)^p - h^p) \\ \phi(r^2h, ND) - \phi(rh, ND) &= \alpha_p(ND)((r^2h)^p - (rh)^p) \end{aligned} \quad (5.8)$$

e então, divide-se as equações resultantes para obter

$$\frac{\phi(rh, ND) - \phi(h, ND)}{\phi(r^2h, ND) - \phi(rh, ND)} = \left(\frac{(rh)^p - h^p}{(r^2h)^p - (rh)^p} \right), \quad (5.9)$$

mas

$$\begin{aligned} \left(\frac{(rh)^p - h^p}{(r^2h)^p - (rh)^p} \right) &\rightarrow \frac{h^p(r^p - 1)}{r^p h^p (r^p - 1)} = \frac{1}{r^p} \\ \frac{\phi(r^2h, ND) - \phi(rh, ND)}{\phi(rh, ND) - \phi(h, ND)} &= r^p, \end{aligned} \quad (5.10)$$

logo obtém-se a ordem de convergência espacial como

$$p = \frac{\log \left(\frac{\phi(r^2h, ND) - \phi(rh, ND)}{\phi(rh, ND) - \phi(h, ND)} \right)}{\log r}. \quad (5.11)$$

Uma vez determinada a ordem de aproximação p , encontra-se a solução $\phi_{ref}(ND)$ através da divisão de duas soluções de refinamento r . Neste caso, utiliza-se, por exemplo, as Eqs. (5.5) e (5.6) tal que

$$(r)^p = \frac{\phi(h, ND) - \phi_{ref}(ND)}{\phi(rh, ND) - \phi_{ref}(ND)} \quad (5.12)$$

e então, obtém-se a solução $\phi_{ref}(ND)$ como

$$\phi_{ref}(ND) = \left(\frac{r^p \phi(rh, ND) - \phi(h, ND)}{r^p - 1} \right). \quad (5.13)$$

O erro absoluto entre as soluções $\phi_{ref}(ND)$ e as soluções numéricas $\phi_{num}(ND)$ obtidas via código AHOT ou método ADO, é definido como

$$EA = |\phi_{ref}(ND) - \phi_{num}(ND)|. \quad (5.14)$$

Neste sentido, fixou-se então, um número de direções por octante (ND), para cada esquema de quadratura numérica, e determinou-se a ordem de convergência p e a solução $\phi_{ref}(ND)$ para a região 1 do problema em estudo. Nos casos analisados, considerou-se a seção de choque de espalhamento macroscópica $\sigma_s = 0,9$ e $\sigma_s = 0,3$. A partir da análise feita para a ordem de convergência p , observou-se que em todos os casos, $p \rightarrow -2$.

Tabela 5.1: Ordem de convergência p e solução $\phi_{ref}(ND)$ para a região 1 com $\sigma_s = 0,9$.

Quadratura LQ_N									
# direções/ octante (ND)	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)	p	$\phi_{ref}(ND)$
1	0,80034	0,75422	0,79585	0,80814	0,81140	0,81224	0,81245	-1,98	0,81252
3	0,88354	0,82756	0,85889	0,86811	0,87051	0,87111	0,87127	-1,99	0,87132
6	0,89235	0,83620	0,86594	0,87508	0,87751	0,87813	0,87828	-1,99	0,87834
10	0,89665	0,84099	0,87043	0,87961	0,88209	0,88273	0,88289	-2,00	0,88294
36	0,89903	0,84573	0,87419	0,88327	0,88576	0,88639	0,88655	-2,00	0,88660
Quadratura $P_N T_N S_N$									
# direções/ octante (ND)	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)	p	$\phi_{ref}(ND)$
1	0,80034	0,75422	0,79585	0,80814	0,81140	0,81224	0,81245	-1,98	0,81252
10	0,89749	0,84194	0,87135	0,88052	0,88301	0,88364	0,88380	-1,99	0,88385
15	0,89854	0,84395	0,87293	0,88208	0,88457	0,88521	0,88537	-1,99	0,88542
36	0,89935	0,84690	0,87497	0,88397	0,88643	0,88707	0,88723	-1,99	0,88728
55	0,89952	0,84791	0,87559	0,88448	0,88694	0,88758	0,88774	-1,99	0,88775
66	0,89957	0,84827	0,87580	0,88465	0,88711	0,88774	0,88790	-1,98	0,88796
105	0,89967	0,84898	0,87624	0,88498	0,88742	0,88806	0,88822	-1,98	0,88827
Quadratura $P_N T_N$									
# direções/ octante (ND)	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)	p	$\phi_{ref}(ND)$
1	0,80034	0,75422	0,79585	0,80814	0,81140	0,81224	0,81245	-1,98	0,81252
9	0,89603	0,84219	0,87037	0,87945	0,88197	0,88262	0,88279	-1,99	0,88284
16	0,89869	0,84600	0,87401	0,88287	0,88537	0,88600	0,88617	-1,97	0,88622
36	0,89970	0,84847	0,87597	0,88475	0,88715	0,88779	0,88795	-1,97	0,88800
49	0,89980	0,84899	0,87631	0,88501	0,88743	0,88806	0,88822	-1,97	0,88828
64	0,89984	0,84933	0,87652	0,88516	0,88757	0,88821	0,88837	-1,97	0,88842
100	0,89987	0,84972	0,87677	0,88534	0,88775	0,88838	0,88854	-1,97	0,88860
Quadratura QR									
# direções/ octante (ND)	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)	p	$\phi_{ref}(ND)$
2	0,85297	0,80267	0,82399	0,83085	0,83270	0,83318	0,83330	-1,98	0,83334
8	0,90190	0,85097	0,87859	0,88712	0,88952	0,89015	0,89031	-1,97	0,89036
18	0,90032	0,85052	0,87752	0,88598	0,88837	0,88900	0,88917	-1,95	0,88922
32	0,89984	0,85027	0,87716	0,88563	0,88798	0,88860	0,88876	-1,95	0,88881
50	0,89985	0,85032	0,87718	0,88563	0,88798	0,88861	0,88877	-1,96	0,88883
72	0,89986	0,85033	0,87719	0,88565	0,88800	0,88862	0,88878	-1,96	0,88883
98	0,89986	0,85033	0,87720	0,88565	0,88800	0,88862	0,88878	-1,96	0,88884

A ordem de convergência p e a solução $\phi_{ref}(ND)$ obtidos, respectivamente, via Eqs.(5.11) e (5.13), através das soluções AHOT(16×16), AHOT(32×32) e AHOT(64×64), para as quadraturas numéricas estudadas, são mostradas nas Tabelas 5.1 e 5.2.

Observa-se na Tabela 5.1 que, as soluções $\phi_{ref}(ND)$ para as diferentes quadraturas numéricas estudadas neste trabalho, apresentam convergência numérica em relação ao número de direções por octante, permanecendo os 3 dígitos de concordância entre os resultados via quadratura $P_N T_N S_N$, $P_N T_N$ e QR , quando o número de direções por octante está em torno de 100 direções por octante, como pode ser visto na figura abaixo.

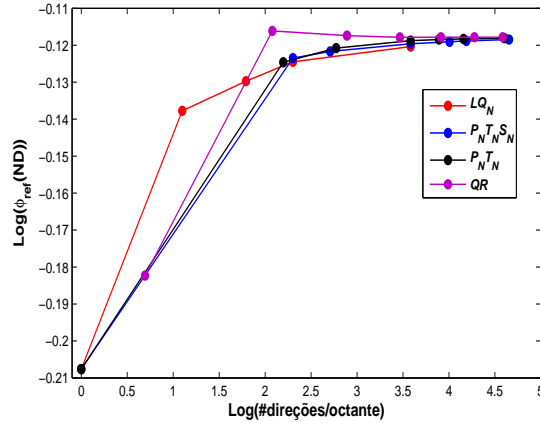


Figura 5.1: Convergência de $\phi_{ref}(ND)$ em relação ao número de direções por octante para a região 1 com $\sigma_s = 0,9$.

Na tabela abaixo apresenta-se a ordem de convergência p e a solução $\phi_{ref}(ND)$ analisadas na região 1, considerando-se a seção de choque de espalhamento $\sigma_s = 0,3$.

Tabela 5.2: Ordem de convergência p e solução $\phi_{ref}(ND)$ para a região 1 com $\sigma_s = 0,3$.

