

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

Métodos Analíticos e Computacionais em Geofísica Nuclear

por

Daniella Machado Schulz

Dissertação submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de
Mestre em Matemática Aplicada

Profa. Dra. Liliane Basso Barichello
Orientadora

Porto Alegre, 14 de março de 2014.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Schulz, Daniella Machado

Métodos Analíticos e Computacionais em Geofísica Nuclear / Daniella Machado Schulz.—Porto Alegre: PPGMAP da UFRGS, 2014.

63 p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2014.

Orientadora: Basso Barichello, Liliane

Dissertação: Matemática Aplicada
Teoria de Transporte, Geofísica Nuclear, Método Nodal, Métodos Iterativo

Métodos Analíticos e Computacionais em Geofísica Nuclear

por

Daniella Machado Schulz

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

Mestre em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Fenômenos de Transporte

Orientadora: Profa. Dra. Liliane Basso Barichello

Banca examinadora:

Prof. Dr. Luiz Mariano Paes de Carvalho Filho
Departamento de Matemática/UFRJ

Prof. Dr. Renato Machado de Brito
PPGMap/UFRGS

Prof. Dr. Rudnei Dias da Cunha
IM/UFRGS

Dissertação apresentada e aprovada em
14 de março de 2014.

Prof. Dra. Maria Cristina Varriale
Coordenadora

AGRADECIMENTOS

Nenhuma conquista tem realmente valor se não temos com quem compartilhar nossas alegrias, e dividir nossas dificuldades. Essa etapa concluída teve a imprescindível participação de pessoas muito especiais, sem elas certamente eu não teria conseguido.

A Deus, pela vida, e por nos dar uma nova oportunidade a cada dia, que pôs em meu caminho pessoas maravilhosas e me permitiu chegar até aqui.

Aos meus pais por toda a compreensão, incentivo, apoio emocional e paciência nos dias em que eu não tinha mais coragem para seguir. São os seus exemplos que me fazem ultrapassar qualquer obstáculo e conquistar os meus sonhos.

A Eliseu Venites Filho, que entrou no meio dessa viagem e me ajudou de todas as formas possíveis, que me acalmou a cada dia, teve paciência de ler e reler meu trabalho e esteve sempre ao meu lado.

A professora Dra. Liliane Basso Barichello pela orientação, confiança e incentivo durante toda a execução desse trabalho. Pela oportunidade de aprender com sua dedicação, competência e experiência.

A professora Dra. Sani de Carvalho Rutz da Silva pela insistência e persistência em me fazer dar esse passo. Por sempre acreditar em mim.

Aos professores Dr. Renato Machado de Brito e Dr. Rudnei Dias da Cunha pela colaboração na elaboração do trabalho.

As colegas Solange Regina Cromianski e Camila Becker Picoloto pelo auxílio acadêmico e companheirismo constante.

A Universidade Federal do Rio Grande do Sul, em particular, ao Programa de Pós Graduação em Matemática Aplicada.

Ao Programa Petrobras de Desenvolvimento de Recursos Humanos, PFRH, pelo apoio financeiro.

A todos que contribuíram direta ou indiretamente, para essa realização, os meus sinceros agradecimentos.

Sumário

AGRADECIMENTOS	iv
LISTA DE FIGURAS	viii
LISTA DE TABELAS	ix
LISTA DE SÍMBOLOS	x
RESUMO	xii
ABSTRACT	xiii
1 TÉCNICAS NUCLEARES DE PROSPECÇÃO	1
1.1 Introdução	1
1.2 Perfilagem de poços abertos para avaliação das formações	2
1.3 Técnicas Nucleares de Medição	5
2 MODELAGEM	10
2.1 Métodos Determinísticos	13
3 EQUAÇÃO DE TRANSPORTE ÍNTEGRO-DIFERENCIAL	15
4 MÉTODO NODAL	25
4.1 Uma Solução Explícita para o Problema	25
4.2 Uma Abordagem Nodal	32
4.3 Resultados Numéricos	36
5 MÉTODOS ITERATIVOS	42
5.1 Método <i>Diamond Difference</i> (DD)	48
5.2 Método Degrau	48
5.3 Método Degrau Característico (DC)	49
5.4 Resultados Numéricos	51

6 CONCLUSÕES	60
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	61

Lista de Figuras

Figura 1.1	Modelo de ferramenta para medição de porosidade	7
Figura 4.1	Erro de A^* e A conforme valor de c e espessura	39
Figura 4.2	Erro de B^* e B conforme valor de c e espessura (log)	40
Figura 5.1	Grade Espacial	46

Lista de Tabelas

Tabela 4.1	Valores aproximados (A^* e B^*) e exatos (A e B) para o albedo e o fator de transmissão considerando $c = 0,8$	37
Tabela 4.2	Valores aproximados (A^* e B^*) e exatos (A e B) para o albedo e o fator de transmissão considerando $c = 0,2$	38
Tabela 4.3	Valores aproximados (A^* e B^*) e exatos (A e B) para o albedo e o fator de transmissão considerando $c = 0,5$	38
Tabela 4.4	Valores aproximados (A^* e B^*) e exatos (A e B) para o albedo e o fator de transmissão considerando $c = 0,99$	39
Tabela 4.5	Valores de c e da espessura para termos erros aceitáveis do albedo	40
Tabela 4.6	Valores de c e da espessura para termos erros aceitáveis do fator de transmissão	41
Tabela 5.1	Convergência do fluxo escalar nos esquemas para $\rho = 0,1$	52
Tabela 5.2	Convergência do fluxo escalar nos esquemas para $\rho = 0,4$	53
Tabela 5.3	Convergência do fluxo escalar nos esquemas para $\rho = 0,6$	54
Tabela 5.4	Convergência dos esquemas para $\rho = 0,99$	55
Tabela 5.5	Convergência do fluxo escalar para o esquema iterativo DD para $X = 20$	56
Tabela 5.6	Convergência do fluxo escalar para o esquema iterativo Degrau para $X = 20$	56
Tabela 5.7	Convergência do fluxo escalar para o esquema iterativo DC para $X = 20$	57
Tabela 5.8	Convergência do fluxo escalar para o esquema iterativo DD para $X = 50$	57
Tabela 5.9	Convergência do fluxo escalar para o esquema iterativo Degrau para $X = 50$	58
Tabela 5.10	Convergência do fluxo escalar para o esquema iterativo DC para $X = 50$	59

LISTA DE SÍMBOLOS

\mathbf{r}	Vetor direção
\mathbf{v}	Vetor velocidade
v	Magnitude da velocidade
Ω	Vetor unitário de direção
E	Energia
t	Tempo
θ	Ângulo polar
ϕ	Ângulo azimutal
σ	Seção de choque macroscópica
σ_t	Seção de choque total
σ_s	Seção de choque de espalhamento
σ_f	Seção de choque de fissão
λ	Livre caminho médio
$N(\mathbf{r}, \Omega, E, t)$	Densidade angular
$\psi(\mathbf{r}, \Omega, E, t)$	Fluxo angular
$S(\mathbf{r}, \Omega, E, t)$	Fonte externa
M	Matriz diagonal com os nós da quadratura
W	Matriz diagonal com os pesos da quadratura
$Y(\nu, \mu)$	Soluções propostas para o sistema de equações diferenciais ordinárias

v	Vetor $N \times 1$ das soluções propostas para o sistema de equações diferenciais ordinárias
$\phi(\tau)$	Fluxo escalar
q	Fluxo de radiação de calor parcial
L	Operador de fuga e colisão
S	Operador espalhamento
ρ	Razão espectral

RESUMO

Neste trabalho, um estudo preliminar sobre o uso de técnicas nucleares na prospecção e monitoramento de poços de petróleo é reportado. Em particular, a modelagem da avaliação da intensidade de radiação emitida de fontes nucleares presentes em sondas usadas para obtenção de dados dos poços, é discutida. Tal modelagem se fundamenta na utilização e solução da equação de transporte de partículas. Apesar de o problema ser inerentemente tridimensional, a abordagem do modelo matemático, uma equação íntegro-diferencial, é muito complexa neste caso. Neste sentido, um esquema conhecido como nodal, usualmente utilizado no tratamento de problemas multidimensionais, é aqui investigado para casos unidimensionais. Duas formas de tratamento do problema unidimensional nodal são aqui apresentadas: uma baseada em procedimentos analíticos e outra em procedimentos numéricos que envolvem esquemas iterativos. Resultados numéricos são apresentados e discutidos, para casos onde soluções explícitas conhecidas podem ser usadas para comparação.

ABSTRACT

In this work, a preliminary study on nuclear techniques applied to the petroleum industry, is reported. In particular, the evaluation of the radiation intensity emitted from the radiation sources present in nuclear tools is discussed. The modeling is based on the particle transport equation. Although three-dimensional cases are the one related to real problems, its solution is of high difficulty, due to the complexity of the mathematical model, an integro-differential equation. In this sense, a so-called nodal scheme usually applied to the treatment of multidimensional problems, is here investigated for the one-dimensional case. Two nodal approaches are described here: a first one based on analytical techniques and the second one based on numerical schemes which involve iterative processes. Numerical results are presented and discussed for problems where explicit solutions are available in the literature.

