

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

**Abordagens Espectronodais para Modelos
Multidimensionais em Transporte de
Partículas**

por

João Francisco Prolo Filho

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

Profa. Dra. Liliane Basso Barichello
Orientadora

Porto Alegre, dezembro de 2011.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Prolo Filho, João Francisco

Abordagens Espectronodais para Modelos Multidimensionais em Transporte de Partículas / João Francisco Prolo Filho.—Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2011.

79 p.: il.

Tese (doutorado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2011.

Orientadora: Barichello, Liliane Basso

Tese: Matemática Aplicada

Transporte de Nêutrons Multidimensional, Equação Linearizada de Boltzmann, Ordenadas Discretas

Abordagens Espectronodais para Modelos Multidimensionais em Transporte de Partículas

por

João Francisco Prolo Filho

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: Profa. Dra. Liliane Basso Barichello

Banca examinadora:

Prof. Dr. Dagoberto Adriano Rizzotto Justo
PPGMAp - UFRGS

Profa. Dra. Eliete Biasotto Hauser
FAMAT - PUCRS

Prof. Dr. Fernando Carvalho da Silva
COPPE - UFRJ

Prof. Dr. Hermes Alves Filho
IPRJ - UERJ

Profa. Dra. Maria Cristina Varriale
Coordenadora

Índice

| | |
|---|------|
| LISTA DE FIGURAS | vi |
| LISTA DE TABELAS | vii |
| LISTA DE SÍMBOLOS | viii |
| LISTA DE ABREVIATURAS | x |
| RESUMO | xi |
| ABSTRACT | xii |
| | |
| 1 INTRODUÇÃO | 1 |
| | |
| 2 EQUAÇÃO DE TRANSPORTE BIDIMENSIONAL EM ORDE- NADAS DISCRETAS | 7 |
| 2.1 Formulação matemática | 7 |
| 2.2 Discretização das direções | 8 |
| 2.3 Problema de ordenadas discretas | 10 |
| 2.4 Equação nodal: integração em y | 12 |
| 2.5 Equação nodal: integração em x | 14 |
| | |
| 3 SOLUÇÃO HOMOGÊNEA DOS PROBLEMAS NODAIS | 17 |
| 3.1 Problema nodal integrado em y | 17 |
| 3.2 Problema nodal integrado em x | 19 |
| | |
| 4 FLUXOS NO CONTORNO: EXPANSÃO EM AUTOFUNÇÕES | 23 |
| | |
| 5 SOLUÇÃO PARTICULAR | 27 |
| 5.1 Caracterização dos termos fonte | 27 |
| 5.2 Solução particular via função de Green | 29 |
| 5.3 Cálculo dos coeficientes | 33 |

| | | |
|-------------------|---|-----------|
| 6 | RESULTADOS NUMÉRICOS | 38 |
| 6.1 | Descrição geral | 39 |
| 6.2 | Quantidades de interesse | 40 |
| 6.3 | Resultados para o PROBLEMA 1 | 42 |
| 6.4 | Resultados para o PROBLEMA 2 | 46 |
| 6.5 | Resultados para o PROBLEMA 3 | 47 |
| 7 | CONSIDERAÇÕES FINAIS | 51 |
| | BIBLIOGRAFIA | 53 |
| APÊNDICE A | QUADRATURA ANGULAR COM SIMETRIA DE NÍVEL | 63 |
| APÊNDICE B | EQUAÇÕES NODAIS: APROXIMAÇÃO POR FLUXOS MÉDIOS | 68 |

Lista de Figuras

| | | |
|------------|---|----|
| Figura 2.1 | Geometria dos problemas bidimensionais. | 8 |
| Figura 2.2 | Quadratura simétrica de nível S_N para o caso tridimensional, usando $N=4, 6$ e 8 | 9 |
| Figura 2.3 | Quadratura simétrica de nível S_N para o caso bidimensional, usando $N=4, 6$ e 8 | 10 |
| Figura 2.4 | Conjunto de direções S_4 ordenado de forma apropriada para a equação nodal integrada em y | 13 |
| Figura 2.5 | Conjunto de direções S_4 ordenado de forma apropriada para a equação nodal integrada em x | 15 |
| Figura 6.1 | Esquema das direções das correntes líquidas resultantes. | 41 |
| Figura 6.2 | Perfis de fluxo escalar considerando a) $\sigma_s = 0.5$; b) $N = 16$ | 43 |
| Figura A.1 | Arranjo das direções e pesos para as quadraturas S_2, S_4 e S_6 | 66 |
| Figura A.2 | Arranjo das direções e pesos para as quadraturas S_8, S_{12} e S_{16} | 67 |
| Figura B.1 | Representação das subdivisões da solução no domínio. | 74 |

Lista de Tabelas

| | | |
|-------------|--|----|
| Tabela 5.1 | Relação entre as direções Ω_i usadas nos problemas integrados. . . | 34 |
| Tabela 6.1 | Fluxo escalar $\phi(x)$, para $\sigma_s = 0.5$ | 43 |
| Tabela 6.2 | Fluxos escalares $\phi(x)$, para $x = 0.5$ | 44 |
| Tabela 6.3 | Fluxos escalares $\phi(x)$, para $x = 0.7$ | 45 |
| Tabela 6.4 | Fluxos escalares $\phi(x)$, para $x = 0.98$ | 45 |
| Tabela 6.5 | Fuga de nêutrons J_N para o PROBLEMA 2, para $\sigma_t = 0.75$ e $\sigma_s = 0.5$ | 46 |
| Tabela 6.6 | Fuga de nêutrons J_N obtida pelo método ADO para o PROBLEMA 3, para diferentes valores de σ_s e N | 47 |
| Tabela 6.7 | Fuga de nêutrons J_N do PROBLEMA 3, para $\sigma_s = 0.5$ e $N = 4$ | 48 |
| Tabela 6.8 | Fuga de nêutrons J_N do PROBLEMA 3, para $\sigma_s = 0.99$ e $N = 4$ | 48 |
| Tabela 6.9 | Fuga de nêutrons J_N para o PROBLEMA 3, para $\sigma_s = 0.5$ | 49 |
| Tabela 6.10 | Fuga de nêutrons J_N para o PROBLEMA 3, para $\sigma_s = 0.99$ | 50 |
| Tabela A.1 | Quadraturas simétricas de nível S_N referente ao primeiro octante. | 63 |
| Tabela A.2 | Continuação da Tabela A.1. | 64 |
| Tabela A.3 | Continuação da Tabela A.2. | 65 |
| Tabela B.1 | Fuga de nêutrons J_N o PROBLEMA 2 usando $\sigma_t = 0.75$ e $\sigma_s = 0.5$ | 79 |

LISTA DE SÍMBOLOS

| | |
|--|---|
| a, b, c, d | dimensões da fonte e do domínio (cm) |
| A_j, B_j | coeficientes da solução homogênea |
| $A_{j,\alpha}, B_{j,\alpha}, A_j(x), B_j(y)$ | coeficientes da solução particular |
| A_y, D_y, A_x, D_x | matrizes do problema de autovalores |
| $\widehat{K}_1, \widehat{K}_2, \widehat{L}_1, \widehat{L}_2$ | coeficientes de proporcionalidade do fluxo angular médio |
| E_k, F_k, G_k, H_k | coeficientes das aproximações da solução nas fronteiras |
| J_N | fuga de nêutrons (W/cm^2) |
| J_x | fuga de nêutrons do problema integrado em y |
| J_y | fuga de nêutrons do problema integrado em x |
| λ_y, λ_x | autovalores do problema homogêneo |
| λ | constante de decaimento |
| M | número de pontos usados na quadratura |
| N | ordem da quadratura S_N |
| ν_j, γ_j | constantes de separação |
| $\Omega = (\mu, \eta)$ | direção de propagação das partículas |
| $\Phi_y(\nu, \Omega), \Phi_x(\gamma, \Omega)$ | autofunções do problema homogêneo |
| $\phi_y(x), \phi_x(y)$ | fluxo escalar nas variáveis x e y ($\text{n}/\text{cm}^2 \cdot \text{s}$) |
| $\Psi(\mathbf{r}, \Omega)$ | fluxo angular ($\text{W}/\text{cm}^2 \cdot \text{Sr}$) |
| $\Psi_y(x, \Omega)$ | fluxo angular médio na variável x |
| $\Psi_x(y, \Omega)$ | fluxo angular médio na variável y |
| $\Psi_y^h(x, \Omega)$ | solução do problema homogêneo em x |
| $\Psi_x^h(y, \Omega)$ | solução do problema homogêneo em y |
| $\Psi_y^p(x, \Omega)$ | solução do problema particular em x |
| $\Psi_x^p(y, \Omega)$ | solução do problema particular em y |
| $\widetilde{\Psi}(x, y, \Omega_i)$ | aproximação das condições de contorno não-incidentes |
| $\widetilde{\Psi}_x(y, \Omega_i), \widetilde{\Psi}_y(x, \Omega_i)$ | versões integradas de $\widetilde{\Psi}(x, y, \Omega_i)$ |
| $Q(\mathbf{r})$ | fonte isotrópica ($\text{n}/\text{cm}^3 \cdot \text{s}$) |

| | |
|--|--|
| $Q_y(x)$ | fonte isotrópica após integração em y |
| $Q_x(y)$ | fonte isotrópica após integração em x |
| $\widehat{Q}_y(x, \boldsymbol{\Omega}), \widehat{Q}_x(y, \boldsymbol{\Omega})$ | fonte do problema unidimensional resultante |
| $\mathbf{r} = (x, y)$ | vetor posição espacial (cm) |
| σ_t | seção de choque total (cm^{-1}) |
| σ_s | seção de choque de espalhamento (cm^{-1}) |
| $\mathbf{U}_y(\nu, \boldsymbol{\Omega}), V_y(\nu, \boldsymbol{\Omega})$ | vetores auxiliares |
| $\mathbf{U}_x(\gamma, \boldsymbol{\Omega}), V_x(\gamma, \boldsymbol{\Omega})$ | vetores auxiliares |
| w_k | pesos da quadratura |

LISTA DE ABREVIATURAS

| | |
|-----------------------|---|
| ADO | Método de Ordenadas Discretas Analítico |
| BE | Equação de Boltzmann |
| BGK, S, MRS, CLF, CES | Modelos Cinéticos |
| CCN | Modelo nodal constante-constante |
| LBE | Equação Linear de Boltzmann |
| LLN | Modelo nodal linear-linear |
| MCNP | Monte Carlo N-Particle Transport Code |
| MEMS | Sistemas Microeletromecânicos |
| RGD | Dinâmica de Gases Rarefeitos |
| SGF-CN | Modelo espectral nodal constante |
| SGF-LN | Modelo espectral nodal linear |

RESUMO

Neste trabalho, uma solução para um problema de transporte de nêutrons bidimensional em geometria cartesiana é proposta, a partir de métodos nodais. Neste contexto, equações unidimensionais são geradas através do processo de integração do problema multidimensional. Introduzindo grandezas médias, no método aqui proposto, a integração é feita em todo o domínio onde o problema está definido de forma que nenhum processo iterativo entre nodos é necessária. O método ADO é usado para desenvolver soluções analíticas em ordenadas discretas para as equações unidimensionais integradas, de forma que as soluções finais são analíticas em termos das variáveis espaciais. A aproximação ADO, juntamente com um esquema de quadratura simétrica, resulta em uma significativa redução da ordem dos problemas de autovalores associados comparativamente a outras abordagens existentes na literatura. Relações gerais entre os fluxos desconhecidos nas fronteiras e as soluções elementares dos problemas homogêneos são introduzidas como equações auxiliares. Os resultados numéricos obtidos e comparados com resultados de problemas clássicos disponíveis demonstram a viabilidade da formulação que é também eficiente do ponto de vista computacional.

ABSTRACT

In this work, a solution for a two-dimensional neutron transport problem in cartesian geometry is proposed, on the basis of nodal schemes. In this context, one-dimensional equations are generated by an integration process of the multidimensional problem. Introducing averaged quantities, on the method proposed here, the integration is performed for the whole domain where the problem is defined such that no iterative procedure between nodes is needed. The ADO method is used to develop analytical discrete ordinates solution for the one-dimensional integrated equations, such that final solutions are analytical in terms of the spatial variables. The ADO approach along with a level symmetric quadrature scheme, lead to a significant order reduction of the associated eigenvalues problems compared to other approaches available in the literature. General relations between the unknown fluxes at the boundary and the elementary solutions of the homogeneous problems are introduced as auxiliary equations. The numerical results obtained and compared with available results of classical problems demonstrate the viability of the formulation which is also efficient on the computational point of view.

1 INTRODUÇÃO

Atualmente, é grande o volume de pesquisa e de trabalhos publicados a respeito da Equação de Boltzmann (BE) ou de sua versão linear (LBE), também chamada de *equação de transporte*. O motivo a que se deve tal interesse nestas equações é a sua aplicabilidade em problemas realísticos, como por exemplo, na área nuclear, para o estudo de reatores [33] e blindagem [74]; em nanotecnologia, para o estudo de microfluidos [72] e escoamentos em microestruturas [5, 48, 54]; em estudos aerodinâmicos [70]; simulações de fenômenos acústicos [37, 55] e até mesmo na fabricação de materiais cerâmicos [28].

Inicialmente desenvolvida por Ludwig Boltzmann no final do século XIX, durante seus estudos em teoria cinética dos gases [16], a BE é uma equação *integro-diferencial* que descreve quantitativamente a distribuição espacial, direcional, energética e temporal das partículas em meios materiais [34].

Apesar de existir na literatura muitos estudos relativos a BE propriamente dita [45, 59, 60, 68, 69], bem como resultados teóricos estabelecidos para o seu tratamento [22, 23, 24], sua resolução é complexa, com existência de soluções analíticas apenas em casos idealizados [21].

Por esta razão muitos pesquisadores têm se empenhado em propor métodos de solução desta equação. Estudos mais detalhados sobre a derivação e propriedades da BE podem ser encontrados, por exemplo, nos livros de Cercignani [23, 25] e Duderstadt [33], bem como aspectos de existência e solução geral da equação [26].

Com relação a equação de transporte propriamente dita, os métodos de solução em geral podem ter um enfoque *probabilístico* (como no caso do método de Monte Carlo [74]) ou *determinístico*, que corresponde desde as formulações puramente numéricas (caso do método de Elementos Finitos [76]) até os métodos considerados

mistos (caso do método ADO [10]), onde se consegue tratar as variáveis espaciais de forma analítica.

No campo determinístico, as abordagens que mais se destacam são as baseadas no método de *ordenadas discretas*. O grande volume de publicações com base neste método deve-se à sua versatilidade em resolver não só problemas unidimensionais e nodais em teoria de transporte [1, 29, 38, 40, 47] como também aplicações na dinâmica de gases rarefeitos (RGD) [48, 52, 53].

A versão original do método de ordenadas discretas, introduzida na década de 40 por Wick [78] na resolução de problemas de transporte de nêutrons e, posteriormente, utilizada nos anos 50 por Chandrasekhar [27] em seus estudos de transferência radiativa, baseia-se na aproximação da integral angular do termo de espalhamento da LBE por uma quadratura numérica, transformando a equação integro-diferencial em um sistema de equações diferenciais, cujo tratamento pode ser feito através de abordagens numéricas e analíticas.

Dentre as abordagens numéricas mais recentes, pode-se destacar os chamados *métodos nodais*. Estes métodos são comumente utilizados na resolução de problemas multidimensionais onde, através da integração em cada uma das variáveis espaciais, decompõe-se o sistema de equações diferenciais parciais (obtido da discretização da integral angular) em sistemas de equações diferenciais ordinárias [3, 4, 6, 12].

Nos métodos nodais, em geral, além da integração transversal, costuma-se fazer também uma discretização das variáveis espaciais [30], buscando fazer uso de malhas que melhorem a eficiência e a precisão dos resultados. Estes métodos podem ser divididos em dois grupos: os métodos nodais polinomiais e os *métodos spectronodais* [13].

Nos métodos nodais polinomiais, uma expansão polinomial de baixa ordem é introduzida tanto para o fluxo angular ao longo das faces da célula da grade espacial (termo de fuga transversal) quanto para o fluxo angular médio no interior desta

célula espacial (termo de fonte de espalhamento). A identificação do método nodal depende do tipo de aproximação: por exemplo, CCN para o método nodal constante-constante [75], onde tanto o termo de fuga quanto o termo de fonte são aproximados por constantes; LLN para o método nodal linear-linear [31], onde tanto o termo de fonte quanto o termo de fuga são aproximados por polinômios de primeiro grau.

Já os métodos espectralnodais, desenvolvidos por Barros e Larsen na década de 90 [11], tem uma vantagem com relação aos métodos nodais tradicionais pois os termos referentes à fonte são tratados de forma explícita, introduzindo aproximações apenas para os termos de fuga transversal. Na literatura, os métodos espectralnodais também são classificados de acordo com a aproximação do termo de fuga: SGF-CN para o método espectralnodal constante [2, 12] e SGF-LN para o método espectralnodal linear [50].

Contudo, a principal limitação dos métodos nodais tradicionais é o fato de se trabalhar com grandezas médias, dificultando a avaliação de fluxos escalares de nêutrons em pontos específicos, fazendo com que sejam necessárias técnicas de interpolação ou, em casos mais extremos, um refinamento da malha computacional [30]. Outro fator importante a ser considerado é o fato dos métodos nodais utilizarem esquemas iterativos, significando um custo computacional mais elevado.

Para o tratamento analítico das equações em ordenadas discretas, existem algumas dificuldades numéricas inerentes como, por exemplo, o fato de ser necessário o cálculo de constantes de separação vinculados as raízes de polinômios característicos. Para contornar este problema, novas formulações têm sido propostas, dentre elas, encontra-se uma versão analítica do método de ordenadas discretas (método ADO [10]) e o método LTS_N [73].

No caso multidimensional, o método LTS_N [15, 80] pode ser associado aos métodos nodais a partir da integração transversal das equações em ordenadas discretas. Os sistemas de EDO's obtidos desta integração são reduzidos à sistemas

algébricos através do uso da transformada de Laplace. Este procedimento fornece soluções analíticas na variável espacial contudo, de acordo com [15], sua obtenção envolve o cálculo da inversa de matrizes mal-condicionadas.

O método ADO, proposto por Barichello e Siewert [10], apresenta algumas características que o tornam mais atrativo do ponto de vista computacional, por exemplo, por possibilitar o uso de esquemas de quadratura mais arbitrários (do tipo *half-range*), pela determinação das constantes de separação através de um problema de autovalores de ordem reduzida e pela solução ser escrita de forma analítica na variável espacial.

O método ADO também tem se mostrado uma ferramenta muito útil na resolução de problemas em RGD [79], principalmente pela possibilidade de se construir soluções de forma unificadas para diferentes modelos cinéticos, como por exemplo os modelos BGK [8], S [17, 57, 64], Gross-Jackson [39, 51] e MRS [37, 48]. Resultados satisfatórios também foram encontrados na resolução de problemas como o do fluxo de Poiseuille, “creep” térmico e fluxo de Couette e salto de temperatura baseados no modelo CES [58, 62], o problema de deslizamento viscoso com a aplicação do modelo CLF [19, 20, 56] e de problemas de misturas de gases baseados no modelo de McCormack [35, 63, 65, 66]. Destaca-se também o uso do método ADO na resolução de problemas de fluxo associados à diferentes condições de contorno [41, 42] e problemas relacionados à BE propriamente dita, sem a aplicação de equações modelo [59, 61].

Com base na performance que o método ADO tem mostrado na resolução de problemas unidimensionais, onde foram obtidas soluções precisas, analíticas na variável espacial, utilizando códigos de fácil implementação e a um baixo custo computacional, procurou-se com este trabalho estender a sua aplicabilidade à problemas multidimensionais.

Mesmo com a existência de códigos numéricos voltados para este tipo de problema, existe uma demanda muito grande por métodos mais eficientes, de caráter analítico, que proponham alternativas para o tratamento de dificuldades intrínsecas da LBE. Do ponto de vista computacional, através de expressões analíticas consegue-se reduzir o tempo de execução das rotinas e ajuda na validação dos códigos numéricos.

A versatilidade do método ADO, podendo ser associado aos métodos nodais e a capacidade de adaptação à diferentes esquemas de quadratura multidimensionais já existentes na literatura [44], motivaram o início deste trabalho, baseando-se na equação de transporte de nêutrons.

Para isto, escolheu-se trabalhar com problemas bidimensionais tidos como clássicos na literatura, chamados de problemas de *fonte fixa*, onde considerou-se que o meio material é não-multiplicativo e o espalhamento é isotrópico [71, 77]. Optou-se por esta classe de problemas por já existirem resultados na literatura gerados através de algumas abordagens e que servirão para a validação do método proposto aqui.

Em resumo, a abordagem proposta neste trabalho se enquadra na classe de métodos espectralnodais para o tratamento de problemas de transporte de nêutrons, uma vez que apenas o termo chamado de fuga transversal, relacionado aos fluxos angulares desconhecidos na fronteira do domínio, é aproximado. E para esta classe de problemas, comparativamente à abordagens disponíveis na literatura, contribui significativamente do ponto de vista da formulação matemática e computacional, uma vez que: as equações auxiliares são definidas de forma geral, os problemas de autovalores associados são de ordem reduzida à metade do que usualmente é considerado, reduzindo o tempo computacional e preservando a analiticidade na variável espacial.