Quadratura LQ_N									
# direções/ octante (ND)	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)	p	$\phi_{ref}(ND)$
1	0,46278	0,45622	0,46769	0,47066	0,47141	0,47160	0,47165	-1,98	0,47167
3	0,49958	0,49205	0,49791	0,49980	0,50027	0,50039	0,50042	-1,93	0,50043
6	0,50496	0,49749	0,50285	0,50476	0,50523	0,50535	0,50538	-2,01	0,50539
10	0,50779	0,50044	0,50590	0,50774	0,50821	0,50834	0,50837	-2,02	0,50838
36	0,51037	0,50343	0,50894	0,51066	0,51113	0,51125	0,51128	-1,97	0,51129
Quadratura $P_N T_N S_N$									
# direções/ octante (ND)	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)	p	$\phi_{ref}(ND)$
1	0,46278	0,45622	0,46769	0,47066	0,47141	0,47160	0,47165	-1,98	0,47167
10	0,50833	0,50100	0,50646	0,50826	0,50874	0,50886	0,50889	-1,95	0,50890
15	0,50949	0,50234	0,50783	0,50959	0,51009	0,51020	0,51023	-1,74	0,51024
36	0,51088	0,50409	0,50952	0,51123	0,51170	0,51183	0,51186	-1,98	0,51187
55	0,51127	0,50461	0,50998	0,51167	0,51214	0,51226	0,51229	-1,98	0,51230
66	0,51140	0,50479	0,51013	0,51181	0,51228	0,51240	0,51244	-1,98	0,51245
105	0,51165	0,50514	0,51043	0,51209	0,51255	0,51268	0,51271	-1,98	0,51272
Quadratura $P_N T_N$									
# direções/ octante (ND)	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)	p	$\phi_{ref}(ND)$
1	0,46278	0,46622	0,46769	0,47066	0,47141	0,47160	0,47165	-1,98	0,47167
9	0,50835	0,50129	0,50659	0,50850	0,50900	0,50913	0,50916	-1,99	0,50917
16	0,51032	0,50348	0,50893	0,51057	0,51104	0,51116	0,51119	-2,40	0,51119
36	0,51147	0,50487	0,51022	0,51189	0,51233	0,51246	0,51249	-1,98	0,51250
49	0,51167	0,50515	0,51045	0,51210	0,51257	0,51269	0,51272	-1,93	0,51273
64	0,51179	0,50531	0,51059	0,51223	0,51269	0,51281	0,51284	-1,98	0,51285
100	0,51192	0,50550	0,51075	0,51238	0,51284	0,51296	0,51299	-1,95	0,51300
Quadratura QR									
# direções/ octante (ND)	ADO	AHOT (2 × 2)	AHOT (4 × 4)	AHOT (8 × 8)	AHOT (16 × 16)	AHOT (32 × 32)	AHOT (64 × 64)	p	$\phi_{ref}(ND)$
2	0,48938	0,48254	0,48577	0,48727	0,48764	0,48774	0,48777	-1,98	0,48778
8	0,51198	0,50547	0,51081	0,51227	0,51273	0,51285	0,51288	-1,98	0,51285
18	0,51225	0,50590	0,51112	0,51271	0,51316	0,51328	0,51331	-1,95	0,51332
32	0,51209	0,50578	0,51099	0,51261	0,51305	0,51317	0,51320	-1,94	0,51321
50	0,51209	0,50578	0,51099	0,51260	0,51305	0,51317	0,51320	-1,94	0,51321
72	0,51209	0,50579	0,51100	0,51261	0,51306	0,51317	0,51320	-1,99	0,51321
98	0,51209	0,50579	0,51100	0,51261	0,51306	0,51318	0,51321	-1,92	0,51322

Novamente as soluções $\phi_{ref}(ND)$ para as diferentes quadraturas numéricas, apresentaram convergência em relação ao número de direções por octante, permanecendo $3(\pm 1)$ dígitos de concordância entre os resultados via quadratura $P_N T_N S_N$, $P_N T_N$ e QR , quando o número de direções por octante está em torno de 100 direções por octante. Pode-se observar graficamente esse comportamento na figura abaixo.

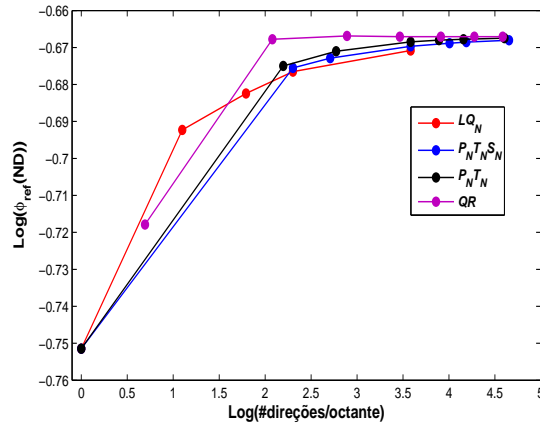


Figura 5.2: Convergência de $\phi_{ref}(ND)$ em relação ao número de direções por octante para a região 1 com $\sigma_s = 0,3$

Com relação as regiões 2, 3 e 4 do problema em estudo, observou-se que, apesar de as soluções numéricas para o fluxo escalar médio nas regiões apresentarem convergência, a medida que refina-se a malha espacial via código AHOT, as mesmas não apresentam um comportamento assintótico, impossibilitando a determinação da ordem de convergência espacial p e a solução $\phi_{ref}(ND)$, como pode ser visto, por exemplo, nas tabelas 5.3 e 5.4. Tal comportamento se repete nos outros casos de análise.

Tabela 5.3: Ordem de convergência p nas regiões 2 e 3, com seção de choque de espalhamento $\sigma_s = 0,9$, via código AHOT.

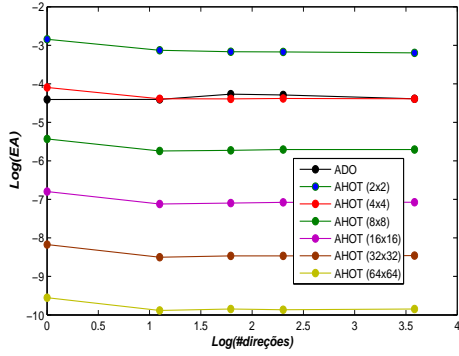
i	AHOT	Quadratura LQ_N 36 direções/octante			Quadratura $P_N T_N S_N$ 36 direções/octante		
		ϕ_i	$\left(\frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}\right)$	p	ϕ_i	$\left(\frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}\right)$	p
1	2×2	0,37333			0,37331		
2	4×4	0,37324			0,37327		
3	8×8	0,37556	-3,63	1,86	0,37352	-7,20	2,84
4	16×16	0,37358	0,06	-4,00	0,37356	0,16	-2,61
5	32×32	0,37359	0,45	-1,15	0,37357	0,23	-2,15
6	64×64	0,37359	0,22	-2,16	0,37357	0,22	-2,17
i	AHOT	Quadratura $P_N T_N$ 36 direções/octante			Quadratura QR 32 direções/octante		
		ϕ_i	$\left(\frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}\right)$	p	ϕ_i	$\left(\frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}\right)$	p
1	2×2	0,37355			0,37379		
2	4×4	0,37352			0,37363		
3	8×8	0,37373	-5,76	2,52	0,37383	-1,24	0,31
4	16×16	0,37378	0,25	-1,97	0,37394	0,52	-0,93
5	32×32	0,37380	0,31	-1,66	0,37395	0,11	-3,15
6	64×64	0,37381	0,35	-1,50	0,37396	0,33	-1,58

Procurou-se entender o motivo que impede a obtenção da ordem de convergência p e conseqüentemente a solução $\phi_{ref}(ND)$ nas regiões 2, 3 e 4. Neste sentido, para o entendimento deste fenômeno, recorreu-se a interpretação física do problema, do qual concluiu-se que a incapacidade de determinar a ordem de convergência do método para essas regiões, pode ser causado pela influência do efeito raio na solução da equação de transporte, tópico que será estudado na última seção deste capítulo.

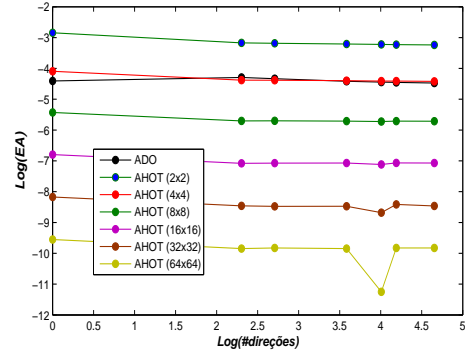
Tabela 5.4: Ordem de convergência p para a região 4, com seção de choque de espalhamento $\sigma_s = 0,9$, via código AHOT.

i	AHOT	Quadratura LQ_N 36 direções/octante			Quadratura $P_N T_N S_N$ 36 direções/octante		
		ϕ_i	$\left(\frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}\right)$	p	ϕ_i	$\left(\frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}\right)$	p
1	2×2	0,21769			0,21726		
2	4×4	0,21979			0,21949		
3	8×8	0,21902	-3,63	-1,44	0,21876	-0,32	-1,61
4	16×16	0,21894	0,10	-3,26	0,21855	0,28	-1,79
5	32×32	0,21888	0,75	-0,41	0,21849	0,28	-1,80
6	64×64	0,21887	0,16	-2,58	0,21847	0,33	-1,58
i	AHOT	Quadratura $P_N T_N$ 36 direções/octante			Quadratura QR 32 direções/octante		
		ϕ_i	$\left(\frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}\right)$	p	ϕ_i	$\left(\frac{\phi_i - \phi_{i-1}}{\phi_{i-1} - \phi_{i-2}}\right)$	p
1	2×2	0,21667			0,21610		
2	4×4	0,21885			0,21846		
3	8×8	0,21836	-0,22	-2,15	0,21785	-0,25	-1,95
4	16×16	0,21809	0,55	-0,85	0,21764	0,34	-1,53
5	32×32	0,21800	0,33	-1,58	0,21752	0,57	-0,80
6	64×64	0,21797	0,33	-1,55	0,21749	0,25	-2,00

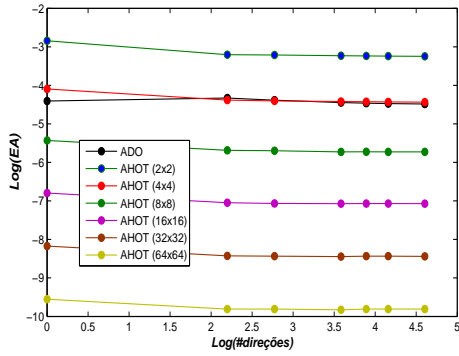
Para analisar a performance do método analítico ADO em relação ao método de varredura numérica desenvolvido no código AHOT, na determinação do fluxo escalar médio na região 1 do problema teste, para os diferentes esquemas de quadratura numéricos estudados, apresenta-se nas figuras abaixo, os gráfico do erro absoluto entre os resultados obtidos para a solução $\phi_{ref}(ND)$ e os resultados obtidos via método ADO e código AHOT.