1 TÉCNICAS NUCLEARES DE PROSPECÇÃO

1.1 Introdução

Na prospecção e na própria exploração de um poço de petróleo, utilizam-se técnicas nucleares de medição, diretas e indiretas. Estas auxiliam na determinação das características do subsolo e suas formações rochosas, para que se possa avaliar a ocorrência de quantidades comerciais dos preciosos insumos energéticos como o óleo e o gás.

Ao contrário do que muitos pensam, o petróleo não se encontra nas profundezas do subsolo em espaços livres para o seu armazenamento. Considerando algo mais conhecido como um poço de água que é perfurado, o líquido migra de uma rocha para a coluna do poço, por gravidade ou por diferença de pressão. A rocha que contém o líquido (usualmente uma rocha sedimentar, como um arenito ou uma rocha calcária), deve ser porosa para que haja fluidez. Ou seja, o fluido está armazenado na própria rocha (chamada então de rocha reservatório) que retém o fluido em seus poros.

O mesmo acontece com o petróleo, apenas que esse é mais viscoso do que a água, podendo ter dificuldades para escoar pelos poros da rocha reservatório se esses não formarem uma estrutura adequada. Os poros devem estar interligados entre si, sem a presença de sedimentos argilosos que possam interromper o fluxo. Idealmente, se o volume total poroso estiver preenchido com hidrocarbonetos o reservatório provavelmente será comercialmente interessante. Cabe ainda salientar que, devido as suas gêneses a partir de resíduos orgânicos, da profundidade em que se encontram e da estratificação própria dos fluidos, os reservatórios de hidrocarbonetos contêm tanto líquidos como gases.

Assim, é crucial que a rocha reservatório seja porosa. Então, as medidas da porosidade e do conteúdo da rocha são importantíssimas. Essas medições utilizam técnicas nucleares.

Segundo Badruzzaman [5], técnicas de medição nuclear para estudar meios geológicos foram inicialmente usadas em 1939, e têm desempenhado um papel fundamental na resolução de uma vasta gama de problemas geofísicos e de exploração mineral. Sondas nucleares contendo fontes de nêutrons e fótons e um ou mais detectores têm sido usadas para caracterizar geologias subterrâneas desde a década de 40 e métodos de transporte de radiação têm sido usados para simular a resposta dessas sondas desde os anos 60 [20].

1.2 Perfilagem de poços abertos para avaliação das formações

Denominam-se avaliações de formações as atividades e estudos que visam definir em termos qualitativos e quantitativos o potencial de uma jazida petrolífera, isto é, a sua capacidade produtiva e valoração das suas reservas de óleo e gás [23]. A principal técnica de avaliação baseia-se na perfilagem a poço aberto, *Well Logging* (conjunto dos registros das informações obtidas ao longo de um poço aberto para prospecção das características do solo perfurado), no teste de formação a poço aberto, nos testes de pressão após o revestimento do poço e na perfilagem de produção. Perfilagem é uma operação de registro das características físicas das formações geológicas e dos fluidos presentes nas mesmas condições mecânicas do poço, através de sensores apropriados, cuja resposta é transmitida para a superfície através de cabos elétricos ou através de LWD (*logging while drilling*), que é a perfilagem feita durante a perfuração.

As técnicas nucleares são utilizadas no *Well Logging*. Um estudo geológico e geofísico determina a localização mais adequada de um poço pioneiro. É nesse poço que são introduzidas sondas, com diversos sensores, que percorrem toda a extensão perfurada, colhendo sinais elétricos que traduzem algumas grandezas de interesse que caracterizam as paredes do subsolo perfurado. Grandezas como argilidade, porosidade, densidade, resistividade, velocidade de propagação do som e outras são medidas direta ou indiretamente. Essa técnica de investigação das propriedades das camadas perfuradas foi inicialmente utilizada para medir apenas a condutividade do solo ao longo da perfuração em 1927, pelos irmãos Schlumberger e colaboradores em um poço perfurado na Alsácia [15]. Evoluiu muito ao longo dos anos com a adição de novos sensores gradativamente incorporados às novas sondas.

As sondas são normalmente dispositivos cilíndricos de aproximadamente 10 centímetros de diâmetro (ou menos), de modo que possam percorrer perfurações de até 15 centímetros de diâmetro. O comprimento das sondas varia de acordo com a quantidade de sensores e da eletrônica necessária para coleta e transmissão dos sinais até a superfície. Algumas composições podem constituir sondas de até 30 metros de comprimento [15].

Na maioria das aplicações as sondas são introduzidas e recolhidas do poço por dispositivos mecânicos especiais, acionados a partir de uma estação de medição colocada na superfície (usualmente um veículo, por exemplo, um caminhão ou barco), com todo o aparato computacional para aquisição, registro e pré-análise das medições efetuadas. Também, na maioria das sondas ainda se utilizam longos cabos elétricos, para alimentação dos circuitos eletrônicos que elas contêm e para transmissão dos dados adquiridos, bem como para os sinais de controle de operação das mesmas.

Modernamente, já existem sondas incorporadas aos cabeçotes de perfuração do poço de modo que algumas informações podem ser obtidas imediatamente, o anteriormente citado LWD. Devido à rotação do dispositivo de perfuração, as son-

das são montadas numa espécie de colar colocado logo acima do sistema perfurante. A energização dos dispositivos presentes na sonda é então feita por baterias e por geradores rotativos, ao passo que para transmissão dos sinais relativos às medições empregam-se técnicas inovadoras, como a que utiliza pulsos codificados de pressão através da camada de lama propiciada pelos resíduos das rochas e os fluidos de perfuração. Tal técnica permite que se deixe de utilizar os tradicionais cabos elétricos, que nesse caso seriam impossíveis. As velocidades de transmissão são bastante reduzidas, devido às baixas frequências dos pulsos de pressão, mas mesmo assim, suficientes para a aplicação em função das baixíssimas velocidades de avanço da frente de perfuração.

As companhias de óleo usam muitas ferramentas de sondagem no desenho e calibração de instrumentos nucleares, bem como para determinar a litologia (estudo especializado em rochas e suas camadas, formação, idade, coberturas, e todas as suas alterações desde o seu surgimento) e as características fluidas de sub-superfícies de formações rochosas, segundo Serov, John & Hoogenboom [22], pois as abordagens de *Well Logging* descrevem características físicas da formação das rochas ao redor de um poço usando vários tipos de instrumentos [24]. Atualmente elas estão buscando maneiras de melhorar o aproveitamento, assim como tornar novamente ativos, alguns campos petrolíferos já desenvolvidos, isso requer dados precisos sobre o estado do poço, como a saturação do óleo sobre a superfície circundante do poço. Os contornos usados no poço, geralmente constituídos de aço, não permitem o uso de acesso convencional, então as companhias de exploração têm desenvolvido ferramentas nucleares de perfuração de poços de petróleo usando fontes de radiação de nêutrons ou fótons [22].

1.3 Técnicas Nucleares de Medição

As medidas realizadas pelas sondas utilizadas no *Well Logging* são de natureza elétrica, nuclear e acústica.

As medições acústicas referem-se basicamente à determinação da velocidade de propagação do som nas rochas. Estas medições podem auxiliar na determinação da litologia e da porosidade. Também podem servir para determinação de fraturas ou camadas existentes em função das reflexões detectadas.

As medidas de natureza nuclear são oriundas do uso de fontes de nêutrons nas sondas que fazem o *Well Logging*. Essas medidas utilizam raios gama gerados pela interação dos nêutrons com os elementos constituintes das rochas próximas e a atenuação da energia que os próprios nêutrons experimentam ao atravessar camadas de rocha interpostas entre a fonte e os detectores de radiação. Esses dois tipos de radiação penetrante são os únicos que conseguem atravessar a cápsula pressurizada do corpo da sonda e a formação rochosa próxima, gerando um sinal de retorno mensurável nos detectores também localizados na própria sonda.

Primeiramente, as interações entre nêutrons de alta energia e átomos de qualquer material mostram claramente uma redução da energia, quando átomos de hidrogênio estão presentes na estrutura circundante, devido ao pronunciado espalhamento que estes causam. Isto poderia indicar a presença de hidrocarbonetos constituintes de óleo e gás. No entanto, a atenuação da energia é resultante da interação com todos os átomos de hidrogênio presentes, inclusive nos sedimentos argilosos que podem estar preenchendo os poros existentes.

Em segundo lugar, a interação de nêutrons de alta energia com os átomos do material constituinte das rochas pode excitar alguns núcleos, os quais emitirão raios gama bem característicos. Assim, uma espectroscopia de raios gama

permite a identificação de elementos presentes nas rochas circundantes. Desta forma tem-se conhecimento da composição da rocha reservatório (matriz).

Existe também variação na intensidade dos raios gama detectados, em função da estrutura da rocha que os gera, a partir da interação com os nêutrons que nela penetram. Esta variação está diretamente relacionada com a porosidade da rocha.