Sendo assim, no capítulo 2 faz-se uma apresentação da classe de problemas que será resolvida, onde é apresentada a discretização para a variável angular e são

obtidas as equações nodais nas variáveis x e y . No capítulo 3, desenvolve-se a solução homogênea das equações nodais dos dois problemas unidimensionais. Neste capítulo também é mostrado que, com a escolha adequada da ordem das direções, é possível montar problemas de autovalores de tamanho reduzido.

Devido ao aparecimento de fluxos angulares definidos nas fronteiras do domínio e que são desconhecidos nas direções não-incidentes (o que costuma ocorrer nos métodos nodais devido ao processo de integração), propõe-se no capítulo 4 a aproximação destes termos através de equações auxiliares, escritas em termos das autofunções e das constantes de separação do problema homogêneo. Busca-se desta forma que estas expansões propostas aqui, sejam mais gerais e não utilizem parâmetros baseados em estimativas, podendo melhorar a representação dos fluxos nos contornos e assim, contribuir para a obtenção de resultados mais precisos.

No capítulo 5, tendo em vista que estas aproximações dos termos referentes aos contornos foram agrupados com o termo fonte, uma proposta de solução particular é desenvolvida através das funções de Green [9]. O acoplamento entre os dois problemas unidimensionais se dá apenas no sistema em que são obtidos os coeficientes das soluções homogêneas e das aproximações dos contornos.

Os resultados numéricos gerados no estudo de três problemas teste são apresentados no capítulo 6 e, no capítulo 7, algumas considerações finais são feitas.

Neste trabalho, também foram incluídos dois apêndices, sendo que o primeiro trata do esquema de quadratura utilizado para a discretização da variável angular. O Apêndice B corresponde a uma extensão do que foi trabalhado em Cabrera [18] e Barichello et al [7], afim de obter resultados para um dos problemas discutidos em Watanabe e Maynard [77].

2 EQUAÇÃO DE TRANSPORTE BIDIMENSIONAL EM ORDENADAS DISCRETAS

Buscando desenvolver uma formulação matemática para o tratamento da classe de problemas proposta neste trabalho, faz-se o uso de técnicas utilizadas na abordagem analítica do método de ordenadas discretas ADO.

Para isso, parte-se da equação de transporte bidimensional, na qual faz-se o uso de uma quadratura multidimensional aplicada à variável angular. Esta discretização é feita de forma que certas propriedades de simetria sejam satisfeitas.

2.1 Formulação matemática

Segundo Cabrera [18] e Duderstadt [33], um problema de transporte bidimensional, em geometria cartesiana, com espalhamento isotrópico e um grupo de energia, em regime estacionário, pode ser representado por

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \eta \frac{\partial}{\partial y} \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma_t(\mathbf{r}) \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = Q(\mathbf{r}) + \sigma_s(\mathbf{r}) \int_S \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}', \quad (2.1)$$

onde $\mathbf{r} = (x, y)$ representa o vetor posição espacial, $\boldsymbol{\Omega} = (\mu, \eta)$ corresponde ao vetor direção de propagação das partículas, $\sigma_t(\mathbf{r})$ e $\sigma_s(\mathbf{r})$ são, respectivamente, as seções de choque macroscópicas total e de espalhamento (nas próximas equações, a dependência espacial das seções de choque é omitida por serem constantes para todos os problemas teste escolhidos) e $Q(\mathbf{r})$ representa uma fonte isotrópica. O termo S que aparece na integral representa a região em que as direções estão sendo integradas (como este trabalho trata de problemas bidimensionais, S representa o círculo unitário). A versão completa desta equação pode ser vista em Lewis e Miller [44].

Baseado nesta equação, pretende-se trabalhar com problemas com domínio ilustrado pela Figura 2.1, sendo que o domínio delimitado pelo retângulo $[-b, b] \times [-d, d]$, interior a este retângulo há um retângulo menor $[-a, a] \times [-c, c]$, onde existe uma fonte $Q(\mathbf{r})$. Os fluxos angulares $\Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega})$, nas direções incidentes, são conhecidos.

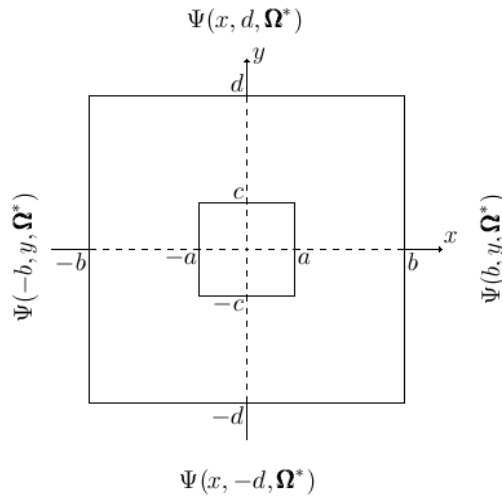


Figura 2.1: Geometria dos problemas bidimensionais.

Pressupondo que não há nenhuma contribuição externa para o fluxo de nêutrons no interior do domínio, usa-se o que se pode chamar de condições de contorno do tipo vácuo, ou seja, todos fluxos angulares incidentes são nulos. Assim

$$\Psi(x, -d, \mathbf{\Omega}^*) = 0, \quad (2.2)$$

$$\Psi(x, d, \mathbf{\Omega}^*) = 0, \quad (2.3)$$

$$\Psi(-b, y, \mathbf{\Omega}^*) = 0, \quad (2.4)$$

$$\Psi(b, y, \mathbf{\Omega}^*) = 0, \quad (2.5)$$

onde $\mathbf{\Omega}^*$ representa estas direções incidentes.

2.2 Discretização das direções

Uma vez definido o problema com que pretende-se trabalhar, a versão em ordenadas discretas da equação (2.1) depende basicamente da discretização do conjunto

de direções $\boldsymbol{\Omega} = (\mu, \eta)$. Esta discretização é feita a partir do uso de uma quadratura numérica que aproxima o termo integral por um somatório, relacionando um número finito de direções discretas $\boldsymbol{\Omega}_k = (\mu_k, \eta_k)$ à pesos w_k , ou seja

$$\int_S \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' \approx \sum_{k=1}^M w_k \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}_k). \quad (2.6)$$

Segundo Kock e Becker [43], a precisão desta quadratura dependerá do número de direções discretas empregadas, dos pesos, de como são escolhidos e da relação que há entre eles. Embora a escolha da quadratura possa ser arbitrária, restrições às direções $\boldsymbol{\Omega}_k$ e pesos w_k podem ser feitas de forma que certas propriedades de simetria possam ser satisfeitas.

De acordo com Lewis e Miller [44], outro fator importante para a simetria de uma quadratura é a sua invariância de rotação das direções discretas ao redor do centro da esfera unitária (no caso tridimensional) ou do centro do círculo unitário (no caso bidimensional). Dentre os tipos de quadraturas, pode-se citar a *Quadratura Simétrica de Nível* (também chamada de quadratura S_N), em que as direções são invariantes sob qualquer rotação de $\pi/2$ em torno do centro da esfera unitária.

Ainda segundo Lewis e Miller [44], as ordenadas discretas da quadratura S_N são dispostas em níveis (como na Figura 2.2), totalizando $N(N + 2)$ direções discretas na esfera unitária e, conseqüentemente, $N(N + 2)/8$ direções em cada octante.

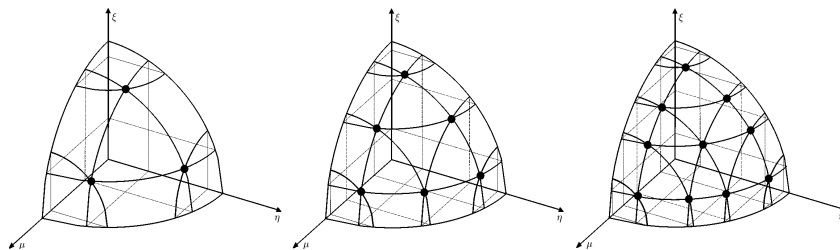


Figura 2.2: Quadratura simétrica de nível S_N para o caso tridimensional, usando $N=4, 6$ e 8 .

Outra propriedade da quadratura S_N é a de que, em geometrias cartesianas, o mesmo conjunto de direções e pesos também pode ser usado em problemas bidi-

mensionais (como na Figura 2.3), bastando desconsiderar a terceira componente do vetor direção [44]. Ao desprezar esta terceira coordenada, o número de direções passa a ser de $N(N + 2)/2$ no disco unitário.

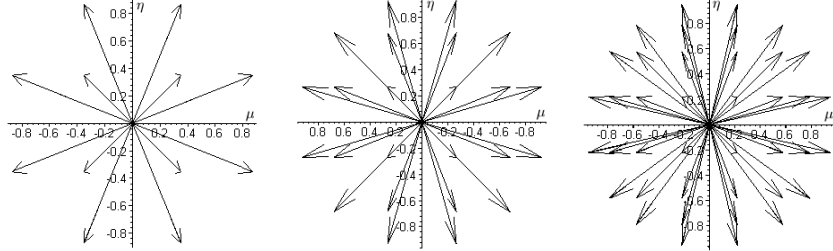


Figura 2.3: Quadratura simétrica de nível S_N para o caso bidimensional, usando $N=4, 6$ e 8 .

2.3 Problema de ordenadas discretas

Para a discretização da equação (2.1), fez-se o uso da quadratura S_N tabelada em Lewis e Miller [44] (também disponível no Apêndice A) onde o conjunto de direções discretas são representadas por $\mathbf{\Omega}_i = (\mu_i, \eta_i)$, com $\mu_i, \eta_i \in [-1, 1]$, para $i = 1, \dots, M$ e $M = N(N + 2)/2$.

Sendo assim, a versão em ordenadas discretas da equação (2.1) é dada por

$$\mu_i \frac{\partial}{\partial x} \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}_i) + \eta_i \frac{\partial}{\partial y} \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}_i) + \sigma_t \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}_i) = Q(\mathbf{r}) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^M w_k \Psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}_k). \quad (2.7)$$

Vale lembrar que os pesos w_k (associados as direções $\mathbf{\Omega}_k = (\mu_k, \eta_k)$) foram obtidos na literatura já normalizados, ou seja, para cada quadrante tem-se

$$\sum_k w_k = 1. \quad (2.8)$$

Por esta razão, como o termo integral da equação (2.1) representa a integração sob os quatro quadrantes, o fator $1/4$ deve aparecer multiplicando o somatório da equação (2.7).

Uma vez obtida a versão em ordenadas discretas da equação (2.1), o próximo passo é o desenvolvimento de uma técnica para resolver este problema com base no método ADO. Contudo, como este método foi primeiramente desenvolvido para a resolução de problemas unidimensionais, a equação (2.7) precisa ser convertida nas chamadas *equações nodais integradas transversalmente*, que são na verdade versões da equação (2.7) integradas nas variáveis espaciais x e y .

Dessa forma, multiplica-se a equação (2.7) por $1/2d$ e a integra-se em $y \in [-d, d]$, resultando um sistema de equações diferenciais ordinárias envolvendo fluxos angulares médios Ψ_y , cuja dependência espacial é apenas na variável x

$$\mu_i \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \Omega_i) + \frac{\eta_i}{2d} [\Psi(x, d, \Omega_i) - \Psi(x, -d, \Omega_i)] + \sigma_t \Psi_y(x, \Omega_i) = Q_y(x) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^M w_k \Psi_y(x, \Omega_k), \quad (2.9)$$

para $i = 1, \dots, M$, sendo

$$\Psi_y(x, \Omega_i) = \frac{1}{2d} \int_{-d}^d \Psi(\mathbf{r}, \Omega_i) dy \quad (2.10)$$

e

$$Q_y(x) = \frac{1}{2d} \int_{-d}^d Q(\mathbf{r}) dy. \quad (2.11)$$

De forma equivalente, multiplica-se a equação (2.7) por $1/2b$ e a integra-se em $x \in [-b, b]$, resultando também em um sistema de equações diferenciais ordinárias em termos de fluxos angulares médios Ψ_x , que dependem apenas da variável espacial y

$$\eta_i \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \Omega_i) + \frac{\mu_i}{2b} [\Psi(b, y, \Omega_i) - \Psi(-b, y, \Omega_i)] + \sigma_t \Psi_x(y, \Omega_i) = Q_x(y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^M w_k \Psi_x(y, \Omega_k), \quad (2.12)$$

também para $i = 1, \dots, M$, com

$$\Psi_x(y, \Omega_i) = \frac{1}{2b} \int_{-b}^b \Psi(\mathbf{r}, \Omega_i) dx \quad (2.13)$$

e

$$Q_x(y) = \frac{1}{2b} \int_{-b}^b Q(\mathbf{r}) dx. \quad (2.14)$$

Nas equações (2.9) e (2.12) nota-se que, devido a integração, além dos fluxos angulares médios, aparecem termos relacionados à fronteira. Segundo a definição das condições de contorno, estes termos são conhecidos apenas nas direções incidentes. Dessa forma, os sistemas passam a ter mais incógnitas do que equações, fazendo com que equações auxiliares sejam necessárias.

Como será visto no capítulo 4, estas equações auxiliares estão relacionadas à representação da solução dos problemas unidimensionais nos contornos.

2.4 Equação nodal: integração em y

Diferente de outros trabalhos que tratam das equação em ordenadas discretas como as equações (2.9) e (2.12), procurou-se aqui ordenar os pesos e direções da quadratura S_N . O padrão escolhido foi o de considerar que, para $i = 1, \dots, M/2$, os vetores $\mathbf{\Omega}_i$ representassem as direções de entrada do fluxo em uma determinada fronteira e que os vetores $\mathbf{\Omega}_{i+M/2}$ representassem as direções de saída do fluxo na fronteira oposta. Dessa forma, conseguiu-se subdividir cada uma das equações ((2.9) e (2.12)) em duas.

Assim, no caso do problema integrado em y , ordenou-se as direções de forma que para $i = 1, \dots, M/2$, tenha-se $\mathbf{\Omega}_i = (\mu_i, \eta_i)$ e $\mathbf{\Omega}_{i+M/2} = (-\mu_i, \eta_i)$. Com isto, a equação (2.9) passou a ser representada por

$$\begin{aligned} \mu_i \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_i) + \frac{\eta_i}{2d} [\Psi(x, d, \mathbf{\Omega}_i) - \Psi(x, -d, \mathbf{\Omega}_i)] + \\ + \sigma_i \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_i) = Q_y(x) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})] \end{aligned} \quad (2.15)$$

e

$$\begin{aligned}
& -\mu_i \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \Omega_{i+M/2}) + \frac{\eta_i}{2d} [\Psi(x, d, \Omega_{i+M/2}) - \Psi(x, -d, \Omega_{i+M/2})] + \\
& + \sigma_t \Psi_y(x, \Omega_{i+M/2}) = Q_y(x) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+M/2})], \quad (2.16)
\end{aligned}$$

para $i = 1, \dots, M/2$. A relevância da escolha desta ordenação das direções ficará mais evidente no decorrer do trabalho.

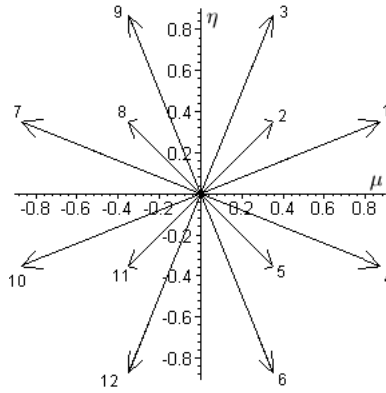


Figura 2.4: Conjunto de direções S_4 ordenado de forma apropriada para a equação nodal integrada em y .

Além disso, como parte da metodologia desenvolvida aqui (diferente do proposto por Barichello et al [6]), os termos referentes à fronteira que surgem da integração da equação (2.9) é incorporado à fonte, resultando em

$$\begin{aligned}
\mu_i \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \Omega_i) + \sigma_t \Psi_y(x, \Omega_i) &= \\
&= \left\{ Q_y(x) - \frac{\eta_i}{2d} [\Psi(x, d, \Omega_i) - \Psi(x, -d, \Omega_i)] \right\} + \\
&+ \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+M/2})] \quad (2.17)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
& -\mu_i \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \Omega_{i+M/2}) + \sigma_t \Psi_y(x, \Omega_{i+M/2}) = \\
& = \left\{ Q_y(x) - \frac{\eta_i}{2d} [\Psi(x, d, \Omega_{i+M/2}) - \Psi(x, -d, \Omega_{i+M/2})] \right\} + \\
& \quad + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+M/2})]. \quad (2.18)
\end{aligned}$$

Ou ainda

$$\begin{aligned}
& \mu_i \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \Omega_i) + \sigma_t \Psi_y(x, \Omega_i) = \\
& = \widehat{Q}_y(x, \Omega_i) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+M/2})] \quad (2.19)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
& -\mu_i \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \Omega_{i+M/2}) + \sigma_t \Psi_y(x, \Omega_{i+M/2}) = \\
& = \widehat{Q}_y(x, \Omega_{i+M/2}) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+M/2})], \quad (2.20)
\end{aligned}$$

para $i = 1, \dots, M/2$ se for considerado

$$\widehat{Q}_y(x, \Omega_i) = Q_y(x) - \frac{\eta_i}{2d} [\Psi(x, d, \Omega_i) - \Psi(x, -d, \Omega_i)], \quad (2.21)$$

$$\widehat{Q}_y(x, \Omega_{i+M/2}) = Q_y(x) - \frac{\eta_i}{2d} [\Psi(x, d, \Omega_{i+M/2}) - \Psi(x, -d, \Omega_{i+M/2})]. \quad (2.22)$$

As equações (2.19) e (2.20) são as *equações nodais* do problema integrado em y .

2.5 Equação nodal: integração em x

Da mesma forma que para o problema integrado em y , reordenando as direções do problema integrado em x de forma que, para $i = 1, \dots, M/2$, tenha-se $\Omega_i =$

(μ_i, η_i) e $\mathbf{\Omega}_{i+M/2} = (\mu_i, -\eta_i)$, consegue-se subdividir a equação (2.12) em

$$\eta_i \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_i) + \frac{\mu_i}{2b} [\Psi(b, y, \mathbf{\Omega}_i) - \Psi(-b, y, \mathbf{\Omega}_i)] + \sigma_t \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_i) =$$

$$Q_x(y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})] \quad (2.23)$$

e

$$-\eta_i \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + \frac{\mu_i}{2b} [\Psi(b, y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) - \Psi(-b, y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})] + \sigma_t \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) =$$

$$Q_x(y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})]. \quad (2.24)$$

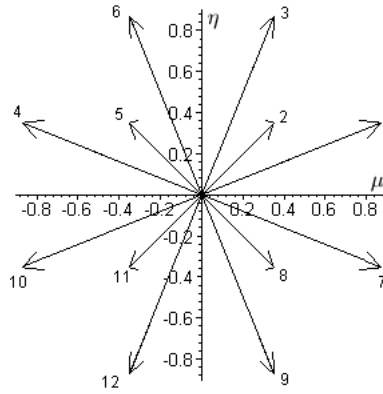


Figura 2.5: Conjunto de direções S_4 ordenado de forma apropriada para a equação nodal integrada em x .

Neste ponto um certo cuidado precisa ser tomado uma vez que, apesar de ter sido usada a mesma notação e os pontos e pesos da quadratura utilizada serem os mesmos para os problemas integrados em x e em y , isto não significa que a direção $\mathbf{\Omega}_i$ de um problema corresponda a direção $\mathbf{\Omega}_i$ do outro problema. Isto se deve ao fato de cada problema unidimensional utilizar um ordenamento diferente (ver Figuras 2.4 e 2.5). Apesar disto representar um aumento na dificuldade na implementação, contribuirá na obtenção da solução homogênea.

Agrupando os termos referentes aos contornos com o termo fonte nas equações (2.23) e (2.24) e considerando

$$\widehat{Q}_x(y, \boldsymbol{\Omega}_i) \equiv Q_x(y) - \frac{\mu_i}{2b} [\Psi(b, y, \boldsymbol{\Omega}_i) - \Psi(-b, y, \boldsymbol{\Omega}_i)], \quad (2.25)$$

$$\widehat{Q}_x(y, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) \equiv Q_x(y) - \frac{\mu_i}{2b} [\Psi(b, y, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) - \Psi(-b, y, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2})], \quad (2.26)$$

obtem-se, para $i = 1, \dots, M/2$, as *equações nodais* do problema integrado em x

$$\begin{aligned} \eta_i \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \boldsymbol{\Omega}_i) + \sigma_t \Psi_x(y, \boldsymbol{\Omega}_i) &= \\ &= \widehat{Q}_x(y, \boldsymbol{\Omega}_i) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_x(y, \boldsymbol{\Omega}_k) + \Psi_x(y, \boldsymbol{\Omega}_{k+M/2})] \end{aligned} \quad (2.27)$$

e

$$\begin{aligned} -\eta_i \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) + \sigma_t \Psi_x(y, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) &= \\ &= \widehat{Q}_x(y, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_x(y, \boldsymbol{\Omega}_k) + \Psi_x(y, \boldsymbol{\Omega}_{k+M/2})]. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Obtidas estas equações nodais integradas, o próximo passo é a resolução dos problemas unidimensionais. Nos próximos capítulos, uma proposta de resolução das partes homogênea e particular destes problemas é feita, bem como o tratamento das condições de contorno nas direções em que os fluxos angulares são desconhecidos.