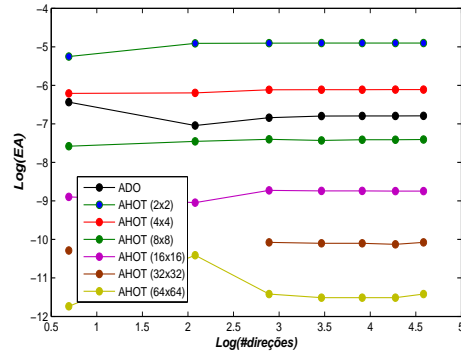
(a) Simétrica de nível LQ_N



(b) $P_N T_N S_N$ triangular



(c) $P_N T_N$ quadrangular

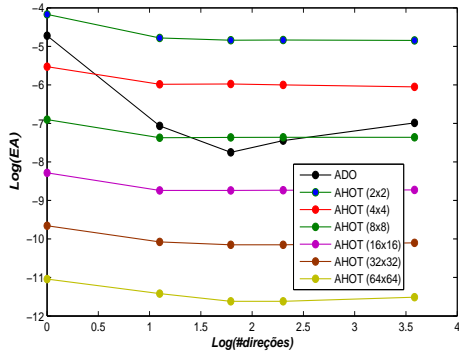


(d) *Quadruple range* QR

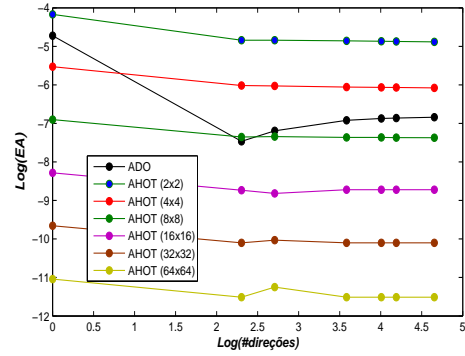
Figura 5.3: Erro absoluto em relação ao número de direções por octante na região 1 para $\sigma_s = 0, 9$.

Com base nos resultados apresentados na Tabela 5.1 e na Figura 5.3, pode-se observar que as soluções obtidas para o fluxo escalar médio via método ADO para as quatro quadraturas numéricas estudadas, apresentam resultados numéricos mais próximos da solução $\phi_{ref}(ND)$ quando comparado a solução obtida via código AHOT de malha 2×2 . Ainda, os resultados numéricos obtidos via método ADO apresentam $2(\pm 1)$ dígitos de concordância em relação a solução $\phi_{ref}(ND)$, enquanto que o código AHOT(2×2) apresenta apenas 1 dígito de concordância.

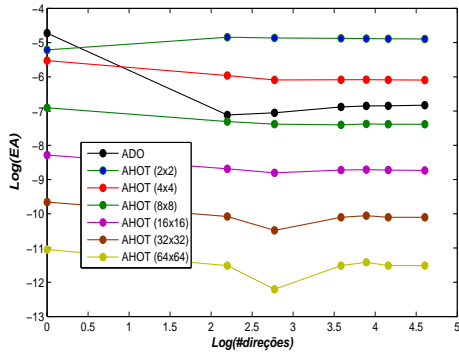
Ao utilizar a quadratura QR , via método ADO, os resultados para o fluxo escalar médio apresentam erro absoluto menor que o apresentado via código AHOT de malha 2×2 e 4×4 .



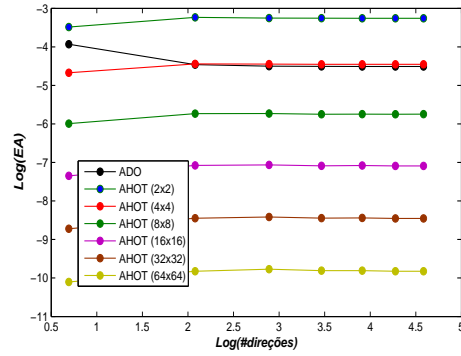
(a) Simétrica de nível LQ_N



(b) $P_N T_N S_N$ triangular



(c) $P_N T_N$ quadrangular



(d) *Quadruple range* QR

Figura 5.4: Erro absoluto em relação ao número de direções por octante na região 1 para $\sigma_s = 0, 3$.

A partir da análise dos resultados na Tabela 5.2 e na Figura 5.4, pode-se observar que os resultados numéricos obtidos para o fluxo escalar médio via método ADO para as quatro quadraturas numéricas estudadas, apresentam-se mais próximos da solução de referência $\phi_{ref}(ND)$ quando comparado as soluções obtidas via código AHOT de malha 2×2 e 4×4 .

Ainda, os resultados obtidos via método ADO apresentam numericamente $2(\pm 1)$ dígitos de concordância em relação a solução $\phi_{ref}(ND)$, enquanto que o código AHOT(2×2) apresenta apenas 1 dígito. O que indica um resultado importante na utilização da formulação ADO.

Agora, com base nos resultados obtidos para a solução $\phi_{ref}(ND)$ para ambos os casos $\sigma_s = 0,9$ e $\sigma_s = 0,3$, através das quadraturas numéricas $P_N T_N S_N$, $P_N T_N$ e QR , observa-se uma concordância de $3(\pm 1)$ dígitos entre os resultados no caso em que $\sigma_s = 0,9$ e $4(\pm 1)$ dígitos de concordância no caso em que $\sigma_s = 0,3$. Não é possível dizer através do estudo feito até aqui, qual quadratura numérica apresenta o melhor desempenho na determinação de uma solução numérica para o fluxo escalar de nêutrons para o problema de interesse. Na seção seguinte, será feita uma análise assintótica angular dos resultados obtidos para a solução $\phi_{ref}(ND)$ para diferentes ordens de quadratura numérica.

5.2 Análise assintótica angular

Nesta seção, busca-se determinar a ordem de convergência das soluções numéricas para o fluxo escalar médio nas regiões do *problema III*, que envolvem o uso de diferentes tamanhos de discretização angular h_a . A partir das soluções numéricas $\phi_{ref}(ND)$, obtidas da extrapolação espacial, determina-se as soluções numéricas extrapoladas ϕ_{ref} para diferentes tamanhos de discretização angular h_a , agora, com erro de discretização angular mínimo. Novamente utiliza-se a técnica de extrapolação de Richardson [87] para determinar um valor estimado para a solução exata ϕ_{ref} . Como os tamanhos de discretização angular h_a , variam com a ordem de quadratura, e este com as diferentes quadraturas, de maneira que h_a não é igualmente espaçado, assume-se que o tamanho de discretização angular é dado

por

$$h_a = \frac{1}{\sqrt{ND}}, \quad (5.15)$$

onde ND representa o número de direções para uma dada ordem de quadratura. Note que as relações entre o número de direções e a ordem de cada quadratura podem ser encontradas na Tabela (2.7).

Para aplicar a técnica de extrapolação de Richardson, assume-se que $\phi(ND) = \phi(h_a)$ é uma aproximação numérica, já extrapolada espacialmente, de ordem p , para uma solução exata ϕ_{ref} . A aproximação numérica $\phi(h_a)$ pode ser expandida como

$$\phi(h_a) = \phi_{ref} + \alpha_p h_a^p + O(h_a^{p+1}). \quad (5.16)$$

Para determinar a solução numérica angularmente extrapolada, considera-se os resultados para três tamanhos de discretizações h_{a1} , h_{a2} e h_{a3} , de maneira que

$$\phi(h_{a1}) = \phi_{ref} + h_{a1}^p \alpha_p + O(h_{a1}^{p+1}), \quad (5.17)$$

$$\phi(h_{a2}) = \phi_{ref} + h_{a2}^p \alpha_p + O(h_{a2}^{p+1}) \quad (5.18)$$

e

$$\phi(h_{a3}) = \phi_{ref} + h_{a3}^p \alpha_p + O(h_{a3}^{p+1}). \quad (5.19)$$

Ignora-se os termos de ordem superior das Eqs. (5.17)-(5.19), e subtrai-se a Eq. (5.17) da Eq. (5.18) e a Eq.(5.18) da Eq.(5.19), de forma a obter

$$\begin{aligned} \phi(h_{a2}) - \phi(h_{a1}) &= \alpha_p (h_{a2}^p - h_{a1}^p) \\ \phi(h_{a3}) - \phi(h_{a2}) &= \alpha_p (h_{a3}^p - h_{a2}^p). \end{aligned} \quad (5.20)$$

Divide-se uma equação da outra para resultar em

$$\frac{\phi(h_{a2}) - \phi(h_{a1})}{\phi(h_{a3}) - \phi(h_{a2})} = \left(\frac{h_{a2}^p - h_{a1}^p}{h_{a3}^p - h_{a2}^p} \right). \quad (5.21)$$

Define-se $q^p = \frac{h_{a2}}{h_{a1}}$ e $Q^p = \frac{h_{a3}}{h_{a2}}$, e então, reescreve-se a equação acima

como

$$\frac{\phi(h_{a2}) - \phi(h_{a1})}{\phi(h_{a3}) - \phi(h_{a2})} = \left(\frac{q^p - 1}{Q^p - 1} \right) \frac{1}{q^p}. \quad (5.22)$$

Obtém-se então uma equação não-linear em termos da ordem de convergência p , como

$$\frac{1}{\Phi} - \left(\frac{q^p - 1}{Q^p - 1} \right) \frac{1}{q^p} = 0 \quad (5.23)$$

onde

$$\Phi = \frac{\phi(h_{a3}) - \phi(h_{a2})}{\phi(h_{a2}) - \phi(h_{a1})}. \quad (5.24)$$

Para determinar-se o valor desta ordem de convergência p , usa-se o método iterativo de Newton-Raphson com tolerância de 10^{-8} . Uma vez encontrada a ordem p , determina-se a solução numérica extrapolada ϕ_{ref} através da equação abaixo

$$\phi_{ref} = \left(\frac{q^p \phi(h_{a2}) - \phi(h_{a1})}{q^p - 1} \right). \quad (5.25)$$

O erro absoluto entre as soluções ϕ_{ref} e as soluções $\phi_{ref}(ND)$ é definido como

$$EA = |\phi_{ref} - \phi_{ref}(ND)|. \quad (5.26)$$

Apresenta-se na tabela abaixo, os resultados obtidos para a ordem de convergência p via Eq.(5.23) e a solução ϕ_{ref} via Eq.(5.25), para a região 1 do problema em estudo, no caso em que $\sigma_s = 0.9$.