Cabe ainda ressaltar que a análise da interação, entre a rocha e os nêutrons de alta energia, permite a determinação direta da relação de átomos de Carbono e Oxigênio. Desta forma, pode-se inferir a composição do material orgânico (Carbono, Hidrogênio e Oxigênio) presente e sua provável composição em comparação com as proporções conhecidas nos fluidos de interesse comercial. Outras medidas nucleares utilizadas são as de Ressonância Nuclear Magnética, que permitem quantificar a presença de prótons livres numa formação rochosa. Como estes só podem existir em fluidos, esta é uma medida que auxilia na determinação da porosidade. Se houver movimentação dos fluidos, a mobilidade dos prótons pode indicar maior ou menor viscosidade ou até a migração do fluido (medida indireta de vazão).

As medidas obtidas nos sensores, após a devida interpretação são necessárias para determinar características do material circundante do poço, e a presença de óleo. Para essa interpretação usam-se bancos de dados onde foram utilizadas a mesma técnica em uma série de configurações de poços conhecidos, informações de outras ferramentas de sondagem e cálculos detalhados de transporte de radiação dessas ferramentas e dos ambientes de fundo de poço [22].

Fontes de nêutron Am-Be (Amerício-Berílio) são rotineiramente usadas na sondagem nuclear de petróleo hoje, mas essas fontes são extremamente radioativas por causa da alta intensidade de nêutrons necessária para o método CNL (*Compensated Neutron Logging*). Atualmente são utilizados diferentes tipos de fon-

tes de nêutron. Algumas dessas fontes têm maior sensibilidade para mensurar a porosidade, enquanto outras têm menor erro relativo na sondagem [17].

A divergência na sensibilidade entre diferentes fontes de nêutrons pode ser analisada em termos da interação média de nêutrons num caminho livre médio da formação, definida como a duração do comprimento médio que um nêutron percorre antes de ocorrer a absorção ou espalhamento [17].

Um modelo de equipamento típico na sondagem nuclear de petróleo é apresentado na figura 1.1, a configuração mostrada descreve uma configuração típica em perfilagem de poços [22].

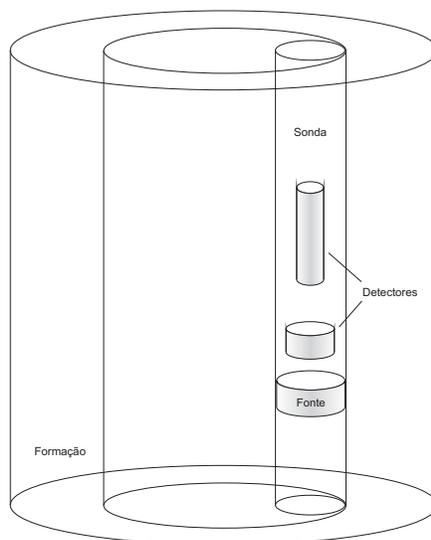


Figura 1.1: Modelo de ferramenta para medição de porosidade

O propósito de cálculos nucleares em sondagem de petróleo é prever e entender os resultados medidos com o máximo de detalhes possível. Além disso, os cálculos podem ser usados para fornecer ferramentas de resposta onde medidas padrões não existem. Conseqüentemente, correções da resposta resultantes de mudanças nas condições do poço podem ser modeladas através do cálculo preciso de

transporte de radiação. Esses cálculos podem fornecer uma visão detalhada sobre a resposta da técnica, que é essencial para o novo desenho ou para fornecer técnicas nucleares [22].

A análise conjunta dos sinais adquiridos no *Well Logging* é que vai permitir uma complementação das informações previamente obtidas pelas análises sísmicas. Não raro os sinais são analisados por diferentes especialistas, uma vez que abrangem diferentes domínios de conhecimento, pela sua própria natureza.

Apesar de as técnicas nucleares na prospecção e exploração do petróleo serem utilizadas há bastante tempo, o refinamento das mesmas é sempre procurado, para que mais detalhes nas características das rochas sejam identificados. Sabe-se que as medições nucleares são de baixa profundidade em relação às paredes do poço e às rochas que o circundam. Tal ocorre porque os níveis de energia detectados resultam de interações com as vizinhanças das paredes do poço e porque tanto as fontes de nêutrons como os detectores estão colocados na própria sonda, afastados longitudinalmente, e não radialmente.

De qualquer forma, o posicionamento de fontes e detectores permite um tratamento matemático bastante simplificado que faz uso de um modelo com geometria cilíndrica. A partir das medições realizadas, estatisticamente consideradas, parâmetros como porosidade, teor de hidrogênio e carbono são calculados de acordo com as características do ambiente próximo.

Há, então, permanente interesse no estudo de algoritmos computacionais de maior eficiência e resolução do que aqueles comumente utilizados, desde que o modelamento físico e matemático seja coerente com as fontes de energia e com a geometria das sondas utilizadas nestas aplicações.

Cálculos de transporte de radiação em problemas de sondagem nuclear de petróleo são bastante difíceis de realizar. Eles são inerentemente tridimensionais e representam meios de penetração profunda. Resultados de cálculos extremamente

precisos são necessários para extrair o máximo de informações possível das medidas [22]. Modelagem desses problemas requer técnicas de transporte de radiação sofisticadas.

Espera-se, pois, que o desenvolvimento desta dissertação possa contribuir com o avanço do conhecimento nesta área.

2 MODELAGEM

Como visto no capítulo anterior, a técnica nuclear do *Well Logging* é baseada na estimativa do fluxo de partículas, nêutrons ou radiação. Esse fluxo pode ser modelado pela equação do transporte, que é uma equação íntegro-diferencial e o tratamento matemático não tem solução analítica para o problema que modela fenômenos reais, particularmente em geometrias complexas, como é o caso da perfuração de poços de petróleo. Nesse sentido, métodos matemáticos e computacionais têm sido estudados e propostos para otimizar o tratamento desses problemas. Segundo Azmy & Sartori [2], os problemas de sondagem de petróleo estão entre os três problemas desafiadores da atualidade, na área das ciências nucleares.

Em busca de uma solução exata para a equação de transporte, em 1960, Kenneth Case propôs o método de expansão em autofunções singulares, conhecido por método de Case, que resolve apenas problemas idealizados utilizando o princípio de separação de variáveis. Além desse método que resolve problemas simplificados, existem outras abordagens para solução da equação de transporte.

Métodos computacionais para simulação de técnicas discutidas no capítulo anterior se baseiam na resolução da equação de transporte de Boltzmann, que tem sido utilizada com sucesso considerável desde o início da década de 60 [10]. Ambos, Monte Carlo (probabilístico) e técnicas determinísticas, têm sido usados na exploração de hidrocarboneto. Na exploração de óleo e gás, métodos de transporte radioativo são usados para obter a calibração de dispositivos de curvas de medidas sobre uma variedade de poços e condições de formação.

A equação de transporte de nêutrons é dada por

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \psi}{\partial t} + \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi + \sigma_t \psi = S, \quad (2.1)$$

onde a fonte, S , em geral contém um termo externo, um de espalhamento e um de fissão, e é escrita como

$$S = S_{ext} + \int_0^\infty \int_{4\pi} \sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E' \rightarrow E) \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E', t) d\boldsymbol{\Omega}' dE' \quad (2.2)$$

$$+ \chi(\mathbf{r}, E') \int_0^\infty \int_{4\pi} v \sigma_f(\mathbf{r}, E') \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E', t) d\boldsymbol{\Omega}' dE',$$

onde $\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E', t)$ é fluxo angular definido no espaço fase, \mathbf{r} é a posição onde está sendo feito o balanço das partículas, $\boldsymbol{\Omega}' = (\theta, \phi)$ é o vetor direção das partículas especificado por θ , ângulo polar variando entre 0 e π , e ϕ , ângulo azimutal variando entre 0 e 2π , E' é a energia da partícula, t é a variável temporal, σ_s e σ_f são a seção de choque de espalhamento e fissão, respectivamente, σ_t é a seção de choque total e a integração é a Riemann.

Em geofísica nuclear, em geral, precisamos considerar somente problemas de transporte linear, onde as seções de choque são independentes do fluxo.

Técnicas numéricas baseadas em aproximação de difusão para a equação (2.1) têm sido usadas em geofísica nuclear desde os anos 60 [5]. Em meados dos anos 70, as métodos de multigrupos, diferenças finitas e ordenadas discretas que resolvem a equação de Boltzmann numericamente assumindo o fluxo angular como discreto na energia, espaço e ângulo, e o correspondente método adjunto para resolver a equação de transporte adjunta, foram primeiramente usados [10].

A complexidade geométrica em problemas de geofísica nuclear representa um desafio para qualquer método determinístico. A habilidade do método de Monte Carlo para melhor manusear esses aspectos e tratar a dependência-tempo em problemas de pulso-fonte têm feito dele o método primário em análise de geofísica nuclear desde os anos 80, ele modela o transporte de radiação em meios como um processo de caminhada aleatória. Técnicas de redução de variação pode trazer melhoras significativas na eficiência e redução do tempo computacional ao método de

Monte Carlo. Esse método tem sido usado para gerar ajustes gráficos para ferramentas de sondagem sobre uma variedade de poços e condições de formação [5].