3 SOLUÇÃO HOMOGÊNEA DOS PROBLEMAS NODAIS

No capítulo anterior, a partir da equação de transporte bidimensional, conseguiu-se gerar problemas unidimensionais, possibilitando o uso do método ADO para sua resolução. As soluções homogêneas obtidas através deste método são construídas em termos de *constantes de separação* e autofunções, definidas através de expressões envolvendo autovalores e autovetores.

3.1 Problema nodal integrado em y

Para resolver a parte homogênea das equações (2.19) e (2.20), propõe-se que as soluções tenham a forma

$$\Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_i) = \Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i)e^{-x/\nu}, \quad (3.1)$$

onde ν será a constante de separação associada à autofunção $\Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega})$.

Assim, substituindo a equação (3.1) nas equações (2.19) e (2.20) (sem o termo fonte) obtém-se

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\nu}\mu_i\Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i) + \sigma_t\Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i) &= \\ &= \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_k) + \Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})] \end{aligned} \quad (3.2)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{1}{\nu}\mu_i\Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + \sigma_t\Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) &= \\ &= \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_k) + \Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})], \end{aligned} \quad (3.3)$$

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

Baseado nas equações (3.2) e (3.3), verifica-se que a solução do problema homogêneo passa a depender basicamente de resolver um problema de autovalores. Dessa forma, se for considerado

$$U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i) = \Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i) + \Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}), \quad (3.4)$$

$$V_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i) = \Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i) - \Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}), \quad (3.5)$$

soma-se as equações (3.2) e (3.3), resultando em uma equação que relaciona U_y e V_y

$$-\frac{1}{\nu} \mu_i V_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i) + \sigma_t U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i) = \frac{\sigma_s}{2} \sum_{k=1}^{M/2} w_k U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_k), \quad (3.6)$$

para $i = 1, \dots, M/2$. Por outro lado, subtraindo a equação (3.2) da equação (3.3), também considerando as equações (3.4) e (3.5), obtém-se outra de relação entre U_y e V_y

$$V_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i) = \frac{1}{\nu} \frac{\mu_i}{\sigma_t} U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i). \quad (3.7)$$

Com estas duas expressões que relacionam U_y e V_y , substitui-se a equação (3.7) na equação (3.6), resultando em um problema de autovalores da forma

$$\frac{1}{\nu^2} U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i) = \frac{\sigma_t^2}{\mu_i^2} U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i) - \frac{\sigma_s \sigma_t}{2 \mu_i^2} \sum_{k=1}^{M/2} w_k U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_k), \quad (3.8)$$

para $i = 1, \dots, M/2$. A equação (3.8) também pode ser representada na forma matricial

$$[\mathbf{D}_y - \mathbf{A}_y] \mathbf{U}_y = \lambda_y \mathbf{U}_y, \quad (3.9)$$

onde \mathbf{U}_y representa um vetor de dimensão $M/2$ cujas componentes são $U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i)$ e os autovalores são da forma

$$\lambda_y = \frac{1}{\nu^2}. \quad (3.10)$$

As matrizes da equação (3.9) são definidas como

$$\mathbf{D}_y = \text{diag} \left\{ \left(\frac{\sigma_t}{\mu_1} \right)^2, \left(\frac{\sigma_t}{\mu_2} \right)^2, \dots, \left(\frac{\sigma_t}{\mu_{M/2}} \right)^2 \right\} \quad (3.11)$$

e

$$\mathbf{A}_y(i, k) = \frac{\sigma_t \sigma_s w_k}{2\mu_i^2}, \quad (3.12)$$

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

Resolvido o problema de autovalores e determinadas as $M/2$ constantes de separação ν_j , usa-se as equações (3.4) e (3.5) para definir as autofunções do problema homogêneo

$$\Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) = \frac{1}{2} [U_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) + V_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i)], \quad (3.13)$$

$$\Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \frac{1}{2} [U_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) - V_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i)]. \quad (3.14)$$

Com isto, observa-se que a partir de um problema que envolvia M equações, chega-se a um problema de autovalores de dimensão $M/2 \times M/2$. Isto ocorre pois o rearranjo das direções feito no capítulo 2 contribuiu para a construção de um problema de autovalores menor que fornece as constantes de separação aos pares $(\pm\nu_j)$. Esta técnica passa a ser mais relevante quando se trabalha com um número de direções muito grande.

Considerando apenas os valores ν_j positivos, a solução homogênea fica escrita na forma

$$\Psi_y^h(x, \mathbf{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^{M/2} A_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(b+x)/\nu_j} + A_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(b-x)/\nu_j} \quad (3.15)$$

e

$$\Psi_y^h(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} A_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(b+x)/\nu_j} + A_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(b-x)/\nu_j} \quad (3.16)$$

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

3.2 Problema nodal integrado em x

Seguindo o mesmo procedimento utilizado no problema integrado em y , propõe-se que a solução da parte homogênea das equações (2.27) e (2.28) também tenha a

forma

$$\Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_i) = \Phi_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_i)e^{-y/\gamma}, \quad (3.17)$$

onde γ será a constante de separação associada à autofunção $\Phi_x(\gamma, \mathbf{\Omega})$.

Assim, substitui-se a equação (3.17) nas partes homogêneas das equações (2.27) e (2.28), resultando em

$$\begin{aligned} -\frac{1}{\gamma}\eta_i\Phi_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_i) + \sigma_t\Phi_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_i) &= \\ &= \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Phi_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_k) + \Phi_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})] \end{aligned} \quad (3.18)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{1}{\gamma}\eta_i\Phi_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + \sigma_t\Phi_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) &= \\ &= \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Phi_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_k) + \Phi_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})], \end{aligned} \quad (3.19)$$

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

Como pode ser visto nas equações (3.18) e (3.19), novamente a solução do problema homogêneo está vinculado a resolução de um problema de autovalores. Dessa forma, considerando

$$U_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_i) = \Phi_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_i) + \Phi_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}), \quad (3.20)$$

$$V_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_i) = \Phi_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_i) - \Phi_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}), \quad (3.21)$$

soma-se e subtrai-se as equações (3.18) e (3.19), resultando em duas expressões que relacionam U_x com V_x

$$-\frac{1}{\gamma}\eta_i V_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_i) + \sigma_t U_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_i) = \frac{\sigma_s}{2} \sum_{k=1}^{M/2} w_k U_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_k) \quad (3.22)$$

e

$$V_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_i) = \frac{1}{\gamma} \frac{\eta_i}{\sigma_t} U_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_i). \quad (3.23)$$

Agora, substituindo a equação (3.23) na equação (3.22), obtém-se o problema de autovalores na forma

$$\frac{1}{\gamma^2} U_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_i) = \frac{\sigma_t^2}{\eta_i^2} U_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_i) - \frac{\sigma_s \sigma_t}{2\eta_i^2} \sum_{k=1}^{M/2} w_k U_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_k), \quad (3.24)$$

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

A equação (3.24) também pode ser expressa em uma forma matricial, dada por

$$[\mathbf{D}_x - \mathbf{A}_x] \mathbf{U}_x = \lambda_x \mathbf{U}_x, \quad (3.25)$$

onde \mathbf{U}_x será um vetor de dimensão $M/2$, cujas componentes são $U_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_i)$ e as constantes de separação são obtidas através da relação

$$\lambda_x = \frac{1}{\gamma^2}. \quad (3.26)$$

As matrizes envolvidas são definidas por

$$\mathbf{D}_x = \text{diag} \left\{ \left(\frac{\sigma_t}{\eta_1} \right)^2, \left(\frac{\sigma_t}{\eta_2} \right)^2, \dots, \left(\frac{\sigma_t}{\eta_{M/2}} \right)^2 \right\} \quad (3.27)$$

e

$$\mathbf{A}_x(i, k) = \frac{\sigma_t \sigma_s w_k}{2\eta_i^2}, \quad (3.28)$$

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

Determinados os autovalores e, conseqüentemente, as constantes de separação γ_j , usa-se as equações (3.20) e (3.21) para definir as autofunções do problema homogêneo

$$\Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_i) = \frac{1}{2} [U_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_i) + V_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_i)], \quad (3.29)$$

$$\Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \frac{1}{2} [U_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_i) - V_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_i)]. \quad (3.30)$$

Novamente, devido ao rearranjo das direções feito no capítulo 2, foi possível obter um problema de autovalores de dimensão $M/2$ partindo de um sistema de M equações.

Além disso, por causa da forma com que o problema de autovalores foi construído, as constantes de separação também são obtidas aos pares $(\pm\gamma_j)$.

Assim, considerando apenas os valores γ_j positivos, a solução homogênea do problema integrado em x é dada por

$$\Psi_x^h(y, \mathbf{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^{M/2} B_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(d+y)/\gamma_j} + B_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(d-y)/\gamma_j} \quad (3.31)$$

e

$$\Psi_x^h(y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} B_j \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(d+y)/\gamma_j} + B_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(d-y)/\gamma_j} \quad (3.32)$$

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

Resolvidos os problemas de autovalores e obtidas as expressões para as soluções homogêneas, o próximo passo será obter as soluções particulares. Contudo, uma vez que as fontes dos problemas nodais possuem termos referentes à fronteira que não são conhecidos em todas as direções discretas, passou a ser necessário o uso de equações auxiliares para representar as condições de contorno nas direções não-incidentes.

4 FLUXOS NO CONTORNO: EXPANSÃO EM AUTOFUNÇÕES

Como foi visto anteriormente, no processo de obtenção das equações nodais integradas, surgiram termos referentes aos contornos que só são conhecidos nas direções incidentes. Para contornar este problema, existem na literatura algumas propostas de aproximação dos fluxos angulares nas direções não-incidentes, dentre elas, as apresentadas por Biasotto [15], Barichello et al [6] e Cabrera [18].

Em Barichello et al [6], considerou-se que os fluxos angulares no contorno eram proporcionais aos fluxos angulares médios, ou seja,

$$\Psi(x, d, \mathbf{\Omega}_i) = \widehat{K}_1 \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_i), \quad (4.1)$$

$$\Psi(x, -d, \mathbf{\Omega}_i) = \widehat{K}_2 \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_i), \quad (4.2)$$

$$\Psi(b, y, \mathbf{\Omega}_i) = \widehat{L}_1 \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_i), \quad (4.3)$$

$$\Psi(-b, y, \mathbf{\Omega}_i) = \widehat{L}_2 \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_i). \quad (4.4)$$

Com o uso destas expressões, estes termos aproximados são incorporados à porção homogênea do problema e, conseqüentemente, tem uma certa contribuição no problema de autovalores e na obtenção das constantes de separação. A formulação do método ADO usando estas aproximações pode ser vista no Apêndice B, onde faz-se uma extensão do trabalho de Cabrera [18].

Contudo, a definição *a priori* destes coeficientes de proporcionalidade tornou-se inconveniente, principalmente pelo fato de ser atribuído um mesmo fator à várias direções.

No caso da formulação apresentada por Biasotto [15], seguiu-se os trabalhos de Mello [46] e Zabadal [80], onde é proposto que os termos referentes aos contornos sejam agrupados com a fonte e, com base em conceitos físicos, aproxima-se os fluxos

angulares não-incidentes por funções exponenciais, tais que

$$\Psi(x, 0, \mathbf{\Omega}_i) = F_i e^{-\text{sign}(\mu_i)\lambda_x}, \quad (4.5)$$

$$\Psi(x, d, \mathbf{\Omega}_i) = H_i e^{-\text{sign}(\mu_i)\lambda_x}, \quad (4.6)$$

$$\Psi(0, y, \mathbf{\Omega}_i) = G_i e^{-\text{sign}(\eta_i)\lambda_y}, \quad (4.7)$$

$$\Psi(b, y, \mathbf{\Omega}_i) = I_i e^{-\text{sign}(\eta_i)\lambda_y}, \quad (4.8)$$

onde

$$\text{sign}(\mu) = \begin{cases} 1 & \mu \geq 0 \\ -1 & \mu < 0 \end{cases}. \quad (4.9)$$

A chamada *constante de decaimento* λ que aparece nas equações (4.5) à (4.8) é definida *a priori* através de expressões específicas, associadas a parâmetros que caracterizam o meio.

Já na abordagem proposta por Cabrera [18], os elementos relativos aos contornos também são incorporados à fonte e, nas direções não-incidentes, aproximou-se os fluxos angulares por constantes dependentes apenas da direção, ou seja,

$$\Psi(x, d, \mathbf{\Omega}_i) = H_i, \quad (4.10)$$

$$\Psi(x, -d, \mathbf{\Omega}_i) = F_i, \quad (4.11)$$

$$\Psi(-b, y, \mathbf{\Omega}_i) = G_i, \quad (4.12)$$

$$\Psi(b, y, \mathbf{\Omega}_i) = I_i. \quad (4.13)$$

Com estas aproximações, foram obtidas expressões para as soluções particulares que, juntamente com a formulação das soluções homogêneas, consegue-se construir um sistema no qual todos os coeficientes são determinados. A principal vantagem desta abordagem é a de não haver necessidade de determinar empiricamente quaisquer parâmetros.

Assim, a partir das técnicas apresentadas acima, o procedimento adotado aqui foi o de, além de incorporar os termos referentes aos contornos à fonte, aproximar

estes termos nas direções desconhecidas por funções do tipo exponenciais, tendo em vista a forma geral conhecida das soluções unidimensionais de transporte.

As aproximações escolhidas são da forma

$$\begin{aligned} \Psi(x, -d, \mathbf{\Omega}_i) &= \\ &= \sum_{k=1}^{M/2} \left\{ E_k \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(b+x)/\nu_k} + E_{k+M/2} \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(b-x)/\nu_k} \right\}, \end{aligned} \quad (4.14)$$

$$\begin{aligned} \Psi(x, -d, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) &= \\ &= \sum_{k=1}^{M/2} \left\{ E_k \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(b+x)/\nu_k} + E_{k+M/2} \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(b-x)/\nu_k} \right\}, \end{aligned} \quad (4.15)$$

$$\begin{aligned} \Psi(x, d, \mathbf{\Omega}_i) &= \\ &= \sum_{k=1}^{M/2} \left\{ F_k \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(b+x)/\nu_k} + F_{k+M/2} \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(b-x)/\nu_k} \right\} \end{aligned} \quad (4.16)$$

e

$$\begin{aligned} \Psi(x, d, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) &= \\ &= \sum_{k=1}^{M/2} \left\{ F_k \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(b+x)/\nu_k} + F_{k+M/2} \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(b-x)/\nu_k} \right\}, \end{aligned} \quad (4.17)$$

para o problema nodal integrado em y e

$$\begin{aligned} \Psi(-b, y, \mathbf{\Omega}_i) &= \\ &= \sum_{k=1}^{M/2} \left\{ G_k \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(d+y)/\gamma_k} + G_{k+M/2} \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(d-y)/\gamma_k} \right\}, \end{aligned} \quad (4.18)$$

$$\begin{aligned} \Psi(-b, y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) &= \\ &= \sum_{k=1}^{M/2} \left\{ G_k \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(d+y)/\gamma_k} + G_{k+M/2} \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(d-y)/\gamma_k} \right\}, \end{aligned} \quad (4.19)$$

$$\begin{aligned} \Psi(b, y, \mathbf{\Omega}_i) &= \\ &= \sum_{k=1}^{M/2} \left\{ H_k \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(d+y)/\gamma_k} + H_{k+M/2} \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(d-y)/\gamma_k} \right\} \quad (4.20) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \Psi(b, y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) &= \\ &= \sum_{k=1}^{M/2} \left\{ H_k \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(d+y)/\gamma_k} + H_{k+M/2} \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(d-y)/\gamma_k} \right\}, \quad (4.21) \end{aligned}$$

para o problema nodal integrado em x .

Este tipo de aproximação, baseada em expansões em termos das constantes de separação e autofunções do problema homogêneo, foi empregada pois acredita-se que, utilizando uma forma mais geral, consegue-se uma melhor representação dos fluxos nos contornos. Outro ponto importante é que, seguindo esta metodologia, nenhum parâmetro terá de ser definido *a priori*. Porém, isto resulta na construção de um sistema mais complexo para a determinação dos coeficientes.

Por fim, definidas as equações auxiliares para o tratamento dos contornos nas direções desconhecidas e conhecendo os fluxos nas direções incidentes, o próximo passo será encontrar as expressões para as soluções particulares.

5 SOLUÇÃO PARTICULAR

Para determinar as soluções particulares dos problemas nodais unidimensionais, utilizou-se a formulação apresentada por Barichello et al [9], adaptada à metodologia desenvolvida aqui, considerando o caso de autovalores repetidos.

5.1 Caracterização dos termos fonte

Buscando fazer uma validação do método ADO que está sendo proposto neste trabalho, procurou-se resolver alguns problemas ditos clássicos na literatura por já terem sido resolvidos através de outras abordagens. Nos problemas escolhidos, algumas características são comuns como, por exemplo, fonte constante isotrópica e condições de contorno de incidência do tipo vácuo. Sendo assim, considera-se

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

e

$$\Psi(x, d, \mathbf{\Omega}_i) = 0, \quad i = M/4 + 1, \dots, M/2 \quad \text{e} \quad i = 3M/4 + 1, \dots, M, \quad (5.2)$$

$$\Psi(x, -d, \mathbf{\Omega}_i) = 0, \quad i = 1, \dots, M/4 \quad \text{e} \quad i = M/2 + 1, \dots, 3M/4, \quad (5.3)$$

$$\Psi(b, y, \mathbf{\Omega}_i) = 0, \quad i = M/4 + 1, \dots, M/2 \quad \text{e} \quad i = 3M/4 + 1, \dots, M, \quad (5.4)$$

$$\Psi(-b, y, \mathbf{\Omega}_i) = 0, \quad i = 1, \dots, M/4 \quad \text{e} \quad i = M/2 + 1, \dots, 3M/4. \quad (5.5)$$

Novamente, vale lembrar que as direções $\mathbf{\Omega}_i$ referentes ao problema integrado em y não correspondem necessariamente as mesmas direções $\mathbf{\Omega}_i$ usadas no problema integrado em x .

Partindo da equação (5.1), utiliza-se as equações (2.11) e (2.14), resultando em

$$Q_y(x) = \begin{cases} c/d & , \text{ para } x \in [-a, a] \\ 0 & , \text{ caso contrário} \end{cases} \quad (5.6)$$

e

$$Q_x(y) = \begin{cases} a/b & , \text{ para } y \in [-c, c] \\ 0 & , \text{ caso contrário} \end{cases} . \quad (5.7)$$

Além disso, lembrando que as equações (4.14) à (4.17) são usadas nas equações (2.21) e (2.22), juntamente com as condições (5.2) e (5.3), obtém-se como termo fonte para o problema integrado em y

$$\begin{aligned} \widehat{Q}_y(x, \boldsymbol{\Omega}_i) &= Q_y(x) - \frac{\eta_i}{2d} \times \\ &\times \sum_{k=1}^{M/2} \{ F_k \Phi_y(\nu_k, \boldsymbol{\Omega}_i) e^{-(b+x)/\nu_k} + F_{k+M/2} \Phi_y(\nu_k, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(b-x)/\nu_k} \} , \quad (5.8) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \widehat{Q}_y(x, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/4}) &= Q_y(x) + \frac{\eta_{i+M/4}}{2d} \times \\ &\times \sum_{k=1}^{M/2} \{ E_k \Phi_y(\nu_k, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/4}) e^{-(b+x)/\nu_k} + E_{k+M/2} \Phi_y(\nu_k, \boldsymbol{\Omega}_{i+3M/4}) e^{-(b-x)/\nu_k} \} , \quad (5.9) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \widehat{Q}_y(x, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) &= Q_y(x) - \frac{\eta_i}{2d} \times \\ &\times \sum_{k=1}^{M/2} \{ F_k \Phi_y(\nu_k, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(b+x)/\nu_k} + F_{k+M/2} \Phi_y(\nu_k, \boldsymbol{\Omega}_i) e^{-(b-x)/\nu_k} \} , \quad (5.10) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \widehat{Q}_y(x, \boldsymbol{\Omega}_{i+3M/4}) &= Q_y(x) + \frac{\eta_{i+M/4}}{2d} \times \\ &\times \sum_{k=1}^{M/2} \{ E_k \Phi_y(\nu_k, \boldsymbol{\Omega}_{i+3M/4}) e^{-(b+x)/\nu_k} + E_{k+M/2} \Phi_y(\nu_k, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/4}) e^{-(b-x)/\nu_k} \} , \quad (5.11) \end{aligned}$$

para $i = 1, \dots, M/4$. De forma equivalente, usando as equações (4.18) à (4.21) nas equações (2.25) e (2.26), juntamente com as condições (5.4) e (5.5), chega-se ao termo fonte do problema integrado em x

$$\begin{aligned} \widehat{Q}_x(y, \boldsymbol{\Omega}_i) &= Q_x(y) - \frac{\mu_i}{2b} \times \\ &\times \sum_{k=1}^{M/2} \{ H_k \Phi_x(\gamma_k, \boldsymbol{\Omega}_i) e^{-(d+y)/\gamma_k} + H_{k+M/2} \Phi_x(\gamma_k, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(d-y)/\gamma_k} \} , \quad (5.12) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \widehat{Q}_x(y, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/4}) &= Q_x(y) + \frac{\mu_{i+M/4}}{2b} \\ &\times \sum_{k=1}^{M/2} \left\{ G_k \Phi_x(\gamma_k, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/4}) e^{-(d+y)/\gamma_k} + G_{k+M/2} \Phi_x(\gamma_k, \boldsymbol{\Omega}_{i+3M/4}) e^{-(d-y)/\gamma_k} \right\}, \end{aligned} \quad (5.13)$$

$$\begin{aligned} \widehat{Q}_x(y, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) &= Q_x(y) - \frac{\mu_i}{2b} \times \\ &\times \sum_{k=1}^{M/2} \left\{ H_k \Phi_x(\gamma_k, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(d+y)/\gamma_k} + H_{k+M/2} \Phi_x(\gamma_k, \boldsymbol{\Omega}_i) e^{-(d-y)/\gamma_k} \right\}, \end{aligned} \quad (5.14)$$

$$\begin{aligned} \widehat{Q}_x(y, \boldsymbol{\Omega}_{i+3M/4}) &= Q_x(y) + \frac{\mu_{i+M/4}}{2b} \times \\ &\times \sum_{k=1}^{M/2} \left\{ G_k \Phi_x(\gamma_k, \boldsymbol{\Omega}_{i+3M/4}) e^{-(d+y)/\gamma_k} + G_{k+M/2} \Phi_x(\gamma_k, \boldsymbol{\Omega}_{i+M/4}) e^{-(d-y)/\gamma_k} \right\}, \end{aligned} \quad (5.15)$$

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

Definidos os termos fonte, o próximo passo será a dedução das soluções particulares.