Tabela 5.5: Soluções numéricas extrapoladas ϕ_{ref} para a região 1 com $\sigma_s = 0,9$.

# direções/ octante (ND)	LQ_N $\phi_{ref}(ND)$	p	ϕ_{ref}	# direções/ octante (ND)	$P_N T_N S_N$ $\phi_{ref}(ND)$	p	ϕ_{ref}
1	0,81252			1	0,81252		
3	0,87132			10	0,88385		
6	0,87834	3,51	0,88128	15	0,88542	2,57	0,88771
10	0,88294	0,38	0,92714	36	0,88728	1,94	0,88866
36	0,88660	2,80	0,88733	55	0,88775	1,94	0,88867
				65	0,88796	-0,21	0,87727
				105	0,88827	3,34	0,88854
# direções/ octante (ND)	$P_N T_N$ $\phi_{ref}(ND)$	p	ϕ_{ref}	# direções/ octante (ND)	QR $\phi_{ref}(ND)$	p	ϕ_{ref}
1	0,81252			2	0,83334		
9	0,88284			8	0,89036		
16	0,88622	2,14	0,89017	18	0,88922		
36	0,88800	2,92	0,88878	32	0,88881	1,94	0,88827
49	0,88828	3,01	0,88174	50	0,88883		
64	0,88842	3,45	0,88867	72	0,88883	0,01	0,88154
100	0,88860	1,91	0,88892	98	0,88884	5,46	0,88884

Note da Tabela (5.5), que as soluções ϕ_{ref} não apresentam um comportamento assintótico, impossibilitando a determinação de uma ordem de convergência assintótica para o método, e uma solução de referência para se comparar os resultados obtidos via outros métodos de resolução.

Na Tabela (5.6), apresenta-se as soluções extrapoladas ϕ_{ref} e a ordem de convergência p para a região 1 do problema em estudo com seção de choque de espalhamento macroscópica $\sigma_s = 0,3$, através do uso das diferentes quadraturas numéricas estudadas. Da análise feita, observa-se que, novamente as soluções ϕ_{ref} não apresentaram um comportamento assintótico, impossibilitando a determinação de uma ordem de convergência e uma solução de referência.

Tabela 5.6: Soluções numéricas extrapoladas ϕ_{ref} para a região 1 com $\sigma_s = 0, 3$.

# direções/ octante (ND)	LQ_N $\phi_{ref}(ND)$	p	ϕ_{ref}	# direções/ octante (ND)	$P_N T_N S_N$ $\phi_{ref}(ND)$	p	ϕ_{ref}
1	0,47167			1	0,47167		
3	0,50043			10	0,50890		
6	0,50539	2,76	0,50847	15	0,51024	2,03	0,51286
10	0,50838	0,67	0,52426	36	0,51187	1,85	0,51316
36	0,51129	2,26	0,51219	55	0,51230	1,75	0,51327
				66	0,51245	1,81	0,51323
				105	0,51272	1,80	0,51324
# direções/ octante (ND)	$P_N T_N$ $\phi_{ref}(ND)$	p	ϕ_{ref}	# direções/ octante (ND)	QR $\phi_{ref}(ND)$	p	ϕ_{ref}
1	0,47167			2	0,48778		
9	0,50917			8	0,51285		
16	0,51119	2,01	0,51377	18	0,51332	5,60	0,51338
36	0,51250	2,30	0,51334	32	0,51321		
49	0,51273	2,56	0,51321	50	0,51321		
64	0,51285	3,42	0,51307	72	0,51321	-6,55	0,51321
100	0,51300	1,91	0,51328	98	0,51322	3,09	0,51322

Através do estudo feito nessa seção, não foi possível concluir o porquê de as soluções numéricas extrapoladas ϕ_{ref} não apresentaram um comportamento assintótico, impossibilitando a determinação da ordem de convergência e uma solução numérica sem erro de discretização espacial e angular. É possível que, a utilização do espaçamento de discretização angular h_a dado pela Eq.(5.15) não tenha sido uma escolha adequada, provocando então erros na derivação da solução extrapolada angularmente ϕ_{ref} via método de Newton Raphson. Alternativas que representem melhor h_a devem ser estudadas.

Note que, a análise assintótica angular, foi feita apenas para a região 1 do problema teste em estudo, uma vez que, nas regiões 2, 3 e 4, não foi possível obter uma solução extrapolada espacialmente, o que suspeita-se ser devido ao efeito raio na solução da equação bidimensional de transporte, tema de estudo da próxima seção.

5.3 O efeito raio na solução da equação de transporte

Efeitos raio são uma consequência da aproximação em ordenadas discretas na equação de transporte, independentemente do esquema utilizado na discretização da variável espacial. Este efeito surge a partir da aproximação de uma variável contínua angular por um conjunto de direções angulares discretas. A aproximação angular produz uma distribuição do fluxo angular distorcida, de modo que há regiões com fluxos angulares finitos e regiões em que os fluxos angulares não são representados, em outras palavras, tem-se solução para a equação de transporte apenas ao longo das direções discretas. Este efeito é conhecido como efeito raio.

Não é possível eliminar os efeitos raio na solução das equações em ordenadas discretas, mas pode-se reduzir a flutuação dos efeitos raio e melhorar a precisão na determinação das soluções em ordenadas discretas aumentando-se o número de direções angulares ou usando conjuntos de quadratura específicos.

Neste sentido, busca-se analisar o desempenho de cada quadratura numérica estudada, na redução do efeito raio na solução da equação bidimensional de transporte de nêutrons em ordenadas discretas. Para isto, utiliza-se para base de estudo, os resultados numéricos para o fluxo escalar de nêutrons obtidos através do código computacional AHOT(32×32), onde o domínio espacial do problema (Figura 3.1), é dividido em uma malha 32×32 com intervalos igualmente espaçados $\Delta x = \Delta y = 1/32$, com seções de choque macroscópicas total $\sigma_t = 1,0$ e de espalhamento $\sigma_s = 0,9$ e $\sigma_s = 0,3$, e fonte unitária $Q = 1$ na região 1, de acordo com os resultados apresentados nas Tabelas (4.7)-(4.12).

A fim de observar a flutuação do efeito raio produzido, através da utilização das diferentes quadraturas numéricas estudadas, na solução da equação de transporte, fixa-se um número de direções por octante para cada quadratura numérica, e então, compara-se o fluxo escalar de nêutrons nos centros dos nodos da malha

especial e nos centros dos nodos do contorno $x = 0,985$. Apresenta-se nas figuras abaixo os gráficos destas comparações para o caso em que $\sigma_s = 0,9$ e $\sigma_s = 0,3$.

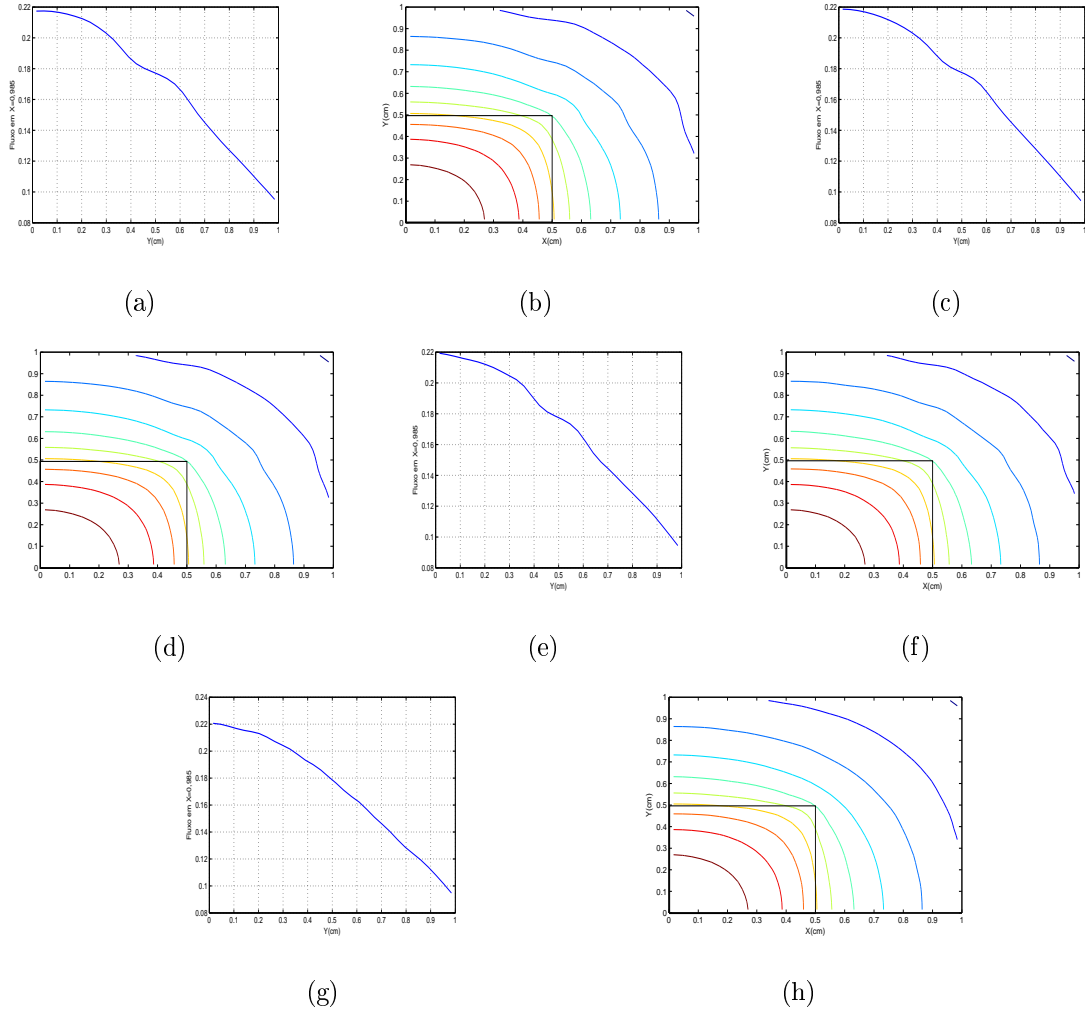


Figura 5.5: Fluxo escalar médio no contorno $x = 0,985$ e gráfico de contorno do fluxo em relação ao plano xy para o problema Benchmark com $\sigma_s = 0,9$. (a) - (b) são com respeito a quadratura LQ_{16} com 36 direções por octante, (c) - (d) Quadratura $P_N T_N S_{16}$ com 36 direções por octante, (e) - (f) Quadratura $P_{12} T_{12}$ com 36 direções por octante e (g) - (h) Quadratura $QR N_\theta = 4; N_\phi = 8$ com 32 direções por octante.