Além dos métodos diretos, outras abordagens também são citadas na literatura no tratamento de problemas de interesse em geofísica nuclear, como os métodos inversos e os dependentes do tempo.

Métodos de Transporte Inverso são uma classe de métodos que resolvem a equação de Boltzmann inversamente para determinar a seção de choque de fluxos conhecidos, segundo Badruzzaman [5]. Problemas em geofísica nuclear são ditos inversos, no sentido que propriedades de média estão sendo determinadas de resultados medidos. Embora esses métodos pareçam confiáveis, é necessário cuidado ao considerar questões de unicidade, reconstrução, construção e caracterização na ordem desses métodos para que sejam úteis.

É complicado resolver essas questões pelo fato que métodos inversos são frequentemente mal condicionados, ou seja, pequenos erros nas medições podem resultar em um grande erro inaceitável na reconstrução da seção de choque.

Métodos inversos oferecem um potencial para a obtenção de conhecimentos sobre os processos envolvidos sem o grande número de cálculos ou medições necessárias nas abordagens diretas pela força bruta. Contudo, a técnica é mais apropriada para problemas simples. Em problemas complexos, onde uma abordagem iterativa é mais desejável, uma solução explícita pode ser a estimativa inicial.

No que diz respeito ao tratamento de problemas dependentes do tempo, as abordagens de momentos finitos foram recentemente mostradas sendo consideravelmente mais precisas (em problemas unidimensionais) que métodos padrão de tempo dependente, que podem produzir resultados com grandes erros [5].

2.1 Métodos Determinísticos

Nos métodos determinísticos, uma formulação bastante usada na literatura é a de ordenadas discretas (S_N) [13], a ideia principal dessa técnica é substituir o domínio contínuo das variáveis angulares, (θ, ϕ) , por um conjunto de valores discretos, (θ_m, ϕ_m) , denominados ordenadas discretas. Além disso, o termo integral é aproximado por um esquema de quadratura [14], com isso transformamos a equação íntegro-diferencial em um sistema de equações diferenciais parciais de primeira ordem. No caso unidimensional, a formulação de ordenadas discretas é análoga, porém, a partir da equação íntegro diferencial chegamos em um sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem.

Contudo, algumas abordagens em problemas de ordenadas discretas necessitam de uma malha espacial fina para precisão aceitável. Consequentemente, suas aplicações têm geralmente sido limitadas para problemas bidimensionais. Como as configurações geofísicas podem ser tridimensionais, suas geometrias estão aproximadas quando esta técnica é usada, logo, importantes efeitos tridimensionais são excluídos, e o modelo construído tem limitada aplicabilidade.

Desenvolvemos o método ordenadas discretas analítico (ADO) que resolve de forma analítica o problema unidimensional. Esse método, para problemas unidimensionais, tem as vantagens de utilizar um esquema de quadratura arbitrário para determinar as constantes de separação encontradas na solução de um problema de autovalores, mantém solução analítica no domínio espacial, e resultados numéricos se mostram mais eficientes do ponto de vista computacional [21].

Nos últimos anos problemas multidimensionais de transporte têm sido investigados através de metodologias de caráter analítico, utilizando aproximações de ordenadas discretas como mostram os trabalhos de Barichello [6], Barichello & Siewert [8] e Barichello, Cabrera & Prolo Filho [7]. Tais metodologias têm demonstrado vantagens no ganho de tempo computacional e também por não necessitarem

de uma malha espacial fina. O procedimento básico envolvido parte da formulação multidimensional original e desenvolve uma formulação nodal, obtida da integração do problema original e de aproximações feitas nas condições de contorno. Tal abordagem reduz o problema ao tratamento de problemas unidimensionais.

Nos casos multidimensionais, conjuntamente com ordenadas discretas, tem-se usado os métodos nodais, que são uma classe de técnicas numéricas para resolver a equação de Boltzmann [4], onde o domínio espacial é decomposto em nodos (ou células) com seções de choque constantes e o fluxo expresso em termos de um conjunto básico de variáveis espaciais. Esses métodos são usados para reduzir a complexidade, uma vez que, após integração, o problema torna-se mais simples, como mostram os trabalhos de Badruzzaman [4], Barros [9] e Azmy [3].

Neste trabalho pretende-se iniciar o estudo da abordagem nodal a partir de problemas diretos e unidimensionais, para entendimento e comparação de performance com problemas clássicos da literatura, cuja solução exata pode ser determinada, para tanto no próximo capítulo introduziremos a equação do transporte e as simplificações necessárias para aplicação em problemas simples.

3 EQUAÇÃO DE TRANSPORTE ÍNTEGRO-DIFERENCIAL

A equação de Boltzmann foi primeiramente usada na teoria cinética dos gases. Em 1872, ele derivou essa equação estudando o movimento dos gases como partículas. A equação de transporte é a Equação Linear de Boltzmann, que fornece uma descrição qualitativa das distribuições espacial, direcional, energética e temporal das partículas em meios materiais [16]. Essa equação representa uma vasta gama de problemas de transporte, de astrofísica a tráfego veicular [4]. Além desses, é usada para modelar matematicamente vários outros fenômenos da teoria de transporte [11] [12] [10] [19].

Na Teoria de Transporte, um nêutron é considerado uma partícula pontual, que compõe o meio material, e pode ser descrita por sua posição, \mathbf{r} , e por sua velocidade, \mathbf{v} . A velocidade pode ser representada por

$$\mathbf{v} = v\boldsymbol{\Omega}, \quad (3.1)$$

onde $v(=|\mathbf{v}|)$ é a magnitude da velocidade e $\boldsymbol{\Omega}$ é um vetor unitário de direção.

A modelagem física do fenômeno de transporte de nêutrons é constituída da migração dessas partículas no interior de um meio material com a probabilidade de interação com os núcleos dos átomos deste meio. É um fenômeno que possui importantes aplicações, como por exemplo, em reatores nucleares, proteção radiológica, medicina nuclear com terapia por captura neutrônica pelo boro, agronomia, indústria com ensaios não-destrutivos através da neutrongrafia, entre outras [9].

A equação de transporte íntegro-diferencial descreve o movimento de cada partícula num meio material, isto é, podemos saber onde ela está localizada no

espaço, que direção e energia ela tem, isso em cada tempo, o que nos indica o número de variáveis envolvidas. Considerando $f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t)$, onde f é a função distribuição, \mathbf{r} é o vetor posição espacial, $\boldsymbol{\Omega}$ é o vetor direção, que associado a E , componente da energia, gera o vetor velocidade \mathbf{v} , que tem uma magnitude v e uma direção $\boldsymbol{\Omega}$, então podemos ter 3 variáveis que indicam a posição, 3 variáveis que indicam a direção, e mais uma indicando o tempo, totalizando 7 variáveis.

Essa equação pode ser deduzida a partir de um balanço de partículas. Quando vamos localizar a partícula, temos um sistema coordenado (x, y, z) , nesse sistema a partícula está em uma posição que chamamos de \mathbf{r} , as partículas que estão na posição \mathbf{r} podem ter diferentes direções, ou diferentes velocidades, então a partícula que está na posição \mathbf{r} pode ter uma velocidade \mathbf{v} que também pode ser decomposta em três componentes, ou pode ser decomposta como um vetor unitário de direção, $\boldsymbol{\Omega}$, e a magnitude v , logo temos dois sistemas de coordenadas, um da posição espacial e outro da direção e mais a parte temporal, caracterizando o espaço de fase.

Se o estado atual das partículas é $f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t)$, alterações em qualquer um dos componentes de f caracteriza mudanças no espaço de fase. O espaço de fase é o estado atual em termos das componentes de f .

Quando fazemos um balanço de partículas sempre consideramos um elemento infinitesimal, que deve ser feito em todos os sentidos, isto é, pode acontecer uma variação no estado das partículas na posição, na direção e/ou no tempo. Devemos, portanto, analisar o que acontece em \mathbf{r} e em $\mathbf{r} + d\mathbf{r}$, onde $d\mathbf{r} = (dx, dy, dz)$, em $\boldsymbol{\Omega}$ e em $\boldsymbol{\Omega} + d\boldsymbol{\Omega}$, onde $d\boldsymbol{\Omega}$ é definido em [18], em E e em $E + dE$ e em t e $t + dt$. Então, o que pode influenciar no estado atual das partículas é que elas podem mudar de estado porque mudaram de posição, localização espacial, ou porque na mesma posição mudaram de direção, de energia ou porque mudou o tempo.

As partículas utilizadas são nêutrons, que interagem com os núcleos dos átomos que compõem o meio. As interações entre os nêutrons são desconsideradas.

As principais formas de interação de nêutrons com o meio são o espalhamento, que pode ser elástico ou inelástico, e a absorção, por captura radioativa ou por fissão. O espalhamento elástico ocorre quando há conservação da energia cinética total, o espalhamento inelástico quando não há conservação da energia cinética total, a absorção por captura radioativa ocorre quando um nêutron é absorvido por um núcleo, que pode gerar a emissão de radiação eletromagnética na forma de raios gama, e a fissão ocorre quando um núcleo fissionável, atingido por um nêutron, se parte em dois fragmentos liberando energia e outros nêutrons [16].