5.2 Solução particular via função de Green

Segundo Barichello et al [9], escolheu-se mostrar apenas o desenvolvimento da solução particular para o problema integrado em y , pois o procedimento usado para o problema integrado em x é análogo. Sendo assim, considerando $G(x, \boldsymbol{\Omega}_i : \tau, \boldsymbol{\Omega}_\alpha)$ como sendo o fluxo angular de nêutrons em $(x, \boldsymbol{\Omega}_i)$ vindo de τ com direção $\boldsymbol{\Omega}_\alpha$, a função de Green é definida como sendo a solução de

$$\begin{aligned} \mu_i \frac{d}{dx} G(x, \boldsymbol{\Omega}_i : \tau, \boldsymbol{\Omega}_\alpha) + \sigma_t G(x, \boldsymbol{\Omega}_i : \tau, \boldsymbol{\Omega}_\alpha) &= \\ = \delta(x - \tau) \delta_{i,\alpha} + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k \left[G(x, \boldsymbol{\Omega}_k : \tau, \boldsymbol{\Omega}_\alpha) + G(x, \boldsymbol{\Omega}_{k+M/2} : \tau, \boldsymbol{\Omega}_\alpha) \right] \end{aligned} \quad (5.16)$$

e

$$\begin{aligned} & -\mu_i \frac{d}{dx} G(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2} : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) + \sigma_t G(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2} : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) = \\ & = \delta(x - \tau) \delta_{i+M/2, \alpha} + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [G(x, \mathbf{\Omega}_k : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) + G(x, \mathbf{\Omega}_{k+M/2} : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha)], \end{aligned} \quad (5.17)$$

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

Assim, quando $x = \tau$ e $\mathbf{\Omega}_i = \mathbf{\Omega}_\alpha$ (que corresponde ao local da fonte) existe uma descontinuidade (ou salto). Esta *condição de salto* pode ser obtida através da integração das equações (5.16) e (5.17) em $x \in (\tau - \epsilon, \tau + \epsilon)$.

Feito isto, as condições de salto são dadas por

$$\mu_i \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \{G(\tau + \epsilon, \mathbf{\Omega}_i : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) - G(\tau - \epsilon, \mathbf{\Omega}_i : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha)\} = \delta_{i, \alpha} \quad (5.18)$$

e

$$-\mu_i \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \{G(\tau + \epsilon, \mathbf{\Omega}_{i+M/2} : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) - G(\tau - \epsilon, \mathbf{\Omega}_{i+M/2} : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha)\} = \delta_{i+M/2, \alpha}, \quad (5.19)$$

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

Combinando estas condições de salto com as soluções da equação homogênea obtida no capítulo 3, é possível construir a função de Green. Lembrando que as constantes de separação foram obtidas aos pares $(\pm \nu_j)$, de forma que as autofunções $\Phi(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i)$ estão relacionadas às constantes de separação positivas e $\Phi(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})$ são referentes as constantes de separação negativas, propõe-se que a função de Green seja expressa como

$$G(x, \mathbf{\Omega}_i : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) = \sum_{j=1}^{M/2} A_{j, \alpha} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(x-\tau)/\nu_j}, \quad x > \tau, \quad (5.20)$$

$$G(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2} : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) = \sum_{j=1}^{M/2} A_{j, \alpha} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(x-\tau)/\nu_j}, \quad x > \tau \quad (5.21)$$

e

$$G(x, \mathbf{\Omega}_i : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) = - \sum_{j=1}^{M/2} A_{j+M/2, \alpha} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(\tau-x)/\nu_j}, \quad x < \tau, \quad (5.22)$$

$$G(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2} : \tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) = - \sum_{j=1}^{M/2} A_{j+M/2, \alpha} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(\tau-x)/\nu_j}, \quad x < \tau, \quad (5.23)$$

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

Então, substituindo as equações (5.20) à (5.23) nas equações (5.18) e (5.19) e fazendo $\epsilon \rightarrow 0$, encontra-se

$$\mu_i \sum_{j=1}^{M/2} \{A_{j, \alpha} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) + A_{j+M/2, \alpha} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})\} = \delta_{i, \alpha} \quad (5.24)$$

e

$$-\mu_i \sum_{j=1}^{M/2} \{A_{j, \alpha} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + A_{j+M/2, \alpha} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i)\} = \delta_{i+M/2, \alpha}. \quad (5.25)$$

Apartir do sistema descrito pelas equações (5.24) e (5.25), consegue-se determinar os coeficientes $A_{j, \alpha}$. Em Barichello et al [9] usou-se propriedades de ortogonalidade para encontrar expressões que definem os termos $A_{j, \alpha}$. Contudo, nos casos estudados neste trabalho, pela ocorrência de constantes de separação repetidas, não é possível usar a ortogonalidade das autofunções. A saída encontrada foi calcular $A_{j, \alpha}$ numericamente.

Durante a montagem do sistema, verificou-se que as componentes $A_{j, \alpha}$ podem ser obtidas através da seguinte matriz em blocos

$$\begin{bmatrix} [A_{j, \alpha}] \\ [A_{j+M/2, \alpha}] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [\mu_i \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i)] & [\mu_i \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})] \\ [-\mu_i \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})] & [-\mu_i \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i)] \end{bmatrix}^{-1}, \quad (5.26)$$

para $i = 1, \dots, M/2$, $j = 1, \dots, M/2$ e $\alpha = 1, \dots, M$. Apesar da equação (5.26) ter sido escrita com a notação de inversa, $A_{j, \alpha}$ foram obtidas através da resolução de sistemas lineares.

Determinadas as componentes $A_{j,\alpha}$, pode-se estimar as equações (5.20) à (5.23) e expressar a solução particular do problema integrado em y como

$$\Psi_y^p(x, \mathbf{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^{M/2} \{A_j(x)\Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) + A_{j+M/2}(x)\Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})\} \quad (5.27)$$

e

$$\Psi_y^p(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} \{A_j(x)\Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + A_{j+M/2}(x)\Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i)\}, \quad (5.28)$$

onde

$$A_j(x) = \int_{-b}^x \left\{ \sum_{\alpha=1}^M \widehat{Q}_y(\tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) A_{j,\alpha} \right\} e^{-(x-\tau)/\nu_j} d\tau \quad (5.29)$$

e

$$A_{j+M/2}(x) = - \int_x^b \left\{ \sum_{\alpha=1}^M \widehat{Q}_y(\tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) A_{j+M/2,\alpha} \right\} e^{-(\tau-x)/\nu_j} d\tau. \quad (5.30)$$

No caso do problema integrado em x , também ter-se-ia

$$\Psi_x^p(y, \mathbf{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^{M/2} \{B_j(y)\Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_i) + B_{j+M/2}(y)\Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})\} \quad (5.31)$$

e

$$\Psi_x^p(y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} \{B_j(y)\Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + B_{j+M/2}(y)\Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_i)\} \quad (5.32)$$

como solução particular, onde

$$B_j(y) = \int_{-d}^y \left\{ \sum_{\alpha=1}^M \widehat{Q}_x(\tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) B_{j,\alpha} \right\} e^{-(y-\tau)/\gamma_j} d\tau \quad (5.33)$$

e

$$B_{j+M/2}(y) = - \int_y^d \left\{ \sum_{\alpha=1}^M \widehat{Q}_x(\tau, \mathbf{\Omega}_\alpha) B_{j+M/2,\alpha} \right\} e^{-(\tau-y)/\gamma_j} d\tau \quad (5.34)$$

e cujas componentes $B_{j,\alpha}$ são determinadas através da matriz em blocos dada por

$$\begin{bmatrix} [B_{j,\alpha}] \\ [B_{j+M/2,\alpha}] \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [\eta_i \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_i)] & [\eta_i \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})] \\ [-\eta_i \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})] & [-\eta_i \Phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_i)] \end{bmatrix}^{-1}, \quad (5.35)$$

para $i = 1, \dots, M/2$, $j = 1, \dots, M/2$ e $\alpha = 1, \dots, M$. Apesar da notação de inversa utilizada na equação (5.35), $B_{j,\alpha}$ também foram obtidos através da resolução de sistemas lineares.

Uma vez definidas as expressões para as soluções homogêneas e particulares, a solução geral dos problemas pode ser escrita na forma

$$\Psi_y(x, \Omega_i) = \Psi_y^h(x, \Omega_i) + \Psi_y^p(x, \Omega_i) \quad (5.36)$$

e

$$\Psi_x(y, \Omega_i) = \Psi_x^h(y, \Omega_i) + \Psi_x^p(y, \Omega_i), \quad (5.37)$$

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

Contudo, nota-se que tanto nas expressões para a solução homogênea quanto nas parcelas da fonte que contém às aproximações dos contornos, aparecem coeficientes que ainda não foram determinados. Estes coeficientes são obtidos a partir de um sistema montado usando as condições de contorno conhecidas e relacionando a solução geral com as aproximações dos contornos.

5.3 Cálculo dos coeficientes

Para determinar os $6M$ coeficientes necessários para expressar completamente as soluções dos problemas integrados, monta-se um sistema em que são usadas as condições de contorno de incidência dadas pelas equações (5.2) à (5.5), as aproximações dos contornos definidas nas equações (4.14) à (4.21), e a relação que há entre estas aproximações dos contornos e as soluções dos problemas integrados nestes contornos.

É apenas nesta etapa do processo em que há o acoplamento dos problemas integrados nas variáveis x e y e, por este motivo, alguns cuidados são necessários, como por exemplo, o uso tanto das aproximações dos contornos quanto das condições

de contorno de incidência em suas formas integradas e o cuidado com a associação das direções $\mathbf{\Omega}_i$ entre os 2 problemas. Esta associação pode ser melhor vista na Tabela 5.1.

Tabela 5.1: Relação entre as direções $\mathbf{\Omega}_i$ usadas nos problemas integrados.

| Problema integrado em y | Problema integrado em x |
|----------------------------|----------------------------|
| $i = 1, \dots, M/4$ | $i = 1, \dots, M/4$ |
| $i = M/4 + 1, \dots, M/2$ | $i = M/2 + 1, \dots, 3M/4$ |
| $i = M/2 + 1, \dots, 3M/4$ | $i = M/4 + 1, \dots, M/2$ |
| $i = 3M/4 + 1, \dots, M$ | $i = 3M/4 + 1, \dots, M$ |

Para trabalhar com as condições de contorno de incidência, é necessário tê-las escritas na forma integrada. Sendo assim, multiplica-se as equações (5.2) e (5.3) por $1/2b$ e integra-se em $x \in [-b, b]$, resultando em

$$\Psi_x(d, \mathbf{\Omega}_i) = 0, \quad i = M/4 + 1, \dots, M/2 \text{ e } i = 3M/4 + 1, \dots, M, \quad (5.38)$$

e

$$\Psi_x(-d, \mathbf{\Omega}_i) = 0, \quad i = 1, \dots, M/4 \text{ e } i = M/2 + 1, \dots, 3M/4. \quad (5.39)$$

Também multiplica-se as equações (5.4) e (5.5) por $1/2d$ e integra-se em $y \in [-d, d]$, obtendo

$$\Psi_y(b, \mathbf{\Omega}_i) = 0, \quad i = M/4 + 1, \dots, M/2 \text{ e } i = 3M/4 + 1, \dots, M \quad (5.40)$$

e

$$\Psi_y(-b, \mathbf{\Omega}_i) = 0, \quad i = 1, \dots, M/4 \text{ e } i = M/2 + 1, \dots, 3M/4. \quad (5.41)$$

O mesmo precisa ser feito com relação as aproximações dos contornos pois, nas direções de incidência, as aproximações dos contornos precisam ser iguais as condições de incidência. Assim, a versão integrada das equações (4.14) à (4.21) são

$$\begin{aligned} \Psi_x(-d, \mathbf{\Omega}_i) &= \\ &= \frac{1}{2b} \sum_{k=1}^{M/2} \nu_k (1 - e^{-2b/\nu_k}) \{E_k \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_i) + E_{k+M/2} \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})\}, \quad (5.42) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Psi_x(-d, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) &= \\
&= \frac{1}{2b} \sum_{k=1}^{M/2} \nu_k (1 - e^{-2b/\nu_k}) \{E_k \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + E_{k+M/2} \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_i)\}, \quad (5.43)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Psi_x(d, \mathbf{\Omega}_i) &= \\
&= \frac{1}{2b} \sum_{k=1}^{M/2} \nu_k (1 - e^{-2b/\nu_k}) \{F_k \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_i) + F_{k+M/2} \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})\}, \quad (5.44)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Psi_x(d, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) &= \\
&= \frac{1}{2b} \sum_{k=1}^{M/2} \nu_k (1 - e^{-2b/\nu_k}) \{F_k \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + F_{k+M/2} \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_i)\}, \quad (5.45)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Psi_y(-b, \mathbf{\Omega}_i) &= \\
&= \frac{1}{2d} \sum_{k=1}^{M/2} \gamma_k (1 - e^{-2d/\gamma_k}) \{G_k \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_i) + G_{k+M/2} \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})\}, \quad (5.46)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Psi_y(-b, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) &= \\
&= \frac{1}{2d} \sum_{k=1}^{M/2} \gamma_k (1 - e^{-2d/\gamma_k}) \{G_k \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + G_{k+M/2} \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_i)\}, \quad (5.47)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\Psi_y(b, \mathbf{\Omega}_i) &= \\
&= \frac{1}{2d} \sum_{k=1}^{M/2} \gamma_k (1 - e^{-2d/\gamma_k}) \{H_k \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_i) + H_{k+M/2} \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})\} \quad (5.48)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\Psi_y(b, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) &= \\
&= \frac{1}{2d} \sum_{k=1}^{M/2} \gamma_k (1 - e^{-2d/\gamma_k}) \{H_k \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + H_{k+M/2} \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_i)\}, \quad (5.49)
\end{aligned}$$

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

Agora, relacionando as equações (5.38) à (5.41) com as equações (5.42) à (5.49) chegamos à

$$\sum_{k=1}^{M/2} \nu_k (1 - e^{-2b/\nu_k}) \{E_k \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_i) + E_{k+M/2} \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})\} = 0, \quad (5.50)$$

$$\sum_{k=1}^{M/2} \nu_k (1 - e^{-2b/\nu_k}) \{E_k \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + E_{k+M/2} \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_i)\} = 0, \quad (5.51)$$

$$\sum_{k=1}^{M/2} \nu_k (1 - e^{-2b/\nu_k}) \{F_k \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) + F_{k+M/2} \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_{i+3M/4})\} = 0, \quad (5.52)$$

$$\sum_{k=1}^{M/2} \nu_k (1 - e^{-2b/\nu_k}) \{F_k \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_{i+3M/4}) + F_{k+M/2} \Phi_y(\nu_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/4})\} = 0, \quad (5.53)$$

$$\sum_{k=1}^{M/2} \gamma_k (1 - e^{-2d/\gamma_k}) \{G_k \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_i) + G_{k+M/2} \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})\} = 0, \quad (5.54)$$

$$\sum_{k=1}^{M/2} \gamma_k (1 - e^{-2d/\gamma_k}) \{G_k \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + G_{k+M/2} \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_i)\} = 0, \quad (5.55)$$

$$\sum_{k=1}^{M/2} \gamma_k (1 - e^{-2d/\gamma_k}) \{H_k \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) + H_{k+M/2} \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_{i+3M/4})\} = 0, \quad (5.56)$$

$$\sum_{k=1}^{M/2} \gamma_k (1 - e^{-2d/\gamma_k}) \{H_k \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_{i+3M/4}) + H_{k+M/2} \Phi_x(\gamma_k, \mathbf{\Omega}_{i+M/4})\} = 0, \quad (5.57)$$

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

As equações (5.50) à (5.57) correspondem as primeiras $2M$ das $6M$ equações necessárias para este sistema estar bem definido. As outras $4M$ equações vêm da associação entre as equações (4.14) à (4.21) (na forma integrada) e a solução geral dos problemas integrados, ou seja,

$$\{\Psi_y^h(-b, \mathbf{\Omega}_i) + \Psi_y^p(-b, \mathbf{\Omega}_i)\} = \tilde{\Psi}_y(-b, \mathbf{\Omega}_i), \quad (5.58)$$

$$\{\Psi_y^h(b, \mathbf{\Omega}_i) + \Psi_y^p(b, \mathbf{\Omega}_i)\} = \tilde{\Psi}_y(b, \mathbf{\Omega}_i), \quad (5.59)$$

$$\{\Psi_x^h(-d, \mathbf{\Omega}_i) + \Psi_x^p(-d, \mathbf{\Omega}_i)\} = \tilde{\Psi}_x(-d, \mathbf{\Omega}_i), \quad (5.60)$$

$$\{\Psi_x^h(d, \mathbf{\Omega}_i) + \Psi_x^p(d, \mathbf{\Omega}_i)\} = \tilde{\Psi}_x(d, \mathbf{\Omega}_i), \quad (5.61)$$

para $i = 1, \dots, M$, lembrando que nas equações acima deve-se seguir a Tabela 5.1 no momento de associar as direções dos problemas integrados em x e em y . A notação $\tilde{\Psi}$ foi utilizada nas equações (5.58) à (5.61) na representação das aproximações dos contornos afim de evitar uma associação equivocada com a solução geral das equações nodais.

Resolvendo o sistema descrito pelas equações (5.50) à (5.61), encontram-se os $6M$ coeficientes necessários para a completa representação das soluções das equações nodais integrados, possibilitando o cálculo de algumas quantidades de interesse.

6 RESULTADOS NUMÉRICOS

Nos capítulos anteriores, uma abordagem baseada no método ADO foi apresentada para a resolução de alguns problemas clássicos de transporte de nêutrons em geometria bidimensional, onde foram consideradas as aproximações dadas pelas equações (4.14) à (4.21) para tratar dos termos referentes aos contornos nas direções não-incidentes.

Afim de validar o método proposto aqui, considerou-se os seguintes problemas teste:

- PROBLEMA 1: apresentado por Tsai e Loyalka [71], considerando como domínio a região $[-1, 1] \times [-1, 1]$, contendo uma fonte $Q(x, y) = 1$ em $[-0.52, 0.52] \times [-0.52, 0.52]$. Comparou-se resultados para o *fluxo escalar de nêutrons* considerando uma seção de choque total fixada em $\sigma_t = 1.0cm^{-1}$ e seções de choque de espalhamento $\sigma_s = 0.05cm^{-1}$, $\sigma_s = 0.1cm^{-1}$ e $\sigma_s = 0.5cm^{-1}$.
- PROBLEMA 2: baseado no trabalho de Watanabe e Maynard [77], também analisou-se a *fuga de nêutrons* em uma região em que $b = d = 2cm$, $a = c = 1cm$, com fonte isotrópica $Q(x, y) = 1$, utilizando $\sigma_t = 0.75cm^{-1}$ e $\sigma_s = 0.5cm^{-1}$.
- PROBLEMA 3: abordado por Biasotto [15], onde se considera um domínio em que $b = d = 20cm$, e um termo fonte $Q(x, y) = 1$ localizada no interior do quadrado $[-1, 1] \times [-1, 1]$. Analisou-se a *fuga de nêutrons* para a seção de choque total fixada em $\sigma_t = 1.0cm^{-1}$ e seções de choque de espalhamento $\sigma_s = 0.1cm^{-1}$, $\sigma_s = 0.5cm^{-1}$ e $\sigma_s = 0.99cm^{-1}$.

Nestes três problemas verificou-se a influência dos valores de N na convergência dos resultados e o comportamento da solução para diferentes valores de σ_s .