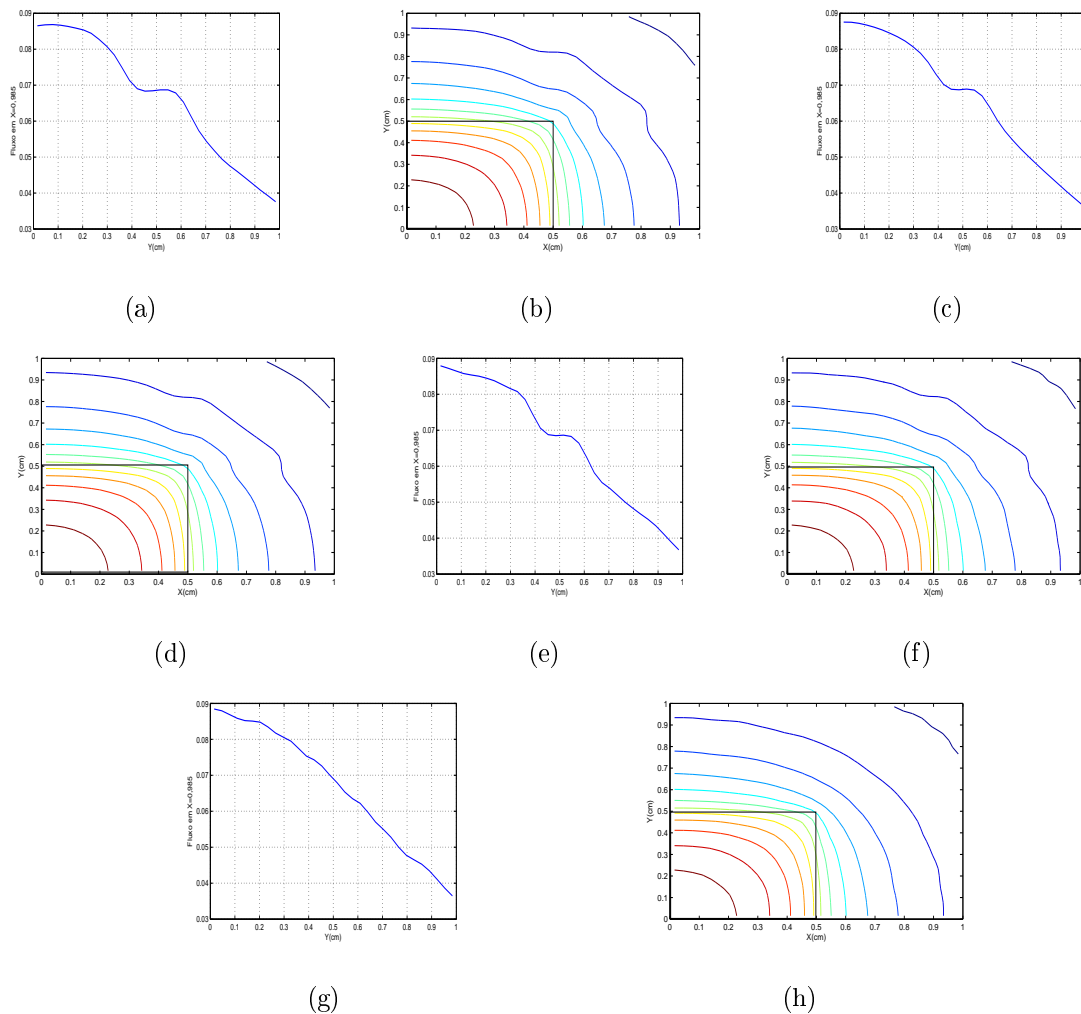


Figura 5.6: Fluxo escalar médio no contorno $x = 0,985$ e gráfico de contorno do fluxo em relação ao plano xy para o problema Benchmark com $\sigma_s = 0,3$. (a) - (b) são com respeito a quadratura LQ_{16} com 36 direções por octante. (c) - (d) Quadratura $P_N T_N S_{16}$ com 36 direções por octante, (e) - (f) Quadratura $P_{12} T_{12}$ com 36 direções por octante e (g) - (h) Quadratura QR $N_\theta = 4; N_\phi = 8$ com 32 direções por octante.

Observa-se nas Figuras 5.5 e 5.6 que, os gráficos gerados através da quadratura QR , derivada por Abu-Shumays [2, 3], utilizam um número menor de direções discretas para representar angularmente o movimento das partículas neu-

tras. Ainda, a flutuação do efeito raio é mais evidente no caso em que $\sigma_s = 0,3$, e a quadratura QR apresenta maior redução no efeito raio quando comparada as outras quadraturas numéricas estudadas.

Na região 1 do problema em estudo, a flutuação do efeito raio não é tão visível como nas regiões 2, 3 e 4. Isso ocorre porque a densidade de nêutrons na região 1 é dominada pela produção de nêutrons via fonte externa, mesmo havendo contribuição do espalhamento e da fuga de nêutrons na região. Já nas regiões 2, 3 e 4, não há presença de fonte externa, de maneira que a densidade de nêutrons nessas regiões, é determinada pelo processo de espalhamento e pelo termo de fuga de nêutrons, este, que domina o balanço neutrônico, contaminando então, a solução da equação de transporte via efeito raio. Isso pode explicar o motivo da incapacidade de determinar a ordem de convergência espacial p nas regiões 2, 3 e 4, uma vez que a influência do efeito raio na solução da equação de transporte produz uma distribuição do fluxo angular distorcida nessas regiões.

Observa-se das Figuras 5.5 e 5.6 que, quanto menor for o valor da seção de choque macroscópica de espalhamento σ_s , o que torna o problema de transporte de nêutrons mais absorvedor, mais evidente será a flutuação do efeito raio, o que faz sentido fisicamente.

Até então, os gráficos apresentados nas figuras 5.5 e 5.6, foram plotados e estudados para um número fixo de direções para cada quadratura numérica. Neste sentido, a quadratura QR mostrou-se mais eficiente na redução do efeito raio quando comparada as outras estudadas. Agora, de acordo com o segundo parágrafo desta seção, foi mencionado que não é possível eliminar o efeito raio na solução da equação de transporte, mas uma alternativa para reduzi-lo, seria aumentar o número de direções discretas para representar a variável angular. Em virtude disso, resolve-se o mesmo problema descrito anteriormente nessa seção, considerando-se um número maior de direções discretas nas quadraturas do tipo $P_N T_N$, para o caso em que

$\sigma_s = 0,3$, onde a influência do efeito raio é mais visível. Apresenta-se na figura abaixo os gráficos para o fluxo escalar de nêutrons nos centros dos nodos da malha espacial e nos centros dos nodos do contorno $x = 0,985$ para este teste realizado.

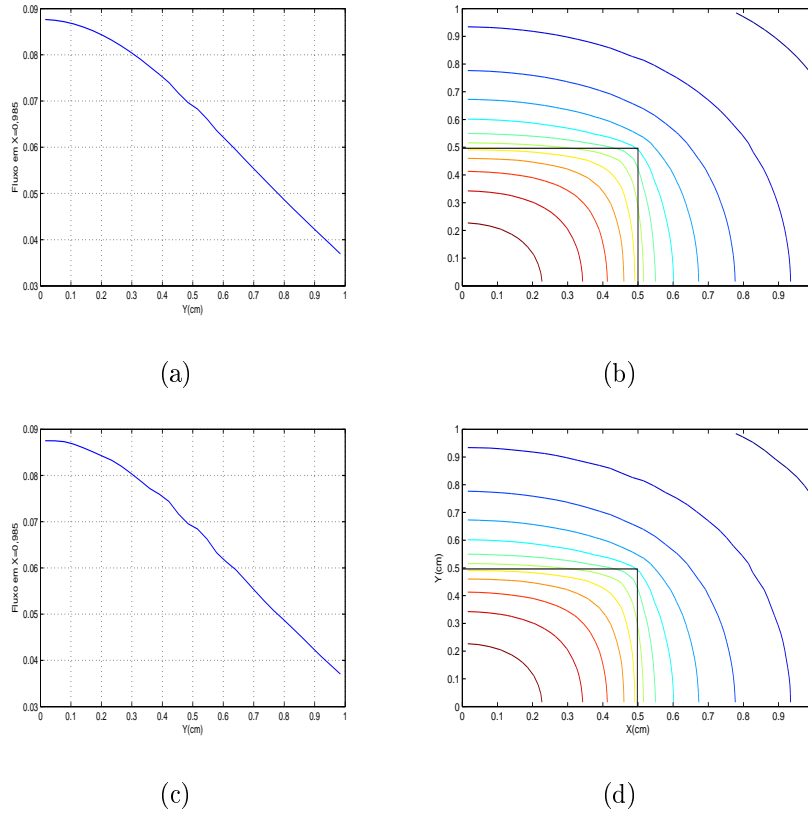


Figura 5.7: Fluxo escalar médio no contorno $x = 0,985$ e gráfico de contorno do fluxo em relação ao plano xy para o problema Benchmark com $\sigma_s = 0,3$. (a) - (b) Quadratura $P_N T_N S_{64}$ com 528 direções por octante e (c) - (d) Quadratura $P_{32} T_{32}$ com 256 direções por octante.