A quantificação dos processos de espalhamento e absorção utiliza o conceito de seção de choque macroscópica, cuja unidade é cm^{-1} , que é a probabilidade de interação do nêutron por unidade de comprimento de sua trajetória [16] e é representado por σ . O inverso da seção de choque macroscópica é chamado livre caminho, que é o caminho que a partícula vai percorrer sem que aconteça interação e é representado por λ .

A seção de choque total é definida pela soma de todas as seções de choque, e depende da posição e energia, o que torna o modelo complicado. Para simplificarmos o modelo, mais adiante, vamos assumir a não dependência em algumas das nossas variáveis.

Existem outros parâmetros utilizados para definir a equação do transporte como a seção de choque diferencial, que é dada por

$$\sigma_x(\mathbf{r}, \Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E) = \sigma_x(\mathbf{r}, E') f_x(\mathbf{r}, \Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E), \quad (3.2)$$

e depende da seção de choque macroscópica $\sigma_x(\mathbf{r}, E')$ e da probabilidade de transferência $f_x(\mathbf{r}, \Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E) d\Omega dE$, que é a probabilidade de um nêutron com

direção Ω' e energia E' , ao sofrer reação com um núcleo, cause a emissão de um ou mais nêutrons no intervalo de direções $d\Omega$ em torno de Ω e no intervalo de energias dE em torno de E . A forma como ocorre a reação e precisa ser normalizada sobre todas as direções e energias finais

$$\int_E \int_{\Omega} f_x(\mathbf{r}, \Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E) d\Omega dE = 1. \quad (3.3)$$

A probabilidade total é definida através da equação

$$\sigma_t(\mathbf{r}, E') f(\mathbf{r}, \Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E) = \sum_x \sigma_x(\mathbf{r}, E') f_x(\mathbf{r}, \Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E), \quad (3.4)$$

onde a soma discreta no lado direito é sobre todas as reações que produzem nêutrons [16].

Seja $N(\mathbf{r}, \Omega, E, t)$ a densidade angular, que é o número provável de nêutrons presente num volume dV ao redor de \mathbf{r} , que viajam em direções $d\Omega$ ao redor de Ω com energias no intervalo dE ao redor de E num instante t . Temos que a taxa de variação no número de nêutrons em dV é a taxa de produção de nêutrons menos a taxa de perda de nêutrons em dV , a produção se dá pelas colisões e/ou por fonte externa e a perda por colisões e/ou termo de fuga.

Utilizando v' para denotar o módulo da velocidade do nêutron que possui energia E' [16], é possível mostrar que a taxa de produção de nêutron é dada por

$$\left[\int_{E'} \int_{\Omega'} \sigma_t(\mathbf{r}, E') f(\mathbf{r}, \Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E) v' N(\mathbf{r}, \Omega', E', t) d\Omega' dE' + S(\mathbf{r}, \Omega, E, t) \right] dV d\Omega dE \quad (3.5)$$

onde o primeiro termo corresponde aos nêutrons que, após colidirem em dV , são transferidos de outras direções e energias para os intervalos direcionais e energéticos ou então originam novos nêutrons que aparecem nesses intervalos, e o segundo

termo corresponde aos nêutrons produzidos por fontes localizadas no interior do meio material.

Analogamente, temos que a taxa de perda de nêutros em dV é dada por

$$[\sigma_t(\mathbf{r}, E)vN(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t) + v\mathbf{\Omega} \cdot \nabla N(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)] dV d\mathbf{\Omega} dE, \quad (3.6)$$

onde o primeiro termo corresponde aos nêutros que deixam os intervalos angulares e energéticos considerados devido a interações em dV e o segundo termo corresponde à fuga líquida de nêutros do volume elementar considerado. Como a taxa de variação do número provável de nêutros em dV é dada por

$$\left[\frac{\partial}{\partial t} N(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t) \right] dV d\mathbf{\Omega} dE, \quad (3.7)$$

então o balanço dos ganhos e das perdas resulta em

$$\left[\int_{E'} \int_{\mathbf{\Omega}'} \sigma_t(\mathbf{r}, E') f(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}' \rightarrow \mathbf{\Omega}, E' \rightarrow E) v' N(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', E', t) d\mathbf{\Omega}' dE' + S(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t) \right] dV d\mathbf{\Omega} dE - \quad (3.8)$$

$$[\sigma_t(\mathbf{r}, E)vN(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t) + v\mathbf{\Omega} \cdot \nabla N(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t)] dV d\mathbf{\Omega} dE = \left[\frac{\partial}{\partial t} N(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t) \right] dV d\mathbf{\Omega} dE, \quad (3.9)$$

separando os termos de perda e ganho de nêutros temos

$$\frac{\partial}{\partial t} N(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t) + \sigma_t(\mathbf{r}, E)vN(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t) + v\mathbf{\Omega} \cdot \nabla N(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E, t) = \quad (3.10)$$

$$\int_{E'} \int_{\Omega'} \sigma_t(\mathbf{r}, E') f(\mathbf{r}, \Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E) v' N(\mathbf{r}, \Omega', E', t) d\Omega' dE' + S(\mathbf{r}, \Omega, E, t). \quad (3.11)$$

Fazendo $vN(\mathbf{r}, \Omega, E, t) = \psi(\mathbf{r}, \Omega, E, t)$ que é o fluxo angular e possui unidades de nêutrons por unidade de área, por unidade de tempo, por unidade de ângulo sólido e por unidade de energia, temos

$$\frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{r}, \Omega, E, t) + \sigma_t(\mathbf{r}, E) \psi(\mathbf{r}, \Omega, E, t) + \Omega \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}, \Omega, E, t) =$$

$$\int_{E'} \int_{\Omega'} \sigma_t(\mathbf{r}, E') f(\mathbf{r}, \Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E) \psi(\mathbf{r}, \Omega', E', t) d\Omega' dE' + S(\mathbf{r}, \Omega, E, t) \quad (3.12)$$

que é a forma mais geral da equação íntegro-diferencial do transporte.

Agora considerando o problema em regime estacionário, não temos a dependência no tempo, ou seja, os nêutrons estão em equilíbrio em relação ao tempo, então podemos omitir a variável t na eq.(3.12), assim como o termo com a derivada parcial em relação a t . Assim temos

$$\sigma_t(\mathbf{r}, E) \psi(\mathbf{r}, \Omega, E) + \Omega \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}, \Omega, E) =$$

$$\int_{E'} \int_{\Omega'} \sigma_t(\mathbf{r}, E') f(\mathbf{r}, \Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E) \psi(\mathbf{r}, \Omega', E') d\Omega' dE' + S(\mathbf{r}, \Omega, E). \quad (3.13)$$

Para tratarmos a dependência da energia do fluxo angular de nêutrons, empregamos uma aproximação de multigrupos. Para isso, dividimos o intervalo de energia, considerando G subintervalos chamados de grupos. Queremos que em cada intervalo (E_g, E_{g-1}) a aproximação tenha a forma

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma_g(\mathbf{r}) \psi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) &= \sum_{g'=1}^G \int_{\boldsymbol{\Omega}'} \sigma_{g1}(\mathbf{r}) f_{gg'}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) \psi_{g'}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' \\ &+ S_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}). \end{aligned} \quad (3.14)$$

Depois da divisão dos grupos deve-se integrar a equação (3.13), sobre todas as faixas de energia que definem esses grupos. Considerando g o grupo que possui as energias no intervalo (E_g, E_{g-1}) , integrando a equação (3.13) sobre esse intervalo, temos

$$\begin{aligned} \int_{E_g}^{E_{g-1}} \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) dE + \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_t(\mathbf{r}, E) \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) dE = \\ \int_{E_g}^{E_{g-1}} \int_{E'} \int_{\boldsymbol{\Omega}'} \sigma_t(\mathbf{r}, E') f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E' \rightarrow E) \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E') d\boldsymbol{\Omega}' dE' dE + \\ \int_{E_g}^{E_{g-1}} S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) dE \end{aligned} \quad (3.15)$$

Chamamos

$$\psi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) dE, \quad (3.16)$$

que são os fluxos angulares de grupo,

$$\sigma_{t_g}(\mathbf{r}) \psi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_t(\mathbf{r}, E) \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) dE \quad (3.17)$$

$$\begin{aligned} \sigma_{g'}(\mathbf{r}) f_{gg'}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) \psi_{g'}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') = \\ \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \sigma_t(\mathbf{r}, E') \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E') \int_{E_g}^{E_{g-1}} f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E' \rightarrow E) dE dE', \end{aligned}$$

e

$$S_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) dE, \quad (3.18)$$

que é a fonte de nêutrons no grupo g . Que é a eq. (3.13) no grupo de energia (E_g, E_{g-1}) .