6.1 Descrição geral

Para a construção da solução em ordenadas discretas, definiu-se primeiramente o esquema de quadratura para a discretização da variável angular. Como mencionado anteriormente, escolheu-se a quadratura simétrica de nível S_N devido a sua ampla utilização em problemas de transporte multidimensionais e por já haver um grande estudo a seu respeito. Em Lewis e Miller [44], as quadraturas S_N são apresentadas para diferentes valores de N e estão disponíveis no Anexo A deste trabalho.

Uma vez definido o esquema de quadratura, a implementação da solução dos problemas nodais unidimensionais foi feita em linguagem FORTRAN, utilizando subrotinas dos pacotes EISPACK [67](subrotina RG para o cálculo das autofunções e constantes de separação) e LINPACK [32](subrotinas DGECCO e DGECL para a resolução dos sistemas lineares).

Vale lembrar que, devido as ordenações das direções estabelecidas no capítulo 2, conseguiu-se obter M constantes de separação e M autofunções associadas a partir de matrizes de dimensão $M/2$. Também foram utilizadas expressões mais gerais para representar os termos nos contornos, buscando uma melhor representação dos fluxos angulares nas direções não-incidentes sem a utilização de nenhum parâmetro definido a priori. Além disso, destaca-se que as soluções gerais das equações nodais são analíticas na variáveis espaciais.

Outro aspecto importante à salientar é que neste trabalho os problemas foram tratados considerando o domínio todo, enquanto que nas referências [15, 71, 77] é usado apenas $1/4$ do domínio e são utilizadas condições de contorno reflexivas nas faces que coincidem com os eixos x e y .

Obtidas as soluções para as equações nodais em x e em y , o próximo passo é avaliar as quantidades de interesse.

6.2 Quantidades de interesse

Em muitas aplicações, o estudo dos aspectos físicos não é feito diretamente através do fluxo angular, mas sim utilizando outras grandezas obtidas a partir dele como, por exemplo, o fluxo escalar e a fuga de nêutrons.

Segundo Lewis e Miller [44], o fluxo escalar de nêutrons é definido como

$$\phi(\mathbf{r}) = \int_S \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega}. \quad (6.1)$$

Contudo, na formulação proposta neste trabalho, o problema bidimensional é decomposto em problemas unidimensionais em termos de fluxos angulares médios. Portanto, os fluxos escalares também serão expressos em termos destas médias. Sendo assim, as expressões para os fluxos escalares são

$$\phi_x(y) = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_x(y, \boldsymbol{\Omega}_k) + \Psi_x(y, \boldsymbol{\Omega}_{k+m/2})] \quad (6.2)$$

e

$$\phi_y(x) = \frac{1}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \boldsymbol{\Omega}_k) + \Psi_y(x, \boldsymbol{\Omega}_{k+m/2})]. \quad (6.3)$$

Outra quantidade que pode ser obtida a partir do fluxo angular é a fuga de nêutrons. Esta quantidade é determinada a partir da *densidade angular de corrente*

$$j(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \boldsymbol{\Omega} \cdot \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \quad (6.4)$$

e da *corrente líquida de nêutrons*

$$J(\mathbf{r}) = \int_S j(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega}. \quad (6.5)$$

No caso da classe de problemas que foram estudados aqui, a corrente líquida de nêutrons também pode ser representada, conforme a Figura 6.1, como

$$J(\mathbf{r}) = \sum_{u=x,y} \{J_u^+(\mathbf{r}) - J_u^-(\mathbf{r})\}, \quad (6.6)$$

onde

$$J_u^+(\mathbf{r}) = \int_{S_1} \mathbf{e}_u \cdot \Psi(\mathbf{r}, \Omega) d\Omega \quad (6.7)$$

e

$$J_u^-(\mathbf{r}) = \int_{S_2} \mathbf{e}_u \cdot \Psi(\mathbf{r}, \Omega) d\Omega, \quad (6.8)$$

sendo S_1 e S_2 , respectivamente, os campos de direções que apontam para fora e

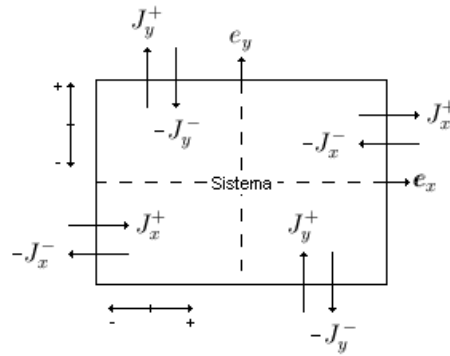


Figura 6.1: Esquema das direções das correntes líquidas resultantes.

para dentro do sistema e \mathbf{e}_u , para $u = x$ e $u = y$, os vetores da base canônica. No caso do método ADO desenvolvido aqui, os campos S_1 e S_2 dependem do problema unidimensional de que se está tratando.

Com estas observações, uma vez que a fuga de nêutrons é a porção da corrente líquida relativa às direções que apontam para fora do sistema e que as soluções obtidas para os fluxos angulares são em termos de médias nas variáveis espaciais, obtém-se as seguintes equações para as fugas parciais

$$J_x(y) = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{M/4} \mu_i w_i [\Psi(b, y, \Omega_i) + \Psi(b, y, \Omega_{i+M/2})] \quad (6.9)$$

e

$$J_y(x) = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{M/4} \eta_i w_i [\Psi(x, d, \Omega_i) + \Psi(x, d, \Omega_{i+M/2})]. \quad (6.10)$$

Vale lembrar que os índices i apresentados nas equações (6.9) e (6.10) são referentes apenas as direções que apontam para fora do sistema para cada problema unidimensional.

Contudo, os resultados apresentados por Watanabe e Maynard [77] e por Biasotto [15] correspondem à fuga de nêutrons por uma região e não localmente. No caso do PROBLEMA 2, a região correspondente é $[0, 2] \times [0, 2]$, enquanto que no PROBLEMA 3, a fuga ocorre em $[16, 20] \times [16, 20]$. Então, para determinar a fuga nestas regiões, integra-se as fugas parciais representadas pelas equações (6.9) e (6.10) nos intervalos indicados, resultando em

$$J_x = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{M/4} \mu_i w_i \int_0^2 [\Psi(b, y, \mathbf{\Omega}_i) + \Psi(b, y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})] dy \quad (6.11)$$

e

$$J_y = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{M/4} \eta_i w_i \int_0^2 [\Psi(x, d, \mathbf{\Omega}_i) + \Psi(x, d, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})] dx \quad (6.12)$$

para o PROBLEMA 2 e

$$J_x = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{M/4} \mu_i w_i \int_{16}^{20} [\Psi(b, y, \mathbf{\Omega}_i) + \Psi(b, y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})] dy \quad (6.13)$$

e

$$J_y = \frac{1}{4} \sum_{i=1}^{M/4} \eta_i w_i \int_{16}^{20} [\Psi(x, d, \mathbf{\Omega}_i) + \Psi(x, d, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})] dx \quad (6.14)$$

para o PROBLEMA 3.

Por fim, obtidas as expressões para as fugas parciais, a fuga de nêutrons usando a quadratura S_N é definida como

$$J_N = J_x + J_y. \quad (6.15)$$

6.3 Resultados para o PROBLEMA 1

Seguindo o problema descrito em Tsai e Loyalka [71], gerou-se uma série de resultados para posterior comparação.

Tabela 6.1: Fluxo escalar $\phi(x)$, para $\sigma_s = 0.5$.

| x | $N = 2$ | $N = 4$ | $N = 6$ | $N = 8$ | $N = 12$ | $N = 16$ |
|-----|---------|---------|---------|---------|----------|----------|
| 0 | 0.3476 | 0.4315 | 0.4584 | 0.4711 | 0.4769 | 0.4766 |
| 0.1 | 0.3438 | 0.4257 | 0.4520 | 0.4648 | 0.4711 | 0.4713 |
| 0.2 | 0.3322 | 0.4081 | 0.4327 | 0.4454 | 0.4531 | 0.4545 |
| 0.3 | 0.3129 | 0.3782 | 0.3995 | 0.4114 | 0.4208 | 0.4241 |
| 0.4 | 0.2857 | 0.3354 | 0.3507 | 0.3603 | 0.3700 | 0.3750 |
| 0.5 | 0.2504 | 0.2786 | 0.2840 | 0.2880 | 0.2939 | 0.2983 |
| 0.6 | 0.2117 | 0.2164 | 0.2098 | 0.2058 | 0.2042 | 0.2054 |
| 0.7 | 0.1799 | 0.1679 | 0.1530 | 0.1433 | 0.1363 | 0.1357 |
| 0.8 | 0.1552 | 0.1338 | 0.1144 | 0.1009 | 0.0884 | 0.0840 |
| 0.9 | 0.1378 | 0.1157 | 0.0974 | 0.0837 | 0.0683 | 0.0596 |
| 1.0 | 0.1281 | 0.1167 | 0.1096 | 0.1057 | 0.1030 | 0.1024 |

Na Tabela 6.1 observa-se uma convergência do fluxo escalar $\phi(x)$ conforme o valor de N aumenta, conseguindo fixar até três dígitos se comparados os fluxos escalares em $N = 12$ e $N = 16$.

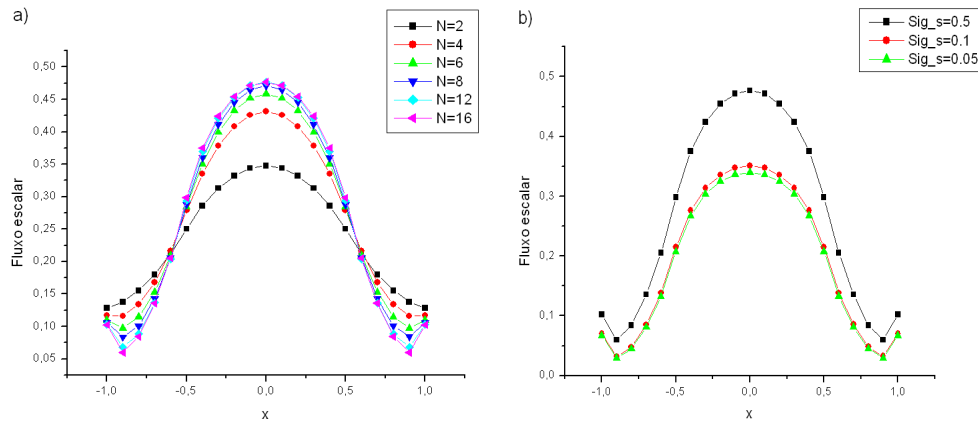


Figura 6.2: Perfis de fluxo escalar considerando a) $\sigma_s = 0.5$; b) $N = 16$.

Já na Figura 6.2 é possível verificar o comportamento do fluxo escalar $\phi(x)$ fixando alguns parâmetros e fazendo N variar (Figura 6.2.a) ou σ_s variar (Figura 6.2.b). Nesta figura, consegue-se visualizar tanto a convergência dos fluxos escalares quanto a simetria. A simetria dos fluxos escalares se dá devido a simetria do problema, ou seja, além dos fluxos escalares $\phi(x)$ e $\phi(y)$ serem iguais, também são simétricos em torno da origem.

Fazendo uma comparação com a literatura, tem-se uma idéia de que (dependendo do caso) a convergência parece ser mais lenta se comparado com outros métodos, indicando talvez a necessidade do uso de mais pontos de quadratura ou de outros esquemas de quadratura. Pelas Tabelas 6.2 à 6.4 se verificou, no entanto, uma concordância de um à dois dígitos com a literatura, que é o mesmo grau de concordância existente entre os próprios resultados da literatura para os diferentes métodos.

Tabela 6.2: Fluxos escalares $\phi(x)$, para $x = 0.5$.

| σ_s | Loyalka [71] | TWOTRAN-II [71] | ADO | Cabrera [18] |
|------------|-----------------------|-----------------|--------------------------|--------------------------|
| | $N = 5, 7, 9, 11, 15$ | $N = 4, 8, 16$ | $N = 2, 4, 6, 8, 12, 16$ | $N = 2, 4, 6, 8, 12, 16$ |
| 0.50 | 0.359604 | 0.337412 | 0.2504 | 0.3588 |
| | 0.358422 | 0.337707 | 0.2786 | 0.3890 |
| | 0.357414 | 0.339794 | 0.2840 | 0.3924 |
| | 0.356678 | - | 0.2880 | 0.3936 |
| | 0.355885 | - | 0.2939 | 0.3945 |
| | - | - | 0.2983 | 0.3952 |
| 0.10 | 0.258802 | 0.239483 | 0.1866 | 0.2427 |
| | 0.259150 | 0.241676 | 0.2019 | 0.2557 |
| | 0.259131 | 0.244032 | 0.2048 | 0.2570 |
| | 0.259030 | - | 0.2073 | 0.2576 |
| | 0.258906 | - | 0.2115 | 0.2584 |
| | - | - | 0.2147 | 0.2591 |
| 0.05 | 0.250097 | 0.231102 | 0.1809 | 0.2332 |
| | 0.250569 | 0.233421 | 0.1952 | 0.2451 |
| | 0.250636 | 0.235787 | 0.1978 | 0.2463 |
| | 0.250591 | - | 0.2003 | 0.2469 |
| | 0.250529 | - | 0.2043 | 0.2476 |
| | - | - | 0.2075 | 0.2483 |

Outro ponto importante a ser salientado é que nas Tabelas 6.2 à 6.4 estão sendo comparados resultados gerados através de três métodos com abordagens bem distintas: Tsai e Loyalka [71] usam a *equação integral de transporte* para gerar os resultados, enquanto que no código TWOTRAN-II os fluxos escalares são obtidos através de métodos puramente numéricos. Além do método ADO ser um método nodal, o tratamento do problema é feito através de problemas unidimensionais em termos de médias, enquanto que os outros dois métodos trabalham diretamente com o problema bidimensional. Além disso, a abordagem proposta aqui considera

Tabela 6.3: Fluxos escalares $\phi(x)$, para $x = 0.7$.

| σ_s | Loyalka [71] | TWOTRAN-II [71] | ADO | Cabrera [18] |
|------------|-----------------------|-----------------|--------------------------|--------------------------|
| | $N = 5, 7, 9, 11, 15$ | $N = 4, 8, 16$ | $N = 2, 4, 6, 8, 12, 16$ | $N = 2, 4, 6, 8, 12, 16$ |
| 0.50 | 0.149801 | 0.157320 | 0.1799 | 0.2717 |
| | 0.139050 | 0.139581 | 0.1679 | 0.2702 |
| | 0.138539 | 0.133426 | 0.1530 | 0.2632 |
| | 0.138460 | - | 0.1433 | 0.2582 |
| | 0.137048 | - | 0.1363 | 0.2534 |
| | - | - | 0.1357 | 0.2511 |
| 0.10 | 0.093601 | 0.100591 | 0.1273 | 0.1741 |
| | 0.083932 | 0.085131 | 0.1113 | 0.1634 |
| | 0.083759 | 0.078914 | 0.0990 | 0.1563 |
| | 0.083911 | - | 0.0914 | 0.1518 |
| | 0.082774 | - | 0.0859 | 0.1475 |
| | - | - | 0.0855 | 0.1455 |
| 0.05 | 0.088990 | 0.095914 | 0.1226 | 0.1662 |
| | 0.079448 | 0.080662 | 0.1064 | 0.1551 |
| | 0.079301 | 0.074448 | 0.0944 | 0.1481 |
| | 0.079469 | - | 0.0870 | 0.1437 |
| | 0.078362 | - | 0.0817 | 0.1394 |
| | - | - | 0.0813 | 0.1374 |

Tabela 6.4: Fluxos escalares $\phi(x)$, para $x = 0.98$.

| σ_s | Loyalka [71] | TWOTRAN-II [71] | ADO | Cabrera [18] |
|------------|-----------------------|-----------------|--------------------------|--------------------------|
| | $N = 5, 7, 9, 11, 15$ | $N = 4, 8, 16$ | $N = 2, 4, 6, 8, 12, 16$ | $N = 2, 4, 6, 8, 12, 16$ |
| 0.50 | 0.054250 | 0.045536 | 0.1294 | 0.1758 |
| | 0.053812 | 0.048085 | 0.1147 | 0.1567 |
| | 0.053558 | 0.052366 | 0.1043 | 0.1492 |
| | 0.053442 | - | 0.0971 | 0.1458 |
| | 0.053413 | - | 0.0893 | 0.1441 |
| | - | - | 0.0848 | 0.1439 |
| 0.10 | 0.032577 | 0.025670 | 0.0917 | 0.1082 |
| | 0.032669 | 0.028969 | 0.0764 | 0.08961 |
| | 0.032655 | 0.032432 | 0.0684 | 0.08392 |
| | 0.032637 | - | 0.0633 | 0.08149 |
| | 0.032622 | - | 0.0580 | 0.08040 |
| | - | - | 0.0548 | 0.08039 |
| 0.05 | 0.030823 | 0.023777 | 0.0883 | 0.1028 |
| | 0.030952 | 0.027299 | 0.0731 | 0.08449 |
| | 0.030956 | 0.030798 | 0.0654 | 0.07899 |
| | 0.030945 | - | 0.0605 | 0.07666 |
| | 0.030931 | - | 0.0554 | 0.07564 |
| | - | - | 0.0523 | 0.07564 |

o domínio todo, enquanto que a literatura utiliza apenas uma parte do domínio fazendo uso de condições de contorno reflexivas.

Com base nos resultados obtidos por Cabrera [18], em que o método ADO é associado à aproximações constantes para os termos de fuga, observa-se bons resultados para $x = 0.5$. Contudo, a medida em que o valor de x aumenta, as aproximações exponenciais propostas aqui se mostram mais eficientes. De qualquer forma, os resultados obtidos por Cabrera [18] ainda são considerados preliminares e em fase de verificação computacional.

6.4 Resultados para o PROBLEMA 2

Para este problema, Watanabe e Maynard [77] apresentam resultados obtidos através do método de *Cones Discretos* e do método MCNP (*Monte Carlo N-Particle Transport Code*). A diferença entre estes métodos é que o método de Monte Carlo faz uma abordagem estatística do problema, diferente do enfoque determinístico dos métodos ADO e Cones Discretos.

Tabela 6.5: Fuga de nêutrons J_N para o PROBLEMA 2, para $\sigma_t = 0.75$ e $\sigma_s = 0.5$.

| MCNP [77] ($\pm 0.16\%$) | ADO $N = 2, 4, 6, 8, 12, 16$ |
|-------------------------------|---------------------------------|
| 0.40101 | 0.4669 |
| - | 0.4205 |
| - | 0.4169 |
| - | 0.4163 |
| - | 0.4162 |
| - | 0.4162 |

Na Tabela 6.5, na coluna referente ao método ADO, consegue-se ter uma noção de convergência conforme o valor de N aumenta. Em particular, comparando os resultados para $N = 12$ e $N = 16$, observa-se a fixação de quatro dígitos. Em comparação com a literatura, conseguiu-se uma concordância de um dígito com o resultado obtido através do método MCNP. A obtenção de uma concordância

maior pode implicar no estudo mais aprofundado com relação às quadraturas e na utilização de outras aproximação para os fluxos no contorno.

6.5 Resultados para o PROBLEMA 3

Baseado na descrição do problema feita por Biasotto [15] também gerou-se uma série de resultados buscando a validação do código e do método.

Tabela 6.6: Fuga de nêutrons J_N obtida pelo método ADO para o PROBLEMA 3, para diferentes valores de σ_s e N .

| N | $\sigma_s = 0.1$ | $\sigma_s = 0.5$ | $\sigma_s = 0.99$ |
|-----|------------------|------------------|-------------------|
| 4 | 0.1377(-9) | 0.3731(-8) | 0.6782(-1) |
| 6 | 0.2609(-9) | 0.4318(-8) | 0.6736(-1) |
| 8 | 0.3101(-9) | 0.4516(-8) | 0.6713(-1) |
| 12 | 0.3172(-9) | 0.4504(-8) | 0.6695(-1) |
| 16 | 0.3166(-9) | 0.4494(-8) | 0.6686(-1) |

Na Tabela 6.6 pode-se observar uma convergência dos resultados para a fuga de nêutrons para cada valor de σ_s escolhido.

Em relação às Tabelas 6.7 e 6.8, observa-se uma dificuldade de encontrar dígitos de concordância entre os resultados obtidos na literatura para os diferentes métodos e, em alguns casos, nem mesmo a ordem dos resultados é a mesma, sendo muito difícil fazer um comparativo. Outro fato importante relativo a estes resultados é que, além de terem sido gerados através de diferentes formulações, alguns só podem ser encontrados para baixos esquemas de quadratura ($N = 4$). Observa-se que para efeitos de comparação com a literatura, de acordo com a definição apresentada por Biasotto [15] para fuga de nêutrons, os resultados gerados pelo método ADO mostrados nas Tabelas 6.7 à 6.10 foram obtidos multiplicando as equações (6.13) e (6.14) por 4.