Note na figura acima, que de fato, ao representar a variável angular contínua por um número maior de direções discretas, ou ordem de quadratura numérica, a flutuação do efeito raio na solução da equação de transporte é minimizada, o que está de acordo com o esperado.

Observa-se que a utilização de qualquer quadratura numérica para altas ordens de quadratura, pode minimizar o efeito raio na solução da equação de transporte, porém, um esforço computacional maior é exigido. Já com respeito a quadratura de nível simétrica, por ser uma quadratura limitada até ordem $N \leq 20$, sua utilização não apresenta vantagens na resolução da equação de transporte, no sentido de minimização de efeito raio.

6 CONCLUSÕES

Obteve-se ao final deste trabalho, uma estimativa para o erro de aproximação numérica para a integral do termo de espalhamento da equação bidimensional de nêutrons, considerando-se que o integrando da equação possa ser aproximado por funções polinomiais em termos dos cossenos diretores Ω_x e Ω_y . Com esta estimativa, foi possível analisar a precisão com que as quadraturas, simétrica de nível LQ_N , Legendre-Chebyshev $P_N T_N S_N$ e $P_N T_N$, e *quadruple range QR*, aproximam tal integral. Neste contexto, a quadratura $P_N T_N$ mostrou-se mais eficiente em relação as outras, sendo possível integrar funções polinomiais nos cossenos diretores até grau $L \leq 2N - 1$, utilizando-se de um número menor de direções discretas.

Estudos a respeito do uso de diferentes quadraturas numéricas aplicadas às equações em ordenadas discretas, possibilitaram contornar o problema de pesos negativos encontrado pela quadratura simétrica de nível, possibilitando o uso de aproximações em ordenadas discretas de alta ordem. Entretanto, os resultados obtidos para o fluxo escalar médio de nêutrons, não apresentaram ganho relevante em precisão numérica quando utilizadas ordens de quadraturas elevadas ($N > 20$), contrariamente ao fato de as quadraturas numéricas integrarem polinômios de alta ordem nos cossenos diretores. Acredita-se que isto possa ocorrer por dois pontos: foram abordados problemas de transporte em meio isotrópico, cujo espalhamento independe da variável angular e foi assumido expansão do integrando da equação de transporte em termos de funções polinomiais nos cossenos diretores. Porém, mais testes precisam ser feitos, como a aplicação do estudo em problemas que consideram o meio com espalhamento anisotrópico.

Outro ponto importante a se destacar neste trabalho, foi o estudo dos efeitos raio nas equações em ordenadas discretas, onde observou-se que a utilização do conjunto de quadratura *QR*, indicou redução da flutuação dos efeitos raio

para ordens de aproximação angular mais baixas do que os outros três esquemas de quadratura considerados.

Ainda, observou-se que os resultados numéricos para o fluxo escalar médio ao longo de toda a região de fonte do problema, mostraram convergência assintótica com discretização espacial quase idêntica para todas as quadraturas angulares consideradas, o que possibilitou a determinação de uma solução de referência espacial, para comparação dos resultados numéricos. Entretanto, o erro assintótico angular não diminuiu consideravelmente com o aumento do número de direções angulares de maneira que não foi possível determinar uma ordem de convergência ou uma solução extrapolada espacialmente e angularmente de referência. Acredita-se que através do procedimento utilizado para a análise assintótica angular, o espaçamento de discretização angular h_a utilizado na extrapolação, talvez não tenha sido bem representado. Uma investigação mais detalhada a respeito do assunto faz parte dos objetivos de continuidade de estudo deste trabalho.

A formulação ADO foi implementada em associação com os esquemas de quadraturas bidimensionais de alta ordem, tendo sido preservada importante propriedade de redução da ordem do problema de autovalores à metade do número de direções discretas, resultando em eficientes ganhos no custo computacional para a determinação das soluções dos problemas de fonte fixa estudados. Entretanto, na abordagem utilizada, as soluções dos problemas são obtidas através da resolução de um único sistema linear acoplado nas variáveis x e y , de maneira que, quanto maiores forem as subdivisões do domínio do problema, maior será a ordem do sistema linear a ser resolvido, o que restringe a utilização de rotinas computacionais baseadas em métodos diretos. Neste aspecto, estudos através de métodos iterativos para a solução do sistema linear já estão sendo feitos e resultados numéricos estão sendo obtidos [34].

As soluções ADO (2×2) mostraram-se mais precisas em relação as soluções AHOT (2×2) e (4×4), quando comparadas à solução de referência espacial, demonstrando desta forma, a eficiência do método. Vale enfatizar que na abordagem ADO não foi utilizado nenhum algoritmos de varredura numérica ou método iterativo para a obtenção das soluções da equação de transporte.

Referências Bibliográficas

- [1] I. K. Abu-Shumays. Angular quadratures for improved transport computations. *Transport Theory and Statistical Physics*, 30(2&3):169–204, 2001.
- [2] I.K. Abu-Shumays. *Low-Order Gauss-Christoffel Quadrature*. Argonne National Laboratory, ANL-7914, Lemont, IL, 1972.
- [3] I.K. Abu-Shumays. Compatible product angular quadrature for neutron transport in X-Y geometry. *Nuclear Science and Engineering*, 64:299–316, 1977.
- [4] C. D. Ahrens. Lagrange discrete ordinates: A new angular discretization for the three-dimensional linear boltzmann equation. *Nuclear Science and Engineering*, 180:273–285, 2015.
- [5] A. K. Al-Basheer, G. E. Sjoden, and M. Ghita. Critical discretization issues in 3-D S_N simulations relevant to dosimetry and medical physics. *Nuclear Technology*, 169:252–262, 2010.
- [6] R. E. Alcouffe, R.S. Baker, F.W. Brinkley, D.R. Marr, R.D. O’Dell, and W.F. Walters. *DANTSYS: a diffusion accelerated neutral particle transport code system*. Los Alamos National Laboratory, LA-12969-M, Los Alamos, NM, 1995.
- [7] R. E. Alcouffe, R. D. O’Dell, and F. W. Brinkley Jr. A first-collision source method that satisfies discrete s_n transport balance. *Nuclear Science and Engineering*, 105:198–203, 1990.
- [8] F. S. Azevedo, E. Sauter, M. Thompson, and M. T. Vilhena. Existence theory for a one-dimensional problem arising from the boundary layer

- analysis of radiative flows. *Progress in Nuclear Energy*, 53:1105–1113, 2011.
- [9] Y. Y. Azmy. Comparison of three approximations to the linear-linear nodal transport method in weighted diamond-difference form. *Nuclear Science and Engineering*, 100:190–200, 1988.
- [10] Y. Y. Azmy. The weighted diamond-difference form of nodal transport methods. *Nuclear Science and Engineering*, 98:29–40, 1988.
- [11] Y. Y. Azmy. Arbitrarily high order characteristic methods for solving the neutron transport equation. *Annals of Nuclear Energy*, 19:593–606, 1992.
- [12] A. Badruzzaman. An efficient algorithm for nodal-transport solutions in multidimensional geometry. *Nuclear Science and Engineering*, 89:281–290, 1985.
- [13] A. Badruzzaman and J. Chiaramonte. *Application of nodal S_N methods to radiation transport nuclear well logging*. Proc. Intl. Topical Mtg. on Advances in Physics, Mathematics and Computation, Paris, 1987.
- [14] L. B. Barichello, L. C. Cabrera, and J. F. Prolo Filho. An analytical discrete ordinates solution for two dimensional problems based on nodal schemes. In : *Proceedings of the 2009 International Nuclear Atlantic Conference, Rio de Janeiro, Brazil*, CD-ROM:1–12, 2009.
- [15] L. B. Barichello, L. C. Cabrera, and J. F. Prolo Filho. An analytical approach for a nodal scheme of two-dimensional neutron transport problems. *Annals of Nuclear Energy*, 38:1310–1317, 2011.
- [16] L. B. Barichello, R. D. Cunha, C. Becker, and A. Tres. An analytical approach for a nodal formulation of a two-dimensional fixed-source neutron

- transport problem in heterogeneous medium. *Kerntechnik*, 80:167–173, 2015.
- [17] L. B. Barichello, R. D. M. Garcia, and C. E. Siewert. Particular solutions of the discrete-ordinates method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 64:219–226, 2000.
- [18] L. B. Barichello and C. E. Siewert. A discrete-ordinates solution for a non-grey model with complete frequency redistribution. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 62:665–675, 1999.
- [19] L. B. Barichello and C. E. Siewert. A new version of the discrete-ordinates method. *In: Proceedings of the 2nd International Conference on Computational Heat and Mass Transfer, Rio de Janeiro, Brazil*, 1:340–347, 2001.
- [20] L. B. Barichello and M. T. Vilhena. A new analytical approach to solve the neutron transport equation. *Kerntechnik*, 56:334–336, 1991.
- [21] R. C. Barros and E. W. Larsen. A spectral nodal method for one-group x,y -geometry discrete ordinates problems. *Nuclear Science and Engineering*, 111:34–45, 1992.
- [22] G. L. Bell and S. Glasstone. *Nuclear Reactor Theory*. Van Nostrand Reinhold Co, New York, 1970.
- [23] L. Boltzmann. Weitere studien über das wärmegleichgewicht unter gas molekülen. *Sitzungsberichte Akademie der Wissenschaften*, 60:275–376, 1872.
- [24] L. C. Cabrera. *Solução espectral para modelos bidimensionais da equação linear de Boltzmann*. PhD thesis, Tese de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Matemática, UFRGS, Porto Alegre, 2009.