Consideramos também que o espalhamento é isotrópico e fazemos as considerações

$$c\sigma_t(\mathbf{r}) = \sigma_s(\mathbf{r}) \quad (3.19)$$

$$f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \quad (3.20)$$

Que resulta em

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma_t(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} \int_{4\pi} \sigma_s(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' + S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}). \quad (3.21)$$

Para simplificarmos o problema temos que a simetria é azimutal, neste caso não há dependência do ângulo azimutal ϕ . Desconsiderando essa dependência, assumimos a relação $\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \psi(\mathbf{r}, \mu)$ e calculando a integral em $d\phi$ que varia de 0 a 2π , obtemos

$$\mu \nabla \psi(\mathbf{r}, \mu) + \sigma_t(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, \mu) = \frac{\sigma_s(\mathbf{r})}{2} \int_{-1}^1 \psi(\mathbf{r}, \mu') d\mu' + S(\mathbf{r}, \mu). \quad (3.22)$$

Se pensarmos ainda em geometria unidimensional, fazemos uma aproximação onde calculamos o fluxo angular apenas ao longo do eixo z , isto é $\psi(\mathbf{r}, \mu) = \psi(z, \mu)$, então escrevemos

$$\mu \frac{\partial \psi}{\partial z}(z, \mu) + \sigma_t(z) \psi(z, \mu) = \frac{\sigma_s(z)}{2} \int_{-1}^1 \psi(z, \mu') d\mu' + S(z, \mu). \quad (3.23)$$

Finalizando, consideramos que a fonte externa é isotrópica, isto é, nêutrons são gerados no ponto z em todas as direções com igual energia e intensidade. Tratando de problemas unidimensionais é comum fazermos o eixo z coincidir com o eixo x (abscissas) do sistema de coordenadas. Assim a equação (3.23) aparece como

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, \mu) + \sigma_t(x) \psi(x, \mu) = \frac{\sigma_s(x)}{2} \int_{-1}^1 \psi(x, \mu') d\mu' + S(x). \quad (3.24)$$

onde $\mu = \cos \theta$ é a variável angular, x é a variável espacial, $\psi(x, \mu)$ é o fluxo angular, $\sigma_t(x)$ e $\sigma_s(x)$ são, respectivamente, as seções de choque total e de espalhamento e $S(x)$ é o termo de fonte externa.

Ainda assim, com todas as simplificações adotadas, a resolução desse problema é muito complexa, então existem alguns tratamentos clássicos para discretizar as variáveis espacial e angular.

Um tratamento clássico para a variável angular, é a utilização do método de ordenadas discretas, citado anteriormente, que foi desenvolvido por Chandrasekhar [13] e vem sendo aprimorado e amplamente utilizado desde então.

Fazendo uso desse tratamento e considerando que para meios homogêneos os parâmetros de seção de choque, σ_t e σ_s , não dependem da variável espacial, a equação (3.24) pode ser reescrita como

$$\mu_i \frac{d}{dx} \psi(x, \mu_i) + \sigma_t \psi(x, \mu_i) = \frac{\sigma_s}{2} \sum_{k=1}^N \psi(x, \mu_k) \omega_k + S(x), \quad i = 1, \dots, N \quad (3.25)$$

onde μ_k e ω_k são os N nós e pesos arbitrários do esquema de quadratura escolhido.

A discretização da variável espacial é feita através de diferentes métodos, alguns exemplos são o método *Diamond Difference*, método de malha fina, Elementos Finitos (Degrau), método de malha média, e Degrau Característico, método de malha grossa [9]. A diferença existente entre os métodos citados, além da espessura da malha, é como escolhemos os valores médios que serão as equações auxiliares para que o sistema de equações seja possível. Cabe ainda ressaltar que o método ADO apresenta solução explícita em termos da variável espacial para esse problema.

Seguimos com o estudo de algumas abordagens computacionais e analíticas citadas para o cálculo do fluxo de nêutrons de acordo com a equação (3.25).

4 MÉTODO NODAL

Métodos nodais facilitam a abordagem analítica e melhoram a precisão e eficiência na modelagem computacional, eles consistem em dividir o domínio espacial em nodos, e resolver um problema médio em cada nodo, com isso temos a redução da dimensão do problema, porém não temos a solução em cada ponto do intervalo espacial, apenas uma solução média [14].

O método de transporte nodal mais desenvolvido na geometria multidimensional utiliza o processo de integração transversal, primeiramente utilizado nos métodos nodais na teoria de difusão, para integrar a equação de transporte sobre as direções espaciais e reduzi-la à uma equação diferencial em cada faixa espacial. Cada equação é então resolvida e as integrais resultantes são solucionadas assumindo certas formas do fluxo dentro dos nós e nos seus contornos [4].

Apesar de todas as aplicações que os métodos nodais têm em geometrias multidimensionais, nos deteremos, neste trabalho, nos problemas onde a geometria a ser considerada é unidimensional como uma forma preliminar de estudo da equação de transporte. Considerando problemas unidimensionais, podemos ter soluções conhecidas de excelente precisão para comparações e entendimento do método.

4.1 Uma Solução Explícita para o Problema

Como deduzido no capítulo anterior, usaremos a formulação de ordenadas discretas analítica (ADO), abordada em [6], onde consideramos a variável óptica

$$\tau = \sigma_t x, \tag{4.1}$$

com $\tau \in [0, \tau_0]$, as seções de choque constantes, e sem fonte externa, de forma que nossa equação (3.24) pode ser escrita como

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} \psi(\tau, \mu) + \psi(\tau, \mu) = \frac{c}{2} \int_{-1}^1 \psi(\tau, \mu') d\mu', \quad (4.2)$$

onde $c = \frac{\sigma_s}{\sigma_t}$, e se reescrevermos o termo integral da equação (4.2), temos

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} \psi(\tau, \mu) + \psi(\tau, \mu) = \frac{c}{2} \int_0^1 [\psi(\tau, \mu') + \psi(\tau, -\mu')] d\mu'. \quad (4.3)$$

sujeita às condições de contorno

$$\psi(0, \mu) = F_1(\mu) \quad (4.4)$$

e

$$\psi(\tau_0, -\mu) = F_2(\mu), \quad (4.5)$$

para $\mu \in (0, 1]$. Então, derivamos a versão da equação (4.3) na formulação de ordenadas discretas, na forma

$$\mu_i \frac{d}{dx} \psi(\tau, \mu_i) + \psi(\tau, \mu_i) = \frac{c}{2} \sum_{k=1}^N \omega_k [\psi(\tau, \mu_k) + \psi(\tau, -\mu_k)] \quad (4.6)$$

e

$$-\mu_i \frac{d}{dx} \psi(\tau, -\mu_i) + \psi(\tau, -\mu_i) = \frac{c}{2} \sum_{k=1}^N \omega_k [\psi(\tau, \mu_k) + \psi(\tau, -\mu_k)], \quad (4.7)$$

onde μ_k e ω_k são os N nós e pesos arbitrários do esquema de quadratura definido no semi-domínio $[0, 1]$. No problema estudado usamos Gauss-Legendre como esquema de quadratura, de forma que para o aplicarmos no semi domínio fizemos a mudança de variáveis

$$2\mu_k = y_k + 1, \quad (4.8)$$

onde y_k são os nós da quadratura de Gauss-Legendre no intervalo $[-1, 1]$, que são mapeados para os nós μ_k no intervalo $[0, 1]$.

Analogamente, os pesos v_k da quadratura de Gauss-Legendre no intervalo $[-1, 1]$ são mapeados para os pesos ω_k no intervalo $[0, 1]$, conforme a relação $\omega_k = \frac{1}{2}v_k$.

Dado que o termo integral foi aproximado pelo esquema de quadraturas, as equações (4.6) e (4.7) representam um sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem. Temos então que as soluções para o sistema têm a forma

$$\psi(\tau, \pm\mu_i) = Y(\nu, \pm\mu_i)e^{\frac{-\tau}{\nu}} \quad (4.9)$$

substituindo (4.9) em (4.6) e (4.7), temos

$$\pm\mu_i \frac{d}{d\tau} \left[Y(\nu, \pm\mu_i)e^{\frac{-\tau}{\nu}} \right] + Y(\nu, \pm\mu_i)e^{\frac{-\tau}{\nu}} = \frac{c}{2} \sum_{k=1}^N \omega_k [Y(\tau, \pm\mu_k) + Y(\tau, \mp\mu_k)] \quad (4.10)$$

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

Simplificando, obtemos

$$\left(1 \mp \frac{\mu_i}{\nu}\right) Y(\nu, \pm\mu_i) = \frac{c}{2} \sum_{k=1}^N \omega_k [Y(\nu, \pm\mu_k) + Y(\nu, \mp\mu_k)] \quad (4.11)$$

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

Introduzindo a notação matricial, escrevemos as matrizes

$$\mathbf{M} = \text{diag}\{\mu_1, \dots, \mu_N\} \quad (4.12)$$

e

$$\mathbf{W} = \text{diag}\{\omega_1, \dots, \omega_N\}, \quad (4.13)$$

e o vetor de dimensão N

$$\mathbf{Y}_{\pm}(\nu) = (Y(\nu, \pm\mu_1), \dots, Y(\nu, \pm\mu_N)) \quad (4.14)$$

para reescrevermos a equação (4.11) na forma

$$\left(\mathbf{I}_N \mp \frac{1}{\nu}\mathbf{M}\right) \mathbf{Y}_{\pm}(\nu) = \frac{c}{2}\mathbf{W} [\mathbf{Y}_{\pm}(\nu) + \mathbf{Y}_{\mp}(\nu)], \quad (4.15)$$

onde \mathbf{I}_N é a matriz identidade $N \times N$.