Tabela 6.7: Fuga de nêutrons J_N do PROBLEMA 3, para $\sigma_s = 0.5$ e $N = 4$.

| Método | Parâmetros | J_N |
|----------------------------------|-------------|-------------|
| LN(8G4) [46] | - | 0.1178(-11) |
| LTS ₄ 2D [80] | - | 0.4700(-11) |
| SGF-ExpN(4G4)[46] | σ_a | 0.1280(-11) |
| SGF-ExpN(4G4)[46] | L^{-1} | 0.1369(-11) |
| SGF-ExpN(4G4)[46] | $1/\rho(A)$ | 0.1340(-11) |
| LTS ₄ 2D-Diag [15] | - | 0.3141(-5) |
| LTS ₄ 2D-DiagExp [15] | σ_a | 0.2497(-11) |
| Método ADO [18] | - | 0.8612(-9) |
| Método ADO | - | 0.3731(-8) |

Tabela 6.8: Fuga de nêutrons J_N do PROBLEMA 3, para $\sigma_s = 0.99$ e $N = 4$.

| Método | Parâmetros | J_N |
|----------------------------------|-------------|------------|
| LN(4G4) [46] | - | 0.4154(-2) |
| LTS ₄ 2D [80] | - | 0.4800(-2) |
| CCN(4G4)[46] | - | 0.1143(-1) |
| SGF-ExpN(2G4)[46] | σ_a | 0.4181(-2) |
| SGF-ExpN(2G4)[46] | L^{-1} | 0.4212(-2) |
| SGF-ExpN(2G4)[46] | $1/\rho(A)$ | 0.4229(-2) |
| LTS ₄ 2D-Diag [15] | - | 0.2467(-3) |
| LTS ₄ 2D-DiagExp [15] | σ_a | 0.1177(-1) |
| Método ADO [18] | - | 0.3162(-1) |
| Método ADO | - | 0.6782(-1) |

No que diz respeito ao método ADO, conseguiu-se resultados mais satisfatórios para o caso de $\sigma_s = 0.99$. Usando $\sigma_s = 0.5$, obteve-se fugas com valores intermediários entre o método LTS_N-Diag e os demais.

Com relação ao método LTS_N-Diag, cuja formulação também envolve aproximações das condições de contorno em termos dos autovalores e autovetores do problema homogêneo, o método ADO se mostrou mais eficiente, fornecendo resultados a um baixo custo computacional, mesmo em situações de baixa absorção ($\sigma_a = 0.01$).

Comparando os resultados obtidos aqui com os gerados por Cabrera [18], a ordem dos valores difere pouco (se comparado com as demais abordagens), mesmo com a utilização de diferentes aproximações para os fluxos nos contornos. Não cabe

aqui a comparação com os resultados obtidos em Cabrera [18] para o caso do uso dos parâmetros de proporcionalidade, pois estes parâmetros foram definidos de forma a gerar resultados comparáveis com a literatura. Além disso, a determinação destes parâmetros é uma limitação desta formulação por serem determinados empiricamente.

Tabela 6.9: Fuga de nêutrons J_N para o PROBLEMA 3, para $\sigma_s = 0.5$.

| N | LTS $_N$ 2D-DiagExp [15] | ADO | ADO [18] | |
|-----|--------------------------|-------------|------------|------------|
| | λ | J_N | J_N | |
| 4 | σ_a | 0.2497(-11) | 0.3731(-8) | 0.8612(-9) |
| | L^{-1} | 0.1422(-10) | - | - |
| | $1/\rho(A)$ | 0.3597(-11) | - | - |
| 6 | σ_a | 0.2147(-11) | 0.4318(-8) | 0.9968(-9) |
| | L^{-1} | 0.9122(-11) | - | - |
| | $1/\rho(A)$ | 0.3410(-11) | - | - |
| 8 | σ_a | 0.1489(-11) | 0.4516(-8) | 0.1057(-8) |
| | L^{-1} | 0.2883(-11) | - | - |
| | $1/\rho(A)$ | 0.1863(-11) | - | - |
| 12 | σ_a | 0.1417(-11) | 0.4504(-8) | 0.1058(-8) |
| | L^{-1} | 0.2735(-11) | - | - |
| | $1/\rho(A)$ | 0.1825(-11) | - | - |
| 16 | - | - | 0.4494(-8) | 0.1058(-8) |
| | - | - | - | - |
| | - | - | - | - |

Na comparação com os demais métodos, do ponto de vista computacional, o fato de não depender de parâmetros heurísticamente definidos, bem como não fazer uso de métodos iterativos e fornecer soluções analíticas nas variáveis espaciais a um baixo custo computacional, são pontos fortes do método ADO, incentivando o aprimoramento desta metodologia.

Nas Tabelas 6.9 e 6.10 também encontrou-se problemas na comparação dos resultados com relação à dígitos significativos e, até mesmo com relação à ordem dos resultados. De modo geral, tem-se a impressão de que a convergência da formulação proposta aqui é mais lenta uma vez que conseguiu-se fixar apenas um dígito utilizando quadraturas S_N até $N = 16$. Também observa-se que, seguindo a for-

Tabela 6.10: Fuga de nêutrons J_N para o PROBLEMA 3, para $\sigma_s = 0.99$.

| N | LTS _N 2D-DiagExp [15] | ADO | ADO [18] | |
|-----|----------------------------------|------------|------------|------------|
| | λ | J_N | J_N | |
| 4 | σ_a | 0.1177(-1) | 0.6782(-1) | 0.3162(-1) |
| | L^{-1} | 0.3531(-1) | - | - |
| | $1/\rho(A)$ | 0.1208(-1) | - | - |
| 6 | σ_a | 0.5478(-2) | 0.6736(-1) | 0.3126(-1) |
| | L^{-1} | 0.5289(-2) | - | - |
| | $1/\rho(A)$ | 0.6777(-2) | - | - |
| 8 | σ_a | 0.4145(-2) | 0.6713(-1) | 0.3634(-1) |
| | L^{-1} | 0.4530(-2) | - | - |
| | $1/\rho(A)$ | 0.4429(-2) | - | - |
| 12 | σ_a | 0.4141(-2) | 0.6695(-1) | 0.4358(-1) |
| | L^{-1} | 0.4257(-2) | - | - |
| | $1/\rho(A)$ | 0.4330(-2) | - | - |
| 16 | - | - | 0.6686(-1) | 0.4078(-1) |
| | - | - | - | - |
| | - | - | - | - |

mulação apresentada no Apêndice B, é possível gerar resultados comparáveis com a literatura, apesar da necessidade de pré-definir certos parâmetros.

Apesar de se ter três versões do problema, todos os resultados foram gerados com o mesmo código. Assim, o tempo de processamento em qualquer um dos casos é o mesmo, sendo inferior à dez minutos em um computador Core 2 Duo 1.8GHz com 2Gb de memória RAM e inferior a 2 minutos em um MacBook.

7 CONSIDERAÇÕES FINAIS

Ao final deste trabalho, verifica-se a possibilidade do uso do método ADO aliado às equações nodais como uma boa alternativa na abordagem de problemas bidimensionais de transporte de partículas.

Durante o desenvolvimento do método, algumas etapas importantes foram atingidas. A primeira delas, refere-se ao uso das quadraturas simétricas de nível S_N , associadas ao método ADO, que resultaram na construção de equações unidimensionais, cujo problema de autovalores possui metade da dimensão do problema originalmente obtido através de outras formulações baseadas no método de ordenadas discretas.

Outro aspecto importante, relativo a construção das soluções a partir das funções de Green, foi trabalhar com autovalores repetidos, onde desenvolveu-se uma estratégia para a construção destas soluções particulares a partir de matrizes bem condicionadas, fornecendo soluções para diferentes versões do problema seguindo a mesma formulação.

Dentre os aspectos computacionais, destaca-se a ausência de esquemas iterativos, fazendo com que o custo computacional seja reduzido. A geração de problemas de autovalores de dimensão menor também contribui neste sentido, principalmente no caso de valores de N mais elevados. E mesmo com o aumento da complexidade na associação das direções entre os dois problemas, o método é de fácil implementação.

Outro ponto a ser destacado é a utilização de aproximações mais gerais nos contornos. Diferente do trabalho de Barichello et al [6] (em que uma série de parâmetros precisavam ser atribuídos a priori), não houve a necessidade de pré-definir quaisquer parâmetros. Em contrapartida, obteve-se um sistema mais complexo para a determinação dos coeficientes das soluções dos dois problemas unidimensionais.

A utilização de soluções particulares através das funções de Green, bem como o uso de expressões mais gerais para a representação dos contornos, propiciam a abordagem de problemas mais gerais, onde tanto a fonte quanto as condições de contorno de incidência não precisam ser necessariamente constantes.

Apesar de observada uma boa convergência entre os resultados obtidos aqui e uma concordância de até dois dígitos com a literatura à um tempo computacional relativamente baixo, acredita-se que um estudo mais abrangente com relação as quadraturas pode ser adequado. O código computacional precisa, além disso, passar por mais testes. Dessa forma, não se pode considerar que o que foi apresentado aqui em termos de resultados numéricos tem caráter conclusivo, incentivando a continuidade deste trabalho.

Sendo assim, considera-se que os objetivos deste trabalho foram atingidos, uma vez que estabeleceu-se soluções analíticas através do método ADO e foram obtidos resultados para diferentes versões de um problema bidimensional. Para isto, duas abordagens foram consideradas: uma primeira referente ao período da qualificação (Barichello et al [6, 7], Prolo Filho et al [49]) usando uma aproximação dos contornos em termos do fluxo angular médio; e uma segunda, mais geral nesta etapa complementar. Em ambas abordagens, através de códigos fáceis de implementar, conseguiu-se resultados comparáveis com a literatura a baixo custo computacional.

Bibliografia

- [1] Abreu, M. P., *A discrete ordinates scheme for void fraction evaluation with nonstandard reflective conditions and weakly divergent beams*, **Kerntchnik**, vol. 74, pp.55-59, 2009.
- [2] Alves Filho, H., da Silva, F. C., Barros, R. C., *A coarse-mesh numerical method for one-speed neutron transport eigenvalue problems in two-dimensional cartesian geometry*, **Applied Numerical Mathematics**, vol. 40, pp.167-177, 2002.
- [3] Azmy, Y. Y., *The weighted diamond-difference form of nodal transport methods*, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 98, pp.29-40, 1988.
- [4] Azmy, Y. Y., *A comparison between the finite difference and nodal integral methods for the neutron diffusion equation*, **Proceedings of the International Topical Meeting on Advances in Mathematics, Computation, and Reactor Physics**, 1991.
- [5] Barichello, L. B., Cabrera, L. C., Golbert, D. R., Kamphorst, C., Prolo Filho, J. F., Reichert, J. T., Scherer, C. S., *Micro and nanoflows: An analysis based on the Boltzmann equation*, **1a Mostra de Nanociência e Nanotecnologia da UFRGS**, Porto Alegre, 2006.
- [6] Barichello, L. B., Cabrera, L. C., Prolo Filho, J. F., *An analytical discrete ordinates solution for two dimensional problems based on nodal schemes*, **International Nuclear Atlantic Conferente**, Rio de Janeiro, 2009.
- [7] Barichello, L. B., Cabrera, L. C., Prolo Filho, J. F., *An analytical approach for a nodal scheme of two-dimensional neutron transport problems*. **Annals of Nuclear Energy**, vol. 38, pp. 1310-1317, 2011.

- [8] Barichello, L. B., Camargo, M., Rodrigues, P., Siewert, C. E., *Unified solutions to classical flow problems based on the BGK model*, **Z. Angew. Math. Phys.**, vol. 52, pp.517-534, 2001.
- [9] Barichello, L. B., Garcia, R. D. M., Siewert, C. E., *Particular solution for the discrete-ordinates method*, **JQSRT**, vol. 64, pp.219-226, 2000.
- [10] Barichello, L. B., Siewert, C. E., *A discrete-ordinates solution for a non-grey model with complete frequency redistribution*, **JQSRT**, vol. 62, pp.645-675, 1999.
- [11] Barros, R. C., Larsen, E. W., *A spectral nodal method for one-group X, Y-geometry discrete ordinates problems*, **Nuclear Science and Engineering**, vol. 111, pp.34-45, 1992.
- [12] Barros, R. C., da Silva, F. C., Alves Filho, H., *Recent advances in spectral nodal methods for X, Y-geometry discrete ordinates deep penetration and eigenvalue problems*, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 35, pp.293-331, 1999.
- [13] Barros, R. C., Alves Filho, H., Silva, F. C., Hernandez, C. G., Orellana, E. T. V., Couto, N., Dominguez, D. S., *The application of spectral nodal methods to discrete ordinates and diffusion problems in cartesian geometry for neutron multiplying systems*, **Progress in Nuclear Energy**, vol. 42, pp.385-426, 2003.
- [14] Bell, G. I., Glasstone, S. , *Nuclear Reactor Theory*, **Van Nostrand Reinhold Co**, New York, 1970.
- [15] Biasotto, E., *Estudo e solução da equação de transporte de nêutrons bidimensionais pelo método LTS_N para elevadas ordens de quadratura angular: $LTS_N 2D-Diag$ e $LTS_N 2D-DiagExp$* , Tese de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, 2002.

- [16] Boltzmann, L., *Weitere studien über das wärmeleichgewicht unter gas molekülen*, **Sitzungsberichte Akademie der Wissenschaften**, vol. 60, pp.275-376, 1872.
- [17] Cabrera, L. C., Barichello, L. B., *Unified solutions to some classical problems in rarefied gas dynamics based on the one-dimensional linearized S-model equations*, **Z. Angew. Math. Phys.**, vol. 57, pp.285-312, 2006.
- [18] Cabrera, L. C., *Solução espectral para modelos bidimensionais da equação linear de Boltzmann*, Tese de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Matemática, UFRGS, Porto Alegre, 2009.
- [19] Camargo, M., *Soluções unificadas para modelos com frequência de colisão variável da dinâmica de gases rarefeitos*, Tese de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, 2003.
- [20] Camargo, M., Barichello, L. B., *Unified approach for variable collision frequency models in rarefied gas dynamics*, **TTSP**, vol. 33, pp.227-260, 2004.
- [21] Case, K. M., Zweifel, P. F., *Linear transport theory*, **Addison Wesley**, Reading MA, 1967.
- [22] Cercignani, C., *Theory and application of the Boltzmann equation*, **Elsevier**, New York, 1975.
- [23] Cercignani, C., *Mathematical methods in kinetic theory*, **Plenum Press**, New York, 1990.
- [24] Cercignani, C., Illner, R., Pulvirenti, M., *The mathematical theory of diluted gases*, **Springer**, 1994.
- [25] Cercignani, C., *The Boltzmann equation and its applications*, **Springer-Verlag**, New York, 1988.

- [26] Cercignani, C., *On the general solution of the steady linearized Boltzmann equation*, **Rarefied Gas Dynamics**, M. Becker and M. Fiebig eds., vol. I, A.9-1-11, DFLVR Press, Porz-Wahn, 1974.
- [27] Chandrasekhar, S., *Radiative transfer*, **Oxford University Press**, London, 1950.
- [28] Dantas, L. B., Orlande, H. R. B., Cotta, R. M., *Improved lumped-differential formulations and hybrid solution methods for drying in porous media*, **International Journal of Thermal Science**, vol. 46, pp.878-889, 2007.
- [29] Doicu, A., Trautmann, T., *Discrete-ordinate method with matrix exponential for a pseudo-spherical atmosphere: scalar case*, **JQSRT**, vol. 110, pp.146-158, 2009.
- [30] Dominguez, D. S., Iglesias, S. M., Barros, R. C., *Reconstrução analítica intra-nodal do fluxo escalar de nêutrons com o método espectro-nodal constante*, *International Nuclear Atlantic Conference*, 2005.
- [31] Dominguez, D. S., Garcia, C. R., Barros, R. C., *Métodos numéricos lineares para problemas de penetração profunda na formulação de ordenadas discretas em geometria cartesiana bidimensional*, **VII Encontro de Modelagem Computacional**, Nova Friburgo, Rio de Janeiro, 2004.
- [32] Dongarra, J. J., Bunch, J. R., Moler, C. B., Stewart, G. W., *LINPACK, User's guide*, **SIAM**, Philadelphia, 1979.
- [33] Duderstadt, J. J., *Transport theory*, **John Wiley**, New York, 1979.
- [34] Garcia, R. D. M., *Métodos para solução da equação de transporte de partículas integro-diferencial*, Escola de Verão em Teoria de Transporte de Partículas Neutras, Puc - Porto Alegre, 2002.

- [35] Garcia, R. D. M., Siewert, C. E., *The McCormack model for gas mixtures: Heat transfer in a plane channer*, **Physics of Fluids**, vol. 16, pp.3393-3402, 2004.
- [36] Garcia, R. D. M., Siewert, C. E., Yacout, A. M., *Radiative transfer in a multi-layer medium subject to Fresnel boundary and interface conditions and uniform illumination by obliquely incident parallel rays*, **JQSRT**, vol. 109, pp.2151-2170, 2008.
- [37] Garcia, R. D. M., Siewert, C. E., *The linearized Boltzmann equation: sound-wave propagation in a rarefied gas*, **Z. Angew. Math. Phys.**, vol. 57, pp.94-122, 2006.
- [38] Gonzáles, M., Fernández, C. G., Velarde, P., *2D numerical comparison between S_N and M_1 radiation transport methods*, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 36, pp.886-895, 2009.
- [39] Gross, E. P., Jackson, E. A., *Kinetic models and the linear Boltzmann equation*, **The Physics of Fluids**, vol. 2, pp.432-441, 1959.
- [40] Jones, W., Paul, M., *Combination of DOM with LES in a gas turbine combustor*, **International Journal of Engineering Science**, vol. 43, pp.379-397, 2005.
- [41] Knackfuss, R. F., *Efeitos de superfície na dinâmica de gases rarefeitos: uma análise baseada no núcleo de espalhamento de Cercignani-Lampis*, Tese de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, 2005.
- [42] Knackfuss, R. F., Barichello, L. B., *On the temperature-jump problem in rarefied gas dynamics: The effect of the Cercignani-Lampis boundary condition*, **Siam J. Appl. Math.**, vol. 66, pp.2149-2186, 2006.

- [43] Kock, R., Becker, R., *Evaluation of quadrature schemes for the discrete ordinates method*, **JQSRT**, vol. 84, pp.423-435, 2004.
- [44] Lewis, E. E., Miller W. F., *Computational methods of neutron transport*, **John Wiley and Sons**, New York, 1984.
- [45] Loyalka, S. K., Hickey, K. A., *Plane Poiseuille flow: near continuum results for a rigid sphere gas*, **Physica A**, vol. 160, pp.395-408, 1989.
- [46] Mello, J. A. M., *Modelagem espectro-nodal exponencial para problemas monoenergéticos de penetração profunda segundo a teoria de transporte de nêutrons na formulação de ordenadas discretas em geometria cartesiana bidimensional*, tese de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Nuclear, UFRJ, Rio de Janeiro, 2000.
- [47] Mishra, S. C., Roy, H. K., Misra, N., *Discrete ordinate method with a new and simple quadrature scheme*, **JQSRT**, vol. 101, pp.249-262, 2006.
- [48] Prolo Filho, J. F., *A equação de Boltzmann e a modelagem de fluidos em micro e macroescalas*, Dissertação de mestrado do Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, UFRGS, Porto Alegre, 2007.
- [49] Prolo Filho, J. F., Cabrera, L. C., Barichello, L. B., *Recent developments on explicit formulations for nodal schemes of two-dimensional neutron transport problems. 22nd International Conference on Transport Theory - ICTT22*, Portland, 2011, p. 1-2.
- [50] Sanchez, D. D., *Método espectro-nodal linear para problemas de transporte de nêutrons na formulação de ordenadas discretas em geometria bidimensional cartesiana*, Tese de Doutorado, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, UERJ/PGMC, 2006.
- [51] Scherer, C. S., *Modelos cinéticos da equação linearizada de Boltzmann em um problema de transferência de calor em microescala*, Dissertação

de mestrado do Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, UFRGS, Porto Alegre, 2005.

- [52] Scherer, C. S., Prolo Filho, J. F., Barichello, L. B., *An analytical approach to the unified solution of kinetic equations in rarefied gas dynamics.I. Flow problems*, **Z. Angew. Math. Phys.**, vol. 60, pp.70-115, 2009.
- [53] Scherer, C. S., Prolo Filho, J. F., Barichello, L. B., *An analytical approach to the unified solution of kinetic equations in rarefied gas dynamics.II. Heat transfer problems*, **Z. Angew. Math. Phys.**, vol. 60, pp.651-687, 2009.
- [54] Sharipov, F., *Non-isothermal gas flow through rectangular microchannels*, **Journal Micromechanics Microengineering**, vol. 9, pp.394-401, 1999.
- [55] Sharipov, F., Kalempa, D., *Sound propagation through a gas in microscale*, **Proceedings of the ASMME 2009: 7th International Conference no Nanochannels, Microchannels and Minichannels**, Pohang, South Korea, 2009.
- [56] Siewert, C. E., *Kramers problem for a variable collision frequency model*, **European Journal of Applied Mathematics**, vol. 12, pp.179-191, 2001.
- [57] Siewert, C. E., *Generalized boundary conditions for the S-model kinetic equations basic to flow in a plane channel*, **JQSRT**, vol. 72, pp.75-88, 2002
- [58] Siewert, C. E., *Poiseuille, thermal creep and Couette flow: results based on the CES model of the linearized Boltzmann equation*, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, vol. 21, pp.579-597, 2002.
- [59] Siewert, C. E., *The linearized Boltzmann equation: a consise and accurate solution of the temperature-jump problem*, **JQSRT**, vol. 77, pp.417-432, 2003.