- [25] D. G. Cacuci. *Handbook of Nuclear Engineering*. Springer, New York, 2010.
- [26] M. Capilla, C. F. Talavera, D. Ginestar, and G. Verdú. A nodal collocation approximation for the multidimensional PL equations – 2D applications. *Annals of Nuclear Energy*, 35:1820–1830, 2008.
- [27] M. Capilla, C. F. Talavera, D. Ginestar, and G. Verdú. Application of a nodal collocation approximation for the multidimensional PL equations to the 3D Takeda benchmark problems. *Annals of Nuclear Energy*, 40:1–13, 2012.
- [28] J. F. Carew and G. Zamonsky. Uniform positive-weight quadratures for discrete ordinate transport calculations. *Nuclear Science and Engineering*, 131:199–207, 1999.
- [29] X-5 Team Monte Carlo. *MCNP - A General N-Particle Transport Code, Version 5, Volume I: Overview and Theory*. Los Alamos National Laboratory, Los Alamos, NM, 2003.
- [30] B. G. Carlson. *Transport Theory: Discrete Ordinate Quadrature Over the Unit Sphere*. Los Alamos Scientific Laboratory Report, LA-4554, Los Alamos, NM, 1970.
- [31] B.G. Carlson. *Tables of Equal Weight Quadrature EQ_N Over the Unit Sphere*. Los Alamos Scientific Laboratory Report, LA-4734, Los Alamos, NM, 1971.
- [32] S. Chandrasekhar. *Radiative transfer*. Oxford University Press, London, 1950.

- [33] A. X. Chen, A. J. Antolak, and K. N. Leung. Electronic neutron sources for compensated porosity well logging. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, 684:52–56, 2012.
- [34] R. D. Cunha, A. Tres, and L. B. Barichello. A study on the parallel, iterative solution of systems of linear equations appearing on analytical nodal schemes for two-dimensional cartesian geometry discrete ordinates problems. *Joint International Conference on Mathematics and Computation (M&C), Nashville, Tennessee*, pages CD–ROM, 2015.
- [35] L. B. Dantas, H. R. B. Orlande, and R. M. Cotta. Improved lumped-differential formulations and hybrid solution methods for drying in porous media. *International Journal of Thermal Science*, 46:878–889, 2007.
- [36] D. S. Domínguez and R. C. Barros. The spectral Green’s function linear-nodal method for one-speed X,Y-geometry discrete ordinates deep penetration problems. *Annals of Nuclear Energy*, 34:958–966, 2007.
- [37] J. J. Dongarra, J. R. Bunch, C. B. Moler, and G. W. Stewart. *LINPACK user’s guide*. SIAM, Philadelphia, 1979.
- [38] J. J. Duderstadt and L. J. Hamilton. *Nuclear reactor analysis*. John Wiley and Sons, New York, 1976.
- [39] J. I. Duo and Y. Y. Azmy. Error comparison of diamond difference, nodal and characteristic methods for solving multidimensional transport problems with the discrete ordinates approximation. *Nuclear Science and Engineering*, 156:139–153, 2007.
- [40] J. K. Fletcher. The solution of the time-independent multi-group neutron transport equation using spherical harmonics. *Annals of Nuclear Energy*, 4:401–405, 1977.

- [41] J. K. Fletcher. A solution of the neutron transport equation using spherical harmonics. *Journal of Physics A: Mathematical and General*, 16:2827–2835, 1983.
- [42] J. K. Fletcher. A solution of the multigroup transport equation using spherical harmonics. *Transport Theory and Statistical Physics*, 15:157–179, 1986.
- [43] R. D. M. Garcia and C. E. Siewert. The linearized Boltzmann equation: sound-wave propagation in a rarefied gas. *Z. Angew. Math. Phys.*, 57:94–122, 2006.
- [44] R. D. M. Garcia and C. E. Siewert. Channel flow of a binary mixture of rigid spheres described by the linearized boltzmann equation and driven by temperature, pressure and density gradients. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 67:1041–1063, 2007.
- [45] R. D. M. Garcia, C. E. Siewert, and A.M. Yacout. Radiative transfer in a multilayer medium subject to fresnel boundary and interface conditions and uniform illumination by obliquely parallel roys. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 109:2151–2170, 2008.
- [46] R. R. Gomes and R. C. Barros. Computational modeling of monoenergetic neutral particle inverse transport problems in slab geometry. *American Institute of Physics*, 1479:2225–2228, 2012.
- [47] M. Gonzáles and P. Fernández, C.G.and Velarde. 2D numerical comparison between S_N and M_1 radiation transport methods. *Annals of Nuclear Energy*, 36:886–895, 2009.
- [48] E. B. Hauser. *Desenvolvimento de um método nodal analítico para problemas de ordenadas discretas em geometrias cartesianas bidimensional e*

tridimensional em domínios homogêneos e heterogêneos. PhD thesis, Tese de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC/UFRGS, Porto Alegre, 2006.

- [49] E. B. Hauser, R. P. Pazos, and M. T. de Vilhena. An error bound estimate and convergence of the Nodal-LTS_N solution in a rectangle. *Annals of Nuclear Energy*, 32:1146–1156, 2005.
- [50] A. Hébert. Development of the nodal collocation method for solving the neutron diffusion equation. *Annals of Nuclear Energy*, 14:527–541, 1987.
- [51] A. Hébert. High-order diamond differencing schemes. *Annals of Nuclear Energy*, 33:1479–1488, 2006.
- [52] A. Hébert. A simplified presentation of the multigroup analytic nodal method in 2-D Cartesian geometry. *Annals of Nuclear Energy*, 35:2142–2149, 2008.
- [53] J. S. Hesthaven and T. Warburton. *Nodal Discontinuous Galerkin Methods*. Springer, 2008.
- [54] J. J. Jarrell. *A Adaptive Angular Discretization Method For Neutral-Particle Transport in Three-Dimensional Geometries*. PhD thesis, PhD thesis, Texas A&M University, College Station, TX, 2010.
- [55] J. J. Jarrell and M. L. Adams. Discrete-ordinates quadrature sets based on linear discontinuous finite elements. *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2011), Rio de Janeiro, RJ, Brazil*, 2011.
- [56] J. H. Jeans. The equations of radiative transfer of energy. *Mon. Not. Royal Astron. Soc.*, 78:28–36, 1917.

- [57] J. Jung, H. Chijiwa, K. Kobayashi, and H. Nishihara. Discrete ordinate neutron transport equation equivalent to p_n approximation. *Nuclear Engineering and Design*, 49, 1972.
- [58] J. Kópházi, D. Lathouwers, and J. L. Kloosterman. Development of a three-dimensional time-dependent calculation scheme for molten salt reactors and validation of the measurement data of the molten salt reactor experiment. *Nuclear Science and Engineering*, 163:118–131, 2009.
- [59] K. D. Lathrop. Elimination of ray effects by converting discrete ordinates equations to spherical-harmonic-like equations. *Proc. Conf. New Developments in Reactor Mathematics and Applications, Idaho Falls, Idaho, U.S. Atomic Energy Commission*, 1971.
- [60] K. D. Lathrop. Remedies for ray effects. *Nuclear Science and Engineering*, 45:255–268, 1971.
- [61] K. D. Lathrop and F. W. Brinkley. *TWOTRAN-II, Two-dimensional multigroup discrete ordinates transport code*. Los Alamos Scientific Laboratory Report, LA-4848-MS, Los Alamos, NM, 1973.
- [62] K. D. Lathrop and B. G. Carlson. *Discrete Ordinate Angular Quadrature of the Neutron Transport Equation*. Los Alamos Scientific Laboratory Report, LA-3186, Los Alamos, NM, 1965.
- [63] R. D. Lawrence. Progress in nodal methods for the solution of the neutron diffusion and transport equations. *Progress in Nuclear Energy*, 17:271–301, 1986.
- [64] E. E. Lewis and W. F. Miller. *Computational Methods of Neutron Transport*. John Wiley & Sons, New York, 1984.

- [65] E. E. Lewis, W. F. Miller Jr, and T. P. Henry. A two-dimensional finite element method for integral neutron transport calculations. *Nuclear Science and Engineering*, 58:203–212, 1975.
- [66] G. Longoni. *Advanced Quadrature Sets, Acceleration, and Preconditioning Techniques for the Discrete Ordinates Method in Parallel Computing Environments*. PhD thesis, PhD dissertation, University of Florida, Gainesville, FL, 2004.
- [67] G. Longoni and A. Haghghat. Development of new quadrature sets with the ordinate splitting technique. *In: Proceedings of the 2001 American Nuclear Society International Meeting on Mathematical Methods for Nuclear Applications, Salt Lake City, UT*, 2001.
- [68] G. Longoni and A. Haghghat. Development and application of the regional angular refinement technique and its applications to non-conventional problems. *In: International Conference on the New Frontiers of Nuclear Technology: Reactor Physics, Safety, and High-Performance Computing, Seoul, Korea*, 2002.
- [69] N. Martin and A. Hébert. A three-dimensional s_n high-order diamond differencing discretization with a consistent acceleration scheme. *Annals of Nuclear Energy*, 36:1787–1796, 2009.
- [70] J. A. M. Mello and R. C. Barros. An exponential spectral nodal method for one-speed X,Y-geometry deep penetration discrete ordinates problems. *Annals of Nuclear Energy*, 29:1855–1869, 2002.
- [71] A. W. Menezes, H. Alves Filho, R. C. Barros, C. S. Moraes, and D. S. Dominguez. Analytical spatial reconstruction scheme for the coarse-mesh solutions generated by the constant spectral nodal method for monoener-