Agora, definindo os vetores coluna de dimensão N

$$\mathbf{U} = \mathbf{Y}_{+}(\nu) + \mathbf{Y}_{-}(\nu) \quad (4.16)$$

e

$$\mathbf{V} = \mathbf{\Upsilon}_+(\nu) - \mathbf{\Upsilon}_-(\nu), \quad (4.17)$$

e adicionando as equações (4.15), temos

$$\left(\mathbf{I}_N - \frac{1}{\nu}\mathbf{M}\right) \mathbf{\Upsilon}_+(\nu) + \left(\mathbf{I}_N + \frac{1}{\nu}\mathbf{M}\right) \mathbf{\Upsilon}_-(\nu) = \frac{c}{2}2\mathbf{W} [\mathbf{\Upsilon}_+(\nu) + \mathbf{\Upsilon}_-(\nu)], \quad (4.18)$$

que podemos reescrever como

$$\mathbf{U} - \frac{1}{\nu}\mathbf{M}\mathbf{V} = c\mathbf{W}\mathbf{U} \quad (4.19)$$

ou

$$(\mathbf{I}_N - c\mathbf{W})\mathbf{M}^{-1}\mathbf{M}\mathbf{U} = \frac{1}{\nu}\mathbf{M}\mathbf{V}. \quad (4.20)$$

que reescrevemos como

$$\mathbf{E}\hat{\mathbf{X}} = \frac{1}{\nu}\hat{\mathbf{Y}}, \quad (4.21)$$

onde

$$\mathbf{E} = (\mathbf{I}_N - c\mathbf{W})\mathbf{M}^{-1}, \quad (4.22)$$

$$\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{M}\mathbf{U} \quad (4.23)$$

e

$$\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{M}\mathbf{V} \quad (4.24)$$

Executando um processo análogo e subtraindo as equações (4.15) teremos

$$\left(\mathbf{I}_N - \frac{1}{\nu}\mathbf{M}\right) \mathbf{\Upsilon}_+(\nu) - \left(\mathbf{I}_N + \frac{1}{\nu}\mathbf{M}\right) \mathbf{\Upsilon}_-(\nu) = 0, \quad (4.25)$$

obtendo

$$\mathbf{V} - \frac{1}{\nu}\mathbf{M}\mathbf{U} = 0 \quad (4.26)$$

ou

$$\mathbf{M}^{-1}\mathbf{M}\mathbf{V} = \frac{1}{\nu}\mathbf{M}\mathbf{U}, \quad (4.27)$$

que podemos escrever

$$\mathbf{F}\hat{\mathbf{Y}} = \frac{1}{\nu}\hat{\mathbf{X}} \quad (4.28)$$

onde

$$\mathbf{F} = \mathbf{M}^{-1}. \quad (4.29)$$

Resumindo, das equações (4.21) e (4.28), obtemos dois problemas de autovalores

$$(\mathbf{F}\mathbf{E})\hat{\mathbf{X}} = \frac{1}{\nu^2}\hat{\mathbf{X}} \quad (4.30)$$

e

$$(\mathbf{E}\mathbf{F})\hat{\mathbf{Y}} = \frac{1}{\nu^2}\hat{\mathbf{Y}}, \quad (4.31)$$

onde $\lambda = \frac{1}{\nu^2}$.

Os problemas de autovalores obtidos aqui são de ordem reduzida (a metade), em comparação com os obtidos nas aproximações padrão de ordem N do método de ordenadas discretas, baseado no esquema de quadratura de domínio inteiro.

Escolhendo (4.21) para escrever

$$\nu\mathbf{E}\hat{\mathbf{X}} = \hat{\mathbf{Y}}, \quad (4.32)$$

se adicionarmos $\hat{\mathbf{X}}$ a ambos os lados da equação acima, teremos

$$(\mathbf{I}_N + \nu\mathbf{E})\hat{\mathbf{X}} = \hat{\mathbf{X}} + \hat{\mathbf{Y}}, \quad (4.33)$$

substituindo (4.23) e (4.24) em (4.33), vemos que

$$(\mathbf{I}_N + \nu\mathbf{E})\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{M}(\mathbf{U} + \mathbf{V}), \quad (4.34)$$

e, então,

$$(\mathbf{I}_N + \nu_j\mathbf{E})\hat{\mathbf{X}}(\nu_j) = 2\mathbf{M}\mathbf{\Upsilon}_+(\nu_j), \quad (4.35)$$

tal que

$$\Upsilon_+(\nu_j) = \frac{1}{2}\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{I}_N + \nu_j\mathbf{E})\hat{\mathbf{X}}(\nu_j). \quad (4.36)$$

Por outro lado, se subtraímos \mathbf{X} em (4.32)

$$(-\mathbf{I}_N + \nu\mathbf{E})\hat{\mathbf{X}} = -\hat{\mathbf{X}} + \hat{\mathbf{Y}}, \quad (4.37)$$

e substituímos (4.23) e (4.24) em (4.33),

$$(\mathbf{I}_N - \nu\mathbf{E})\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{M}(\mathbf{V} - \mathbf{U}), \quad (4.38)$$

podemos escrever

$$(\mathbf{I}_N - \nu_j\mathbf{E})\hat{\mathbf{X}}(\nu_j) = 2\mathbf{M}\Upsilon_-(\nu_j), \quad (4.39)$$

e

$$\Upsilon_-(\nu_j) = \frac{1}{2}\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{I}_N - \nu_j\mathbf{E})\hat{\mathbf{X}}(\nu_j). \quad (4.40)$$

Da solução do problema de autovalores (4.30), junto com as soluções elementares (4.36) e (4.40), podemos escrever a solução de (4.2)

$$\Psi_{\pm}(\tau) = (\psi(\tau, \pm\mu_1), \dots, \psi(\tau, \pm\mu_N)), \quad (4.41)$$

na forma

$$\Psi_{\pm}(\tau) = \sum_{j=1}^N [A_j\Upsilon_{\pm}(\nu_j)e^{-\tau/\nu_j} + B_j\Upsilon_{\mp}(\nu_j)e^{-(\tau_0-\tau)/\nu_j}]. \quad (4.42)$$

Finalmente, substituímos (4.42) nas condições de contorno (4.4) e (4.5), para obtermos um sistema linear $2N$ e determinar as constantes arbitrárias A_j e B_j ,

$$\sum_{j=1}^N [A_j\Upsilon_+(\nu_j) + B_j\Upsilon_-(\nu_j)e^{-\tau_0/\nu_j}] = F_1(\mu_j), \quad (4.43)$$

$$\sum_{j=1}^N [A_j\Upsilon_-(\nu_j)e^{-\tau_0/\nu_j} + B_j\Upsilon_+(\nu_j)] = F_2(\mu_j), \quad (4.44)$$

para $\mu \in (0, 1]$.

Definindo o fluxo escalar como

$$\phi(\tau) = \int_{-1}^1 \psi(\tau, \mu') d\mu', \quad (4.45)$$

que é equivalente a relação

$$\phi(\tau) = \int_0^1 [\psi(\tau, \mu') + \psi(\tau, -\mu')] d\mu', \quad (4.46)$$

tal que, em termos da solução de ordenadas discretas, obtemos

$$\phi(\tau) = \sum_{j=1}^N \left[(A_j e^{-\tau/\nu_j} + B_j e^{-(\tau_0-\tau)/\nu_j}) \sum_{i=1}^N \omega_i (Y(\nu_j, \mu_i) + Y(\nu_j, -\mu_i)) \right]. \quad (4.47)$$

Chamando

$$\Upsilon_0(\nu_j) = \sum_{i=1}^N \omega_i [Y(\nu_j, \mu_i) + Y(\nu_j, -\mu_i)], \quad (4.48)$$

temos

$$\phi(\tau) = \sum_{j=1}^N \left[A_j e^{-\tau/\nu_j} + B_j e^{\frac{-(\tau_0-\tau)}{\nu_j}} \right] \Upsilon_0(\nu_j, -\mu_i). \quad (4.49)$$

E definindo o fluxo de radiação de calor parcial como

$$q_{\pm}(\tau) = \pi \int_0^1 \psi(\tau, \pm\mu') \mu' d\mu', \quad (4.50)$$

usando o esquema de quadratura

$$q_{\pm}(\tau) = \pi \sum_{i=1}^N \omega_i [\psi(\tau, \pm\mu'_i) \mu'_i] \quad (4.51)$$

e em termos da solução de ordenadas discretas

$$q_{\pm}(\tau) = \pi \sum_{i=1}^N \omega_i \mu'_i \sum_{j=1}^N [A_j e^{-\tau/\nu_j} \Upsilon_{\pm}(\nu_j) + B_j e^{-(\tau_0-\tau)/\nu_j} \Upsilon_{\mp}(\nu_j)]. \quad (4.52)$$

Chamando

$$Q_{\pm}(\nu_j) = \sum_{i=1}^N \mu'_i \omega_i Y(\nu_j, \pm\mu_i) \quad (4.53)$$

temos

$$q_{\pm}(\tau) = \pi \sum_{j=1}^N [A_j e^{-\tau/\nu_j} Q_{\pm}(\nu_j) + B_j e^{-(\tau_0 - \tau)/\nu_j} Q_{\mp}(\nu_j)]. \quad (4.54)$$

Usaremos a formulação de ordenadas discretas analítica desenvolvida acima para comparar outras referências e abordagens numéricas encontradas na literatura. Esse desenvolvimento é o chamando método de ordenadas discretas analítico (ADO) que tem como características usar quadratura numérica arbitrária no semi intervalo $(0, 1]$ e resolver um problema de autovalores ao invés de solucionar a equação característica para terminar ν_j .

4.2 Uma Abordagem Nodal

De acordo com [8], onde todo o domínio é considerado como um único nodo de tamanho $2a$, onde $\tau \in [-a, a]$, trabalhamos com a equação do transporte (4.2) para determinarmos uma aproximação para o valor do albedo, que é uma medida relativa a quantidade de radiação refletida, e para o problema de criticalidade, para tanto, a equação (4.2) tem condições de contorno dadas por

$$\psi(-a, \mu) = F, \quad \mu \in (0, 1] \quad (4.55)$$

e

$$\psi(a, -\mu) = 0, \quad \mu \in (0, 1]. \quad (4.56)$$

No problema de criticalidade temos $F = 0$ e para um dado valor de c encontramos a semi espessura crítica a . Para o problema do albedo, tomamos $F = 1$ e calculamos o albedo

$$A^* = 2 \int_0^1 \psi(-a, -\mu) \mu d\mu \quad (4.57)$$

e o fator de transmissão, que é o fluxo que atravessa o sistema,

$$B^* = 2 \int_0^1 \psi(a, \mu) \mu d\mu. \quad (4.58)$$

Integrando (4.2) e introduzindo a média

$$\bar{\psi}(\mu) = \frac{1}{2a} \int_{-a}^a \psi(\tau, \mu) d\tau, \quad (4.59)$$

encontramos

$$\frac{\mu}{2a} [\psi(a, \mu) - \psi(-a, \mu)] + \bar{\psi}(\mu) = \frac{c}{2} \int_{-1}^1 \bar{\psi}(\mu') d\mu'. \quad (4.60)$$

Considerando a equação (4.60) para $\mu > 0$ e $\mu < 0$ separadamente, escrevemos

$$\frac{\mu}{2a} [\psi(a, \mu) - F] + \bar{\psi}(\mu) = \frac{c}{2} \int_{-1}^1 \bar{\psi}(\mu') d\mu' \quad (4.61)$$

e

$$\frac{\mu}{2a} \psi(-a, -\mu) + \bar{\psi}(-\mu) = \frac{c}{2} \int_{-1}^1 \bar{\psi}(\mu') d\mu'. \quad (4.62)$$

Introduzindo as aproximações

$$\psi(a, \mu) = \bar{\psi}(\mu) \quad (4.63)$$

e

$$\psi(-a, -\mu) = \bar{\psi}(-\mu), \quad (4.64)$$

podemos resolver as equações (4.61) e (4.62) chamando

$$b = \int_{-1}^1 \bar{\psi}(\mu') d\mu', \quad (4.65)$$

temos

$$\left(\frac{\mu}{2a} + 1\right) \bar{\psi}(\mu) - \frac{\mu}{2a} F - \frac{bc}{2} = 0 \quad (4.66)$$

e

$$\left(\frac{\mu}{2a} + 1\right) \bar{\psi}(-\mu) - \frac{bc}{2} = 0. \quad (4.67)$$

Somando (4.66) e (4.67), temos

$$\left(\frac{\mu}{2a} + 1\right) (\bar{\psi}(\mu) + \bar{\psi}(-\mu)) - \frac{\mu}{2a} F - bc = 0. \quad (4.68)$$

Subtraindo (4.66) de (4.67)

$$\left(\frac{\mu}{2a} + 1\right) (\bar{\psi}(-\mu) - \bar{\psi}(\mu)) + \frac{\mu}{2a} F = 0. \quad (4.69)$$

Igualando (4.68) e (4.69), temos

$$2\bar{\psi}(\mu) - \frac{2a}{\mu + 2a} bc = \frac{2\mu}{\mu + 2a} F. \quad (4.70)$$

Integrando com relação a μ no intervalo $(0, 1)$

$$\int_0^1 \bar{\psi}(\mu) d\mu + \int_0^1 \bar{\psi}(\mu) d\mu - 2abc \ln\left(\frac{1+2a}{2a}\right) = 2F \left[1 - 2a \ln\left(\frac{1+2a}{2a}\right)\right]. \quad (4.71)$$

De (4.69), podemos ter a relação

$$\bar{\psi}(\mu) = \bar{\psi}(-\mu) + \frac{\mu}{\mu + 2a} F. \quad (4.72)$$

Substituindo (4.72) na segunda integral de (4.71), temos

$$\int_0^1 \bar{\psi}(\mu) + \int_0^1 \left(\bar{\psi}(-\mu) + \frac{\mu}{\mu + 2a} F\right) d\mu - 2abc \ln\left(\frac{1+2a}{2a}\right) = 2F \left[1 - 2a \ln\left(\frac{1+2a}{2a}\right)\right], \quad (4.73)$$

voltando b para a forma integral

$$\int_{-1}^1 \bar{\psi}(\mu') d\mu' \left[1 - 2ac \ln\left(1 + \frac{1}{2a}\right)\right] = F \left[1 - 2a \ln\left(1 + \frac{1}{2a}\right)\right] \quad (4.74)$$

ou

$$\Lambda(c, a) \int_{-1}^1 \bar{\psi}(\mu') d\mu' = F \Lambda(1, a) \quad (4.75)$$

onde

$$\Lambda(c, a) = 1 - 2ac \ln\left(1 + \frac{1}{2a}\right). \quad (4.76)$$

Quando $F = 0$, encontramos a condição crítica da placa

$$2ac \ln\left(1 + \frac{1}{2a}\right) = 1. \quad (4.77)$$

Para o problema do albedo e do fator de transmissão tomamos $F = 1$ e temos de (4.61), (4.62) e (4.65)

$$\frac{\mu}{2a}\psi(a, \mu) - \frac{\mu}{2a} + \bar{\psi}(\mu) = \frac{bc}{2}, \quad (4.78)$$

$$\frac{\mu}{2a}\psi(-a, -\mu) + \bar{\psi}(-\mu) = \frac{bc}{2} \quad (4.79)$$

e

$$b = \int_0^1 (\bar{\psi}(\mu) + \bar{\psi}(-\mu)) d\mu. \quad (4.80)$$

Somando (4.78) e (4.79), temos

$$2\mu\psi(a, \mu) - 2\mu + 4a [\bar{\psi}(\mu) + \bar{\psi}(-\mu)] + 2\mu\psi(-a, -\mu) = 4abc. \quad (4.81)$$

Integrando (4.81) com relação a μ no intervalo $(0, 1)$

$$2 \int_0^1 \psi(a, \mu)\mu d\mu - 1 + 4a \int_0^1 (\bar{\psi}(\mu) + \bar{\psi}(-\mu)) d\mu + 2 \int_0^1 \psi(-a, -\mu)\mu d\mu = 4abc. \quad (4.82)$$

Usando (4.57), (4.58) e (4.80) em (4.82), encontramos uma aproximação para o fator de transmissão

$$B^* = 1 - A^* - 4a(1 - c) \frac{\Lambda(1, a)}{\Lambda(c, a)}. \quad (4.83)$$

Faltando agora encontrar o valor de A^* para a relação acima estar completamente definida, então, de (4.78) temos

$$2\mu\psi(a, \mu) - 2\mu + 4a\bar{\psi}(\mu) = 2abc. \quad (4.84)$$

Integrando (4.84) com relação a μ no intervalo $(0, 1)$

$$2 \int_0^1 \psi(a, \mu)\mu d\mu - 1 + 2a \int_0^1 \bar{\psi}(\mu) d\mu + 2a \int_0^1 \bar{\psi}(\mu) d\mu = 2abc, \quad (4.85)$$

substituindo (4.72) na terceira integral de (4.85) e a relação (4.58), temos

$$B^* - 1 + 2a \int_0^1 (\bar{\psi}(\mu) + \bar{\psi}(-\mu)) d\mu + 2a \left(1 - 2a \ln \left(\frac{1+2a}{2a} \right) \right) = 2abc. \quad (4.86)$$

Por (4.75) e (4.80),

$$B^* - 1 + 2ab + 2a\Lambda(1, a) = 2abc, \quad (4.87)$$

substituindo (4.79) em (4.87), temos a aproximação para o valor do albedo

$$A^* = 2ac \frac{\Lambda^2(1, a)}{\Lambda(c, a)}. \quad (4.88)$$

Com essas relações podemos estimar valores para o albedo e o fator de transmissão. Para que possamos ter um parâmetro de comparação seguimos com os cálculos executados inicialmente, agora fazendo