- [60] Siewert, C. E., *The linearized Boltzmann equation: concise and accurate solution to basic flow problems*, **Z. Angew. Math. Phys.**, vol. 54, pp.273-303, 2003.
- [61] Siewert, C. E., *Viscous-slip, thermal-slip and temperature jump coefficients as defined by linearized Boltzmann equation and the Cercignani-Lampis boundary conditions*, **Physics of Fluids**, vol. 15, pp.1696-1701, 2003.
- [62] Siewert, C. E., *The temperature-jump problem based on the CES model of the linearized Boltzmann equation*, **Z. Angew. Math. Phys.**, vol. 55, pp.92-104, 2004.
- [63] Siewert, C. E., *The McCormack model for gas mixture: the temperature jump problem*, **Z. Angew. Math. Phys.**, vol. 56, pp.273-292, 2005.
- [64] Siewert, C. E., Valougeorgis, D., *An analytical discrete-ordinates solution of the S-model kinetic equations for flow in a cylindrical tube*, **JQSRT**, vol. 72, pp.531-550, 2002.
- [65] Siewert, C. E., Valougeorgis, D., *Concise and accurate solutions to half-space binary-gas flow problems defined by the McCormack model and specular-diffuse wall conditions*, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, vol. 23, pp.709-726, 2004.
- [66] Siewert, C. E., Valougeorgis, D., *The McCormack model: channel flow of a binary gas mixture driven by temperature, pressure and density gradients*, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, vol. 23, pp.645-664, 2004.
- [67] Smith, B. T., Boyle, J. M., Dongarra, J. J., Garbow, B. S., Ikebe, Y., Klema, V. C., Moler, C. B., *Matrix eigensystem routines EISPACK guide*, **Springer-Verlag**, Berlin, 1976.
- [68] Sone, Y., Ohwada, T. Aoki, K., *Temperature jump and Knudsen layer in a rarefied gas over a plane wall: numerical analysis of the linearized*

- Boltzmann equation of hard-sphere molecules*, **Physics of Fluids A**, vol. 1, pp.363-370, 1989.
- [69] Sone, Y., Takata, S., Ohwada, T., *Numerical analysis of the plane Couette flow of rarefied gas on the basis of the linearized Boltzmann equation for hard-sphere molecules*, **European Journal of Mechanics B/Fluids**, vol. 9, pp.273-288, 1990.
- [70] Sun, Q., Boyd, I. D., Candler, G. V., *Numerical simulation of gas flow over microscale airfoils*, **AIAA Thermophysics Conference, 35th, Anaheim, CA**, vol. 16, pp.171-179, 2002.
- [71] Tsai, R. W., Loyalka, S. K., *A numerical method for solving the integral equation of neutron transport - Part III*, **Nuclear Science Engineering**, vol. 59, pp.536-540, 1976.
- [72] Vasudevaiah, M., Balamurugan, K., *Heat transfer of rarefied gases in a corrugated microchannel*, **International Journal of Thermal Sciences**, vol. 40, pp.454-468, 2001.
- [73] Vilhena, M. T. M. B., Barichello, L. B., *A new analytical approach to solve the neutron transport equation*, **Kernetchnick**, vol. 56, pp.334-336, 1991.
- [74] Wagner, J. C., Haghghat, A., *Automated variance reduction of Monte Carlo shielding calculations using the discrete ordinates adjoint function*, **Nuclear Science Engineering**, vol. 128, pp.186-208, 1998.
- [75] Walters, F. W., O'Dell, R. D., *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.

- [76] Wang, Y., Ragusa, J. C., *A high-order discontinuous Galerkin method for the S_N transport equations on 2D unstructured triangular meshes*, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 36, pp. 931-939, 2009.
- [77] Watanabe, Y. Maynard, C. W., *The discrete cones method for two-dimensional neutron transport calculations*, **Transport Theory and Statistical Physics**, vol. 15, pp.135-156, 1986.
- [78] Wick, G. C., *Über ebene diffusionsproblem*, **Z. Phys.**, vol. 120, pp.702-705, 1943.
- [79] Williams, M. M. R., *A review of the rarefied gas dynamics theory associated with some classical problems in flow and heat transfer*, **Z. Angew. Math. Phys.**, vol. 52, pp.500-516, 2001.
- [80] Zabadal, J., *Solução analítica da equação de ordenadas discretas multidimensional*, tese de doutorado do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, 1994.

Apêndice A QUADRATURA ANGULAR COM SIMETRIA DE NÍVEL

Neste anexo, baseado em Lewis e Miller [44], colocou-se a disposição as tabelas referentes às quadraturas simétricas de nível S_N tridimensional, bem como esquemas que localizam os pontos e os pesos destas quadraturas.

Tabela A.1: Quadraturas simétricas de nível S_N referente ao primeiro octante.

| Esquema | i | μ_i | η_i | ξ_i | w_i |
|---------|----|-----------|-----------|-----------|-----------|
| S_2 | 1 | 0.5773502 | 0.5773502 | 0.5773502 | 1.0000000 |
| S_4 | 1 | 0.3500212 | 0.3500212 | 0.8688903 | 0.3333333 |
| | 2 | 0.3500212 | 0.8688903 | 0.3500212 | 0.3333333 |
| | 3 | 0.8688903 | 0.3500212 | 0.3500212 | 0.3333333 |
| S_6 | 1 | 0.2666355 | 0.2666355 | 0.9261807 | 0.1761263 |
| | 2 | 0.2666355 | 0.6815075 | 0.6815075 | 0.1572071 |
| | 3 | 0.6815075 | 0.2666355 | 0.6815075 | 0.1572071 |
| | 4 | 0.2666355 | 0.9261807 | 0.2666355 | 0.1761263 |
| | 5 | 0.6815075 | 0.6815075 | 0.2666355 | 0.1572071 |
| | 6 | 0.9261807 | 0.2666355 | 0.2666355 | 0.1761263 |
| S_8 | 1 | 0.2182179 | 0.2182179 | 0.9511897 | 0.1209877 |
| | 2 | 0.2182179 | 0.5773503 | 0.7867958 | 0.0907407 |
| | 3 | 0.5773503 | 0.2182179 | 0.7867958 | 0.0907407 |
| | 4 | 0.2182179 | 0.7867958 | 0.5773503 | 0.0907407 |
| | 5 | 0.5773503 | 0.5773503 | 0.5773503 | 0.0925926 |
| | 6 | 0.7867958 | 0.2182179 | 0.5773503 | 0.0907407 |
| | 7 | 0.2182179 | 0.9511897 | 0.2182179 | 0.1209877 |
| | 8 | 0.5773503 | 0.7867958 | 0.2182179 | 0.0907407 |
| | 9 | 0.7867958 | 0.5773503 | 0.2182179 | 0.0907407 |
| | 10 | 0.9511897 | 0.2182179 | 0.2182179 | 0.1209877 |

Vale lembrar que para uma aproximação S_N , existem $N/2$ valores distintos arranjados de forma que em cada octante existam $N(N+2)/8$ direções. Além disso, as quadraturas S_N são invariantes sob qualquer rotação de $\pi/2$ em torno do centro da esfera, fazendo com que a representação de um determinado octante seja o mesmo apresentado aqui mudando apenas os sinais das coordenadas.

Tabela A.2: Continuação da Tabela A.1.

| Esquema | i | μ_i | η_i | ξ_i | w_i |
|----------|----|-----------|-----------|-----------|-----------|
| S_{12} | 1 | 0.1672126 | 0.1672126 | 0.9716377 | 0.0707626 |
| | 2 | 0.1672126 | 0.4595476 | 0.8722706 | 0.0558811 |
| | 3 | 0.4595476 | 0.1672126 | 0.8722706 | 0.0558811 |
| | 4 | 0.1672126 | 0.6280191 | 0.7600210 | 0.0373377 |
| | 5 | 0.4595476 | 0.4595476 | 0.7600210 | 0.0502819 |
| | 6 | 0.6280191 | 0.1672126 | 0.7600210 | 0.0373377 |
| | 7 | 0.1672126 | 0.7600210 | 0.6280191 | 0.0373377 |
| | 8 | 0.4595476 | 0.6280191 | 0.6280191 | 0.0258513 |
| | 9 | 0.6280191 | 0.4595476 | 0.6280191 | 0.0258513 |
| | 10 | 0.7600210 | 0.1672126 | 0.6280191 | 0.0373377 |
| | 11 | 0.1672126 | 0.8722706 | 0.4595476 | 0.0558811 |
| | 12 | 0.4595476 | 0.7600210 | 0.4595476 | 0.0502819 |
| | 13 | 0.6280191 | 0.6280191 | 0.4595476 | 0.0258513 |
| | 14 | 0.7600210 | 0.4595476 | 0.4595476 | 0.0502819 |
| | 15 | 0.8722706 | 0.1672126 | 0.4595476 | 0.0558811 |
| | 16 | 0.1672126 | 0.9716377 | 0.1672126 | 0.0707626 |
| | 17 | 0.4595476 | 0.8722706 | 0.1672126 | 0.0558811 |
| | 18 | 0.6280191 | 0.7600210 | 0.1672126 | 0.0373377 |
| | 19 | 0.7600210 | 0.6280191 | 0.1672126 | 0.0373377 |
| | 20 | 0.8722706 | 0.4595476 | 0.1672126 | 0.0558811 |
| | 21 | 0.9716377 | 0.1672126 | 0.1672126 | 0.0707626 |
| S_{16} | 1 | 0.1389568 | 0.1389568 | 0.9805009 | 0.0489872 |
| | 2 | 0.1389568 | 0.3922893 | 0.9092855 | 0.0413296 |
| | 3 | 0.3922893 | 0.1389568 | 0.9092855 | 0.0413296 |
| | 4 | 0.1389568 | 0.5370966 | 0.8319966 | 0.0212326 |
| | 5 | 0.3922893 | 0.3922893 | 0.8319966 | 0.0360486 |
| | 6 | 0.5370966 | 0.1389568 | 0.8319966 | 0.0212326 |
| | 7 | 0.1389568 | 0.6504264 | 0.7467506 | 0.0256207 |
| | 8 | 0.3922893 | 0.5370966 | 0.7467506 | 0.0144589 |
| | 9 | 0.5370966 | 0.3922893 | 0.7467506 | 0.0144589 |
| | 10 | 0.6504264 | 0.1389568 | 0.7467506 | 0.0256207 |
| | 11 | 0.1389568 | 0.7467506 | 0.6504264 | 0.0256207 |
| | 12 | 0.3922893 | 0.6504264 | 0.6504264 | 0.0344958 |
| | 13 | 0.5370966 | 0.5370966 | 0.6504264 | 0.0085179 |
| | 14 | 0.6504264 | 0.3922893 | 0.6504264 | 0.0344958 |
| | 15 | 0.7467506 | 0.1389568 | 0.6504264 | 0.0256207 |
| | 16 | 0.1389568 | 0.8319966 | 0.5370966 | 0.0212326 |
| | 17 | 0.3922893 | 0.7467506 | 0.5370966 | 0.0144589 |
| | 18 | 0.5370966 | 0.6504264 | 0.5370966 | 0.0085179 |
| | 19 | 0.6504264 | 0.5370966 | 0.5370966 | 0.0085179 |
| | 20 | 0.7467506 | 0.3922893 | 0.5370966 | 0.0144589 |
| | 21 | 0.8319966 | 0.1389568 | 0.5370966 | 0.0212326 |
| | 22 | 0.1389568 | 0.9092855 | 0.3922893 | 0.0413296 |
| | 23 | 0.3922893 | 0.8319966 | 0.3922893 | 0.0360486 |
| | 24 | 0.5370966 | 0.7467506 | 0.3922893 | 0.0144589 |
| | 25 | 0.6504264 | 0.6504264 | 0.3922893 | 0.0344958 |

Tabela A.3: Continuação da Tabela A.2.

| Esquema | i | μ_i | η_i | ξ_i | w_i |
|---------|----|-----------|-----------|-----------|-----------|
| | 26 | 0.7467506 | 0.5370966 | 0.3922893 | 0.0144589 |
| | 27 | 0.8319966 | 0.3922893 | 0.3922893 | 0.0360486 |
| | 28 | 0.9092855 | 0.1389568 | 0.3922893 | 0.0413296 |
| | 29 | 0.1389568 | 0.9805009 | 0.1389568 | 0.0489872 |
| | 30 | 0.3922893 | 0.9092855 | 0.1389568 | 0.0413296 |
| | 31 | 0.5370966 | 0.8319966 | 0.1389568 | 0.0212326 |
| | 32 | 0.6504264 | 0.7467506 | 0.1389568 | 0.0256207 |
| | 33 | 0.7467506 | 0.6504264 | 0.1389568 | 0.0256207 |
| | 34 | 0.8319966 | 0.5370966 | 0.1389568 | 0.0212326 |
| | 35 | 0.9092855 | 0.3922893 | 0.1389568 | 0.0413296 |
| | 36 | 0.9805009 | 0.1389568 | 0.1389568 | 0.0489872 |

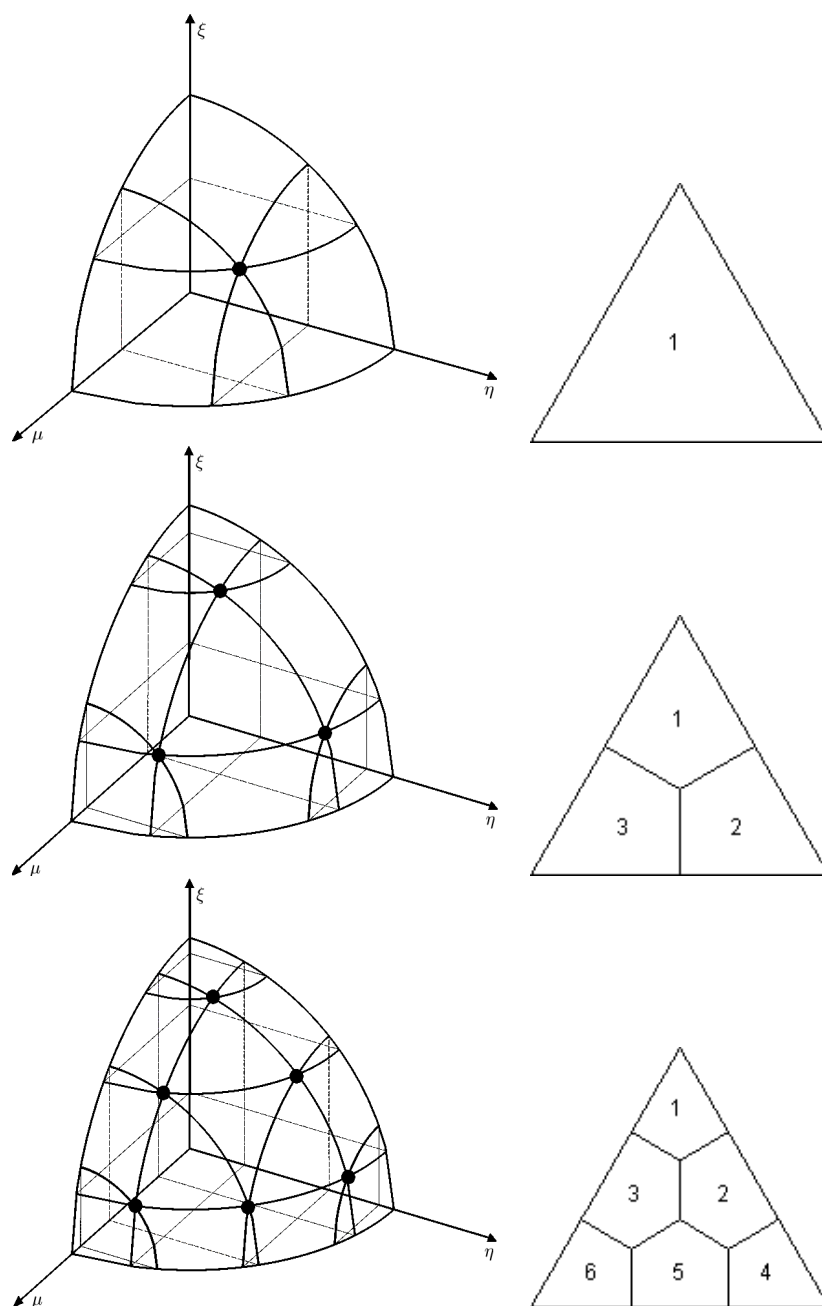


Figura A.1: Arranjo das direções e pesos para as quadraturas S_2 , S_4 e S_6 .

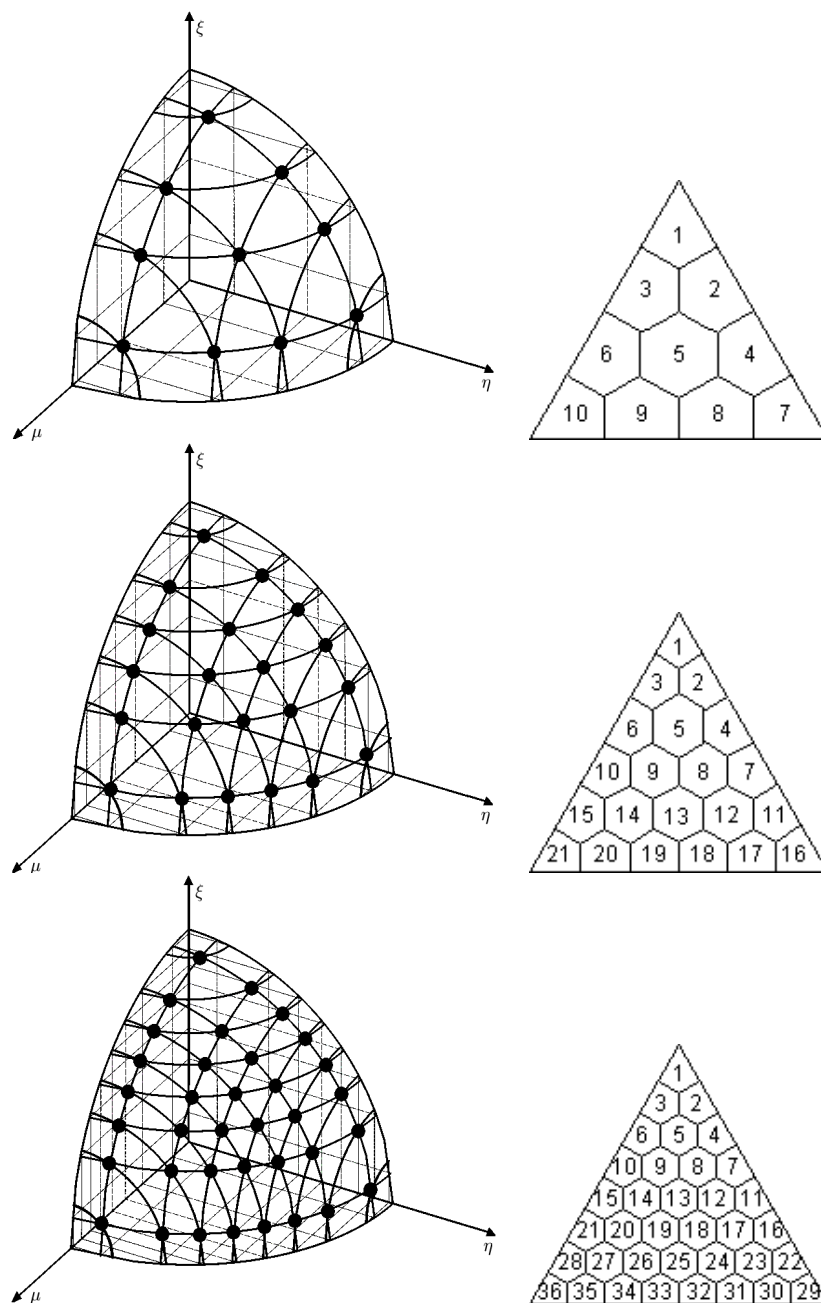


Figura A.2: Arranjo das direções e pesos para as quadraturas S_8 , S_{12} e S_{16} .

Apêndice B EQUAÇÕES NODAIS: APROXIMAÇÃO POR FLUXOS MÉDIOS

Como etapa preliminar para o desenvolvimento da formulação proposta aqui, seguiu-se o trabalho de Cabrera [18] onde, através da reprodução do procedimento, foi possível checar às equações e, com a implementação, conseguiu-se obter os mesmos resultados numéricos.

Esta verificação foi importante, no sentido de validar o código computacional e os resultados. Através dela, além da publicação [7], também foi possível estender a formulação para a resolução de outro problema-teste, o qual foi apresentado no exame de qualificação.

Sendo assim, este apêndice será dedicado a resolução do problema proposto por Watanabe e Maynard [77], seguindo a formulação apresentada em [18], onde as condições de contorno nas direções não-incidentes são consideradas proporcionais aos fluxos médios.

Dessa forma, parte-se das equações em ordenadas discretas integradas nas variáveis espaciais y e x , sendo

$$\begin{aligned} \mu_i \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_i) + \frac{\eta_i}{2d} [\Psi(x, d, \mathbf{\Omega}_i) - \Psi(x, -d, \mathbf{\Omega}_i)] + \\ + \sigma_t \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_i) = Q_y(x) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})] \end{aligned} \quad (\text{B.1})$$

e

$$\begin{aligned} - \mu_i \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + \frac{\eta_i}{2d} [\Psi(x, d, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) - \Psi(x, -d, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})] + \\ + \sigma_t \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = Q_y(x) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})], \end{aligned} \quad (\text{B.2})$$

referentes às equações (2.15) e (2.16) e

$$\eta_i \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_i) + \frac{\mu_i}{2b} [\Psi(b, y, \mathbf{\Omega}_i) - \Psi(-b, y, \mathbf{\Omega}_i)] + \sigma_t \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_i) = Q_x(y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^M w_k \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_k) \quad (\text{B.3})$$

e

$$-\eta_i \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + \frac{\mu_i}{2b} [\Psi(b, y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) - \Psi(-b, y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2})] + \sigma_t \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = Q_x(y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^M w_k \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_k), \quad (\text{B.4})$$

com relação as equações (2.23) e (2.24).

Como visto no capítulo 2, devido ao processo de integração, surgem termos referentes aos contornos que só são conhecidos nas direções incidentes, como mostram as equações (5.2) à (5.5). No caso dos fluxos angulares nas direções não-incidentes, Cabrera [18] propôs que estes termos fossem considerados proporcionais aos fluxos angulares médios (como pode ser visto nas equações (4.1) à (4.4)), fazendo com que as equações (B.1) e (B.2) sejam subdivididas, resultando em

$$\begin{aligned} \mu_i \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_i) + (\sigma_t + \eta_i K_1) \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_i) &= \\ &= Q_y(x) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})], \quad (\text{B.5}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \mu_{i+M/4} \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) + (\sigma_t - \eta_{i+M/4} K_2) \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) &= \\ &= Q_y(x) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})], \quad (\text{B.6}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} -\mu_i \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + (\sigma_t + \eta_i K_1) \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) &= \\ &= Q_y(x) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})] \quad (\text{B.7}) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
& -\mu_{i+M/4} \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{i+3M/4}) + (\sigma_t - \eta_{i+M/4} K_2) \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{i+3M/4}) = \\
& = Q_y(x) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_y(x, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})], \quad (\text{B.8})
\end{aligned}$$

considerando $i = 1, \dots, M/4$, $K_1 = \widehat{K}_1/2d$ e $K_2 = \widehat{K}_2/2d$, sendo \widehat{K}_1 e \widehat{K}_2 parâmetros estimados *a priori*.

Para o problema integrado em x , o uso das condições de contorno e das aproximações referidas acima, faz com que as equações (B.3) e (B.4) também sejam subdivididas, resultando em

$$\begin{aligned}
& \eta_i \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_i) + (\sigma_t + \mu_i L_1) \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_i) = \\
& = Q_x(y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})], \quad (\text{B.9})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \eta_{i+M/4} \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) + (\sigma_t - \mu_{i+M/4} L_2) \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) = \\
& = Q_x(y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})], \quad (\text{B.10})
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\eta_i \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + (\sigma_t + \mu_i L_1) \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \\
& = Q_x(y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})] \quad (\text{B.11})
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
& -\eta_{i+M/4} \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{i+3M/4}) + (\sigma_t - \mu_{i+M/4} L_2) \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{i+3M/4}) = \\
& = Q_x(y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_k) + \Psi_x(y, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})], \quad (\text{B.12})
\end{aligned}$$

onde $i = 1, \dots, M/4$, $L_1 = \widehat{L}_1/2d$ e $L_2 = \widehat{L}_2/2d$, com \widehat{L}_1 e \widehat{L}_2 parâmetros também estimados *a priori*.

Diferente dos métodos nodais existentes na literatura [4, 12, 15], que acabam dificultando o tratamento da fonte por somar a ela as aproximações das condições de contorno desconhecidas, a formulação proposta por Cabrera [18] faz com que estes termos referentes à fronteira possam ser tratados ainda no problema homogêneo, sem acrescentar maiores dificuldades na resolução pelo método ADO, bem como facilitando a implementação computacional.

Outro fato importante a ressaltar, com base nas equações (B.5) à (B.12), é o desacoplamento dos sistemas, fazendo com que cada problema unidimensional possa ser trabalhado separadamente.

Por este motivo, as próximas seções serão dedicadas à resolução das equações nodais integradas em y , sendo análogo o desenvolvimento para as equações na outra variável.

B.1 Solução homogênea

Para as equações (B.5) à (B.8), propõe-se que a solução homogênea tenha mesma forma da equação (3.1). Com isto, obtém-se o seguinte sistema algébrico

$$\begin{aligned} -\frac{\mu_i}{\nu} \Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i) + (\sigma_t + \eta_i K_1) \Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i) &= \\ &= \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_k) + \Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})], \end{aligned} \quad (\text{B.13})$$

$$\begin{aligned} -\frac{\mu_{i+M/4}}{\nu} \Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) + (\sigma_t - \eta_{i+M/4} K_2) \Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) &= \\ &= \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_k) + \Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})], \end{aligned} \quad (\text{B.14})$$

$$\begin{aligned} \frac{\mu_i}{\nu} \Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) + (\sigma_t + \eta_i K_1) \Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) &= \\ &= \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_k) + \Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})] \end{aligned} \quad (\text{B.15})$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\mu_{i+M/4}}{\nu} \Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{i+3M/4}) + (\sigma_t - \eta_{i+M/4} K_2) \Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{i+3M/4}) = \\ = \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_k) + \Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})], \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

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

Baseado nas Eqs. (B.13) à (B.16), nota-se que novamente a solução do problema homogêneo passa a depender basicamente de resolver um problema de autovalores, onde ν representa os autovalores e $\Phi(\nu, \mathbf{\Omega}_i)$ seus respectivos autovetores. Nota-se também que as constantes provenientes da aproximação dos contornos contribuirão para a obtenção destes autovalores e autovetores. Assim, considerando as expressões (3.4) e (3.5), soma-se as equações (B.13) e (B.15), bem como as equações (B.14) e (B.16), resultando em um sistema que depende de U_y e V_y

$$V_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i) = \frac{\nu}{\mu_i} (\sigma_t + \eta_i K_1) U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i) - \frac{\nu \sigma_s}{2\mu_i} \sum_{k=1}^{M/2} U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_k) \quad (\text{B.17})$$

e

$$\begin{aligned} V_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) = \frac{\nu}{\mu_{i+M/4}} (\sigma_t - \eta_{i+M/4} K_2) U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) - \\ - \frac{\nu \sigma_s}{2\mu_{i+M/4}} \sum_{k=1}^{M/2} U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_k), \end{aligned} \quad (\text{B.18})$$

com $i = 1, \dots, M/4$. Por outro lado, se forem subtraídas as equações (B.15) de (B.13) e (B.16) de (B.14), ainda considerando as equações (3.4) e (3.5), obtém-se também as expressões

$$U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i) = \frac{\nu}{\mu_i} (\sigma_t + \eta_i K_1) V_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i), \quad (\text{B.19})$$

$$U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) = \frac{\nu}{\mu_{i+M/4}} (\sigma_t - \eta_{i+M/4} K_2) V_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}), \quad (\text{B.20})$$

com $i = 1, \dots, M/4$.

Finalmente, substituindo as equações (B.19) e (B.20) em (B.17) e (B.18), chega-se no problema de autovalores

$$\lambda_y U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i) = \frac{1}{\mu_i^2} (\sigma_t + \eta_i K_1)^2 U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i) - \frac{\sigma_s}{2\mu_i^2} (\sigma_t + \eta_i K_1) \sum_{k=1}^{M/2} w_k U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_k) \quad (\text{B.21})$$

e

$$\lambda_y U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) = \frac{1}{\mu_{i+M/4}^2} (\sigma_t - \eta_{i+M/4} K_2)^2 U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{i+M/4}) - \frac{\sigma_s}{2\mu_{i+M/4}^2} (\sigma_t - \eta_{i+M/4} K_2) \sum_{k=1}^{M/2} w_k U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_k), \quad (\text{B.22})$$

onde $i = 1, \dots, M/4$ e

$$\lambda_y = \frac{1}{\nu^2}. \quad (\text{B.23})$$

O problema de autovalores definido pelas equações (B.21) e (B.22), também pode ser representados na forma matricial

$$[\mathbf{D}_y - \mathbf{A}_y] \mathbf{U}_y = \lambda_y \mathbf{U}_y, \quad (\text{B.24})$$

onde

$$\mathbf{D}_y = \text{diag} \left\{ \frac{1}{\mu_1^2} (\sigma_t + \eta_1 K_1)^2, \dots, \frac{1}{\mu_{M/4}^2} (\sigma_t + \eta_{M/4} K_1)^2, \right. \\ \left. , \frac{1}{\mu_{M/4+1}^2} (\sigma_t - \eta_{M/4+1} K_2)^2, \dots, \frac{1}{\mu_{M/2}^2} (\sigma_t - \eta_{M/2} K_2)^2 \right\} \quad (\text{B.25})$$

e as componentes de \mathbf{A}_y são dadas por

$$\mathbf{A}_y(i, j) = \begin{cases} \frac{\sigma_s w_j}{2\mu_i^2} (\sigma_t + \eta_i K_1), & i = 1, \dots, M/4 \\ \frac{\sigma_s w_j}{2\mu_i^2} (\sigma_t - \eta_i K_2), & i = M/4 + 1, \dots, M/2 \end{cases} \quad (\text{B.26})$$

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

Uma vez resolvido o problema de autovalores e determinadas as $M/2$ constantes de separação ν_j , usa-se as equações (3.13) e (3.14) para definir as autofunções

e então escrever a solução homogênea. Note que, apesar do problema de autovalores ser definido por mais de uma sentença, possui o mesmo formato do problema de autovalores descrito pela equação (3.9) e, devido à mesma escolha do ordenamento das direções feita no capítulo 2, também consegue-se montar um problema de autovalores reduzido.

Para escrever a solução homogênea, considerou-se apenas os valores positivos ν_j e, baseado em Garcia et al [36], definiu-se as soluções homogênea como

$$\Psi_{y,k}^h(x, \Omega_i) = \sum_{j=1}^{M/2} [A_{j,k} \Phi_y(\nu_j, \Omega_i) e^{-(x-b_{k-1})/\nu_j} + B_{j,k} \Phi_y(\nu_j, \Omega_{i+M/2}) e^{-(b_k-x)/\nu_j}], \quad (\text{B.27})$$

$$\Psi_{y,k}^h(x, \Omega_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^N [A_{j,k} \Phi_y(\nu_j, \Omega_{i+M/2}) e^{-(x-b_{k-1})/\nu_j} + B_{j,k} \Phi_y(\nu_j, \Omega_i) e^{-(b_k-x)/\nu_j}], \quad (\text{B.28})$$

para $i = 1, \dots, M/2$, $x \in [b_{k-1}, b_k]$, com $-b < b_{k-1} < b_k < b$ e k sendo o número de subdivisões que se pretende fazer do domínio $[-b, b]$, $A_{j,k}$ e $B_{j,k}$ representam os coeficientes da solução relativos ao intervalo k e à constante de separação ν_j . No caso de dividir o domínio em três partes (portanto $k = 3$), a subdivisão do domínio está a ilustrada na Figura B.1

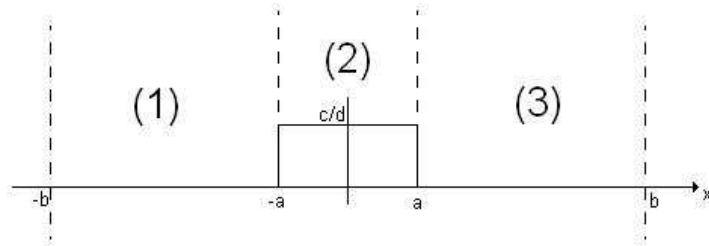


Figura B.1: Representação das subdivisões da solução no domínio.

B.2 Solução particular

Afim de completar a resolução do problema unidimensional, é necessária a determinação das soluções particulares para as Eqs. (B.5) à (B.8). Sendo assim, considerando que a fonte $Q(x, y)$ é dada pela equação (5.1) e que versão integrada desta fonte é representada pela equação (5.7), propõe-se que a solução particular

seja da forma

$$\Psi_{y,k}^p(\Omega_i) = C_{i,k}, \quad (\text{B.29})$$

com $i = 1, \dots, M$ e k indica a qual intervalo a solução particular se refere. Substituindo a equação (B.29) nas equações (B.5) à (B.8), obtém-se o sistema

$$(\sigma_t + K_1\eta_i)C_{i,k} - \frac{\sigma_s}{4} \sum_{j=1}^{M/2} w_j [C_{j,k} + C_{j+M/2,k}] = Q_y(x), \quad (\text{B.30})$$

$$(\sigma_t - K_2\eta_{i+M/4})C_{i+M/4,k} - \frac{\sigma_s}{4} \sum_{j=1}^{M/2} w_j [C_{j,k} + C_{j+M/2,k}] = Q_y(x), \quad (\text{B.31})$$

$$(\sigma_t + K_1\eta_i)C_{i+M/2,k} - \frac{\sigma_s}{4} \sum_{j=1}^{M/2} w_j [C_{j,k} + C_{j+M/2,k}] = Q_y(x), \quad (\text{B.32})$$

$$(\sigma_t - K_2\eta_{i+M/4})C_{i+3M/4,k} - \frac{\sigma_s}{4} \sum_{j=1}^{M/2} w_j [C_{j,k} + C_{j+M/2,k}] = Q_y(x), \quad (\text{B.33})$$

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

Resolvido o sistema e determinados os coeficientes $C_{i,k}$, o próximo passo é escrever a solução geral do problema unidimensional integrado na variável y e com ela, juntamente com as condições de contorno dadas pelas equações (5.4) e (5.5), montar um sistema para a obtenção dos coeficientes das soluções homogêneas para cada subdivisão do domínio.

B.3 Solução geral do problema integrado em y

Considerando que o problema é definido pelas equações (B.5) à (B.8) e usando a versão integrada das condições (5.4) e (5.5), a solução geral do problema pode ser escrita na forma

$$\Psi_{y,k}(x, \Omega_i) = \Psi_{y,k}^h(x, \Omega_i) + \Psi_{y,k}^p(x, \Omega_i). \quad (\text{B.34})$$

Considerando as características do problema proposto por Watanabe e Maynard [77], o intervalo $[-b, b]$ é dividido em três subintervalos como ilustrado na Figura B.1, onde associa-se os índices $k = 1, 2$ e 3 intervalos abaixo

- Intervalo 1: $[a_0, a_1] = [-b, -a]$;
- Intervalo 2: $[a_1, a_2] = [-a, a]$;
- Intervalo 3: $[a_2, a_3] = [a, b]$.

Esta separação do domínio em intervalos permite que se defina as soluções gerais para cada região. Assim, considerando as equações (B.27), (B.28) e (B.29), para $i = 1, \dots, M/2$, tem-se

$$\begin{aligned} \Psi_{y,1}(x, \mathbf{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^{M/2} [A_{j,1} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(x+b)/\nu_j} + \\ + B_{j,1} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{(a+x)/\nu_j}] + C_{i,1}, \end{aligned} \quad (\text{B.35})$$

$$\begin{aligned} \Psi_{y,1}(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^N [A_{j,1} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(x+b)/\nu_j} + \\ + B_{j,1} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) e^{(a+x)/\nu_j}] + C_{i+M/2,1}, \end{aligned} \quad (\text{B.36})$$

quando x estiver na região 1;

$$\begin{aligned} \Psi_{y,2}(x, \mathbf{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^{M/2} [A_{j,2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(x+a)/\nu_j} + \\ + B_{j,2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(a-x)/\nu_j}] + C_{i,2}, \end{aligned} \quad (\text{B.37})$$

$$\begin{aligned} \Psi_{y,2}(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^N [A_{j,2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(x+a)/\nu_j} + \\ + B_{j,2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(a-x)/\nu_j}] + C_{i+M/2,2}, \end{aligned} \quad (\text{B.38})$$

quando x estiver na região 2, e

$$\begin{aligned} \Psi_{y,3}(x, \mathbf{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^{M/2} [A_{j,3} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(x-a)/\nu_j} + \\ + B_{j,3} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(b-x)/\nu_j}] + C_{i,3}, \end{aligned} \quad (\text{B.39})$$

$$\begin{aligned} \Psi_{y,3}(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^N [A_{j,3} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(x+a)/\nu_j} + \\ + B_{j,3} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(b-x)/\nu_j}] + C_{i+M/2,3}, \end{aligned} \quad (\text{B.40})$$

quando x estiver na região 3.

Em particular, devido ao tipo de fonte do problema, $C_{i,1} = C_{i,3} = 0$.

B.4 Coeficientes da solução homogênea

Para definir completamente as soluções descritas pelas equações (B.35) à (B.40), é necessário determinar os coeficientes referentes a solução homogênea ($A_{j,k}$ e $B_{j,k}$ para $k = 1, 2, 3$ e $j = 1, \dots, M/2$). Como parte das condições necessárias, tem-se as versões integradas das equações (5.4) e (5.5)

$$\Psi_y(-b, \mathbf{\Omega}_i) = 0, \quad i = 1, \dots, M/2, \quad (\text{B.41})$$

$$\Psi_y(b, \mathbf{\Omega}_i) = 0, \quad i = M/2 + 1, \dots, M, \quad (\text{B.42})$$

resultando nas primeiras M equações do sistema

$$\sum_{j=1}^{M/2} A_{j,1} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) + B_{j,1} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(b-a)/\nu_j} = 0, \quad (\text{B.43})$$

$$\sum_{j=1}^{M/2} A_{j,3} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(b-a)/\nu_j} + B_{j,3} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) = 0, \quad (\text{B.44})$$

para $i = 1, \dots, M/2$. As outras $2M$ equações necessárias são obtidas através de condições de continuidade impostas na fronteira entre as regiões 1, 2 e 3. Estas condições de continuidade consistem em estabelecer que o fluxo que sai de uma região em uma direção i é igual ao fluxo que entra na outra região nesta mesma direção i . Em consideração a isto, para $i = 1, \dots, M/2$, tem-se

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) [A_{j,1} e^{-(b-a)/\nu_j} - A_{j,2}] + \\ + \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) [B_{j,1} - B_{j,2} e^{-2a/\nu_j}] = C_{i,2}, \end{aligned} \quad (\text{B.45})$$

$$\sum_{j=1}^{M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) [A_{j,1} e^{-(b-a)/\nu_j} - A_{j,2}] + \\ + \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) [B_{j,1} - B_{j,2} e^{-2a/\nu_j}] = C_{i+M/2,2}, \quad (\text{B.46})$$

$$\sum_{j=1}^{M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) [A_{j,3} - A_{j,2} e^{-2a/\nu_j}] + \\ + \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) [B_{j,3} e^{-(b-a)/\nu_j} - B_{j,2}] = C_{i,2}, \quad (\text{B.47})$$

$$\sum_{j=1}^{M/2} \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) [A_{j,3} - A_{j,2} e^{-2a/\nu_j}] + \\ + \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) [B_{j,3} e^{-(b-a)/\nu_j} - B_{j,2}] = C_{i+M/2,2}. \quad (\text{B.48})$$

Assim, as equações (B.43) à (B.48) formam um sistema de tamanho $3M \times 3M$, do qual são extraídos os $3M$ coeficientes da solução homogênea, ficando a solução completamente definida, possibilitando o cálculo das quantidades de interesse mencionadas no capítulo 6.

B.5 Problema teste

Como extensão do trabalho de Cabrera [18], fez-se a implementação do método descrito acima para o problema proposto por Watanabe e Maynard [77], onde utilizou-se os parâmetros definidos *a priori* como $K = \hat{K}_1 = \hat{K}_2 = \hat{L}_1 = \hat{L}_2$, gerando os resultados apresentados na Tabela B.1.

Com os resultados apresentados na Tabela (B.1), observa-se que os resultados tendem a convergir para cada escolha de K , conseguindo uma média de 2 dígitos de concordância. Além disso, conseguiu-se encontrar um valor para o K de forma a reproduzir o resultado obtido na literatura com cinco dígitos de concordância.

Contudo, apesar do código gerar estes resultados em poucos segundos e os sistemas envolvidos serem bem condicionados, esta formulação possui algumas limita-

Tabela B.1: Fuga de nêutrons J_N o PROBLEMA 2 usando $\sigma_t = 0.75$ e $\sigma_s = 0.5$.

| N | $K = 0.3$ | $K = 0.31579$ | $K = 0.32$ |
|----------------------------------|-----------|---------------|------------|
| 2 | 0.43708 | 0.45789 | 0.46340 |
| 4 | 0.39941 | 0.41850 | 0.42356 |
| 6 | 0.39101 | 0.40974 | 0.41471 |
| 8 | 0.38694 | 0.40550 | 0.41042 |
| 12 | 0.38389 | 0.40233 | 0.40722 |
| 16 | 0.38263 | 0.40101 | 0.40589 |
| MCNP [77] = $0.40101 \pm 0.16\%$ | | | |

ções como, por exemplo, a necessidade de definir a *priori* o valor dos parâmetros K 's e L 's, e a restrição de várias direções a um mesmo fator.