- getic discrete ordinates transport calculations in X,Y geometry fission-chain reacting systems. *Annals of Nuclear Energy*, 53:274–279, 2013.
- [72] W. F. Miller Jr. *Coarse Mesh Rebalance Method Compatible with Spherical Harmonic Fictitious Source in Neutron Transport Calculations*. Los Alamos Scientific Laboratory, LA-6145, Los Alamos, NM, 1975.
- [73] W. F. Miller Jr. and W. H. Reed. Ray-effect mitigation methods for two-dimensional neutron transport theory. *Nuclear Science and Engineering*, 62:391–411, 1977.
- [74] M. F. Modest. *Radiative heat transfer*. McGraw-Hill, New York, 1993.
- [75] C. B. Picoloto. *Formulações espectralnodais em cálculos neutrônicos multidimensionais*. PhD thesis, Tese de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC/UFRGS, Porto Alegre, 2015.
- [76] C. B. Picoloto, A. Tres, R. D. Cunha, and L. B. Barichello. Two-dimensional neutron transport problems with reflective boundary conditions: an analytical approach. In: *Proceedings of the 2013 International Nuclear Atlantic Conference - INAC 2013, Recife, PE, Brazil*, CD-ROM, 2013.
- [77] C. B. Picoloto, A. Tres, R. D. Cunha, and L. B. Barichello. Closed-form solutions for nodal formulations of two-dimensional transport problems in heterogeneous media. *Annals of Nuclear Energy*, 2015, in press.
- [78] W. H. Press, S. A. Teukolsky, W. T. Vetterling, and B. P. Flannery. *Numerical Recipes in Fortran 77 - The art of Scientific Computing*. Cambridge University Press, New York, NY, 1992.

- [79] J. F. Prolo Filho. *Abordagens espectralnodais para modelos multidimensionais em transporte de partículas*. PhD thesis, Tese de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Matemática, UFRGS, Porto Alegre, 2011.
- [80] J. F. Prolo Filho and L. B. Barichello. An analytical discrete ordinates solution for a nodal model of a two-dimensional neutron transport problem. *International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering*, pages 2350–2360, 2013.
- [81] J. F. Prolo Filho and L. B. Barichello. General expressions for auxiliary equations of a nodal formulation for two-dimensional transport calculations. *Journal of Computational and Theoretical Transport*, 43:1–22, 2014.
- [82] Martin W. R. and J. J. Duderstadt. Finite element solutions of the neutron transport equation with applications to strong heterogeneities. *Nuclear Science and Engineering*, 62:371–390, 1977.
- [83] J. LeVeque Randall. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*. Cambridge University Press, 2002.
- [84] J. LeVeque Randall. *Finite Difference Methods for Ordinary and Partial Differential Equations - Steady State and Time Dependent Problems*. SIAM, 2007.
- [85] W. H. Reed. Spherical harmonic solutions of the neutron transport equation from discrete ordinates codes. *Nuclear Science and Engineering*, 49, 1972.
- [86] W.A. Rhoades and R.L. Childs. *DORT/TORT two- and three-dimensional discrete ordinates transport, Version 2.7.3*. RSIC-CCC-543, ORNL Radiation Shielding Information Center, Oak Ridge, TN, 1993.

- [87] L. F. Richardson and J. A. Gaunt. The deferred approach to the limit. *Proceedings of the Royal Society of London Serial A*, 226:299–391, 1927.
- [88] P. Rodrigues. *Dinâmica de gases rarefeitos e transferência radiativa: aplicações em geometria cilíndrica*. PhD thesis, Tese de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC/UFRGS, Porto Alegre, 2003.
- [89] E. Sauter, F. S. Azevedo, M. Thompson, and M. T. Vilhena. Solution of the one-dimensional transport equation by the vector green function method: Error bounds and simulation. *Applied Mathematics and Computation*, 219:1291–1301, 2013.
- [90] F. Sharipov. Non-isothermal gas flow through rectangular microchannels. *Journal Micromechanics Microengineering*, 9:394–401, 1999.
- [91] C. E. Siewert. Poiseuille, thermal creep and couette flow: results based on the CES model of the linearized Boltzmann equation. *European Journal of Mechanics B/Fluids*, 21:579–597, 2002.
- [92] C. E. Siewert. The linearized Boltzmann equation: a concise and accurate solution of the temperature-jump problem. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 77:417–432, 2003.
- [93] C. E. Siewert. The McCormack model for gas mixture: the temperature jump problem. *Z. Angew. Math. Phys.*, 56:273–292, 2005.
- [94] G.E. Sjoden and A. Haghghat. PENTRAN, a 3-D scalable transport code with complete phase space decomposition. *Transactions of the American Nuclear Society*, 74:181–183, 1996.

- [95] B. T. Smith, J. M. Boyle, J. J. Dongarra, B. S. Garbow, Y. Ikebe, V. C. Klema, and C. B. Moler. *Matrix eigensystem routines EISPACK guide*. Springer-Verlag, Berlin, 1976.
- [96] J. C. Stone. *Adaptive Discrete-ordinates Algorithms and Strategies*. PhD thesis, PhD dissertation, Texas A&M University, College Station, TX, 2007.
- [97] J.C. Stone and M.L. Adams. A piecewise linear finite element basis with application to particle transport. *in: Nuclear Mathematical and Computational Sciences Meeting, Gatlinburg, TN, 2003*.
- [98] J.C. Stone and M.L. Adams. Progress on adaptive discrete-ordinates algorithms and strategies. *in: Nuclear Mathematical and Computational Sciences Meeting, Gatlinburg, TN, 2003*.
- [99] A Takahashi, J. Yamamoto, M. Ebisuya, and K. Sumita. Method for calculating anisotropic neutron transport using scattering kernel without polynomial expansion. *Journal of Nuclear Science and Technology*, 16:1–15, 1979.
- [100] A. Tres, C. Becker, R. D. Cunha, and L. B. Barichello. A deterministic approach for neutron transport in two-dimensional domains. *In: Proceedings of the International Congress of Mechanical Engineering - COBEM, Ribeirão Preto, Brazil, CD-ROM:6922–6930, 2013*.
- [101] A. Tres, C. Becker, R. D. Cunha, and L. B. Barichello. Uma solução particular baseada em funções de green para formulações nodais derivadas da equação de transporte bidimensional. *Anais do Congresso de Matemática Aplicada e Computacional - CMAC Sul, Curitiba, Brazil, 2014, in press*.
- [102] A. Tres and R. F. Knackfuss. Fluxo de uma mistura gasosa binária: Modelo de mccormack. *In: Proceedings of the XXXI Iberian Latin-American*

Congress on Computational Methods in Engineering, Buenos Aires, Argentina, CD-ROM, 2010.

- [103] A. Tres, J. F. Picoloto, C. B. Prolo Filho, R. D. Cunha, and L. B. Barichello. Explicit formulation of a nodal transport method for discrete ordinates calculations in two-dimensional fixed-source problems. *Kerntechnik*, 79:155–162, 2014.
- [104] R. W. Tsai and S. K. Loyalka. A numerical method for solving the integral equation of neutron transport: III. *Nuclear Science and Engineering*, 59:536–540, 1976.
- [105] M. Vasudevaiah and K. Balamurugan. Heat transfer of rarefied gases in a corrugated microchannel. *International Journal of Thermal Sciences*, 40:454–468, 2001.
- [106] J. C. Wagner and A. Haghghat. Automated variance reduction of Monte Carlo shielding calculations using discrete ordinates adjoint function. *Nuclear Science and Engineering*, 28:186–208, 1998.
- [107] J. C. Wagner, S. W. Mosher, T. M. Evans, D. E. Peplow, and J. A. Turner. Hybrid and parallel domain-decomposition methods development to enable Monte Carlo for reactor analyses. *Progress in Nuclear Science and Technology*, 2:815–820, 2011.
- [108] F. W. Walters and R. D. O’Dell. Nodal methods for discrete ordinates transport problems in (x,y) geometry. *Conference: ANS/ENS joint topical meeting on mathematical methods in nuclear engineering, Munique, Alemanha*, 1981.
- [109] Y. Wang and J. C. Ragusa. A high-order discontinuous galerkin method for the s_n transport equations on 2D unstructured triangular meshes. *Annals of Nuclear Energy*, 36:931–939, 2009.

- [110] Y. Wang and J. C. Ragusa. On the convergence of DGFEM applied to the discrete ordinates transport equation for structured and unstructured triangular meshes. *Nuclear Science and Engineering*, 163:56–72, 2009.
- [111] E. W. Weisstein. Beta function. From *MathWorld* - a wolfram web resource. <http://mathworld.wolfram.com/BetaFunction.html>.
- [112] E. W. Weisstein. Gamma function. From *MathWorld* - a wolfram web resource. <http://mathworld.wolfram.com/BetaFunction.html>.
- [113] G. C. Wick. über ebene diffusions problem. *Z. Phys*, 120:702–705, 1943.
- [114] M. M. R. Williams. Radiation transport in a light duct using a one-dimensional model. *Physica Scripta*, 76:303–313, 2007.
- [115] C. Yi and A. Haghghat. A three-dimensional block-oriented hybrid discrete ordinates and characteristics method. *Nuclear Science and Engineering*, 164:221–247, 2010.
- [116] Q. Zhang and H.S. Abdel-Khalik. *Global variance reduction for monte carlo reactor physics calculations*. In ANS Winter Meeting. American Nuclear Society, 2012.
- [117] A.K. Ziver, M.S. Shahdatullah, M.D. Eaton, C.R.E. Oliveira, C.C. Umpleby, and A.J.H. Goddard. Finite element spherical harmonics (PN) solutions of the three-dimensional takeda benchmark problems. *Annals of Nuclear Energy*, 32:925–948, 2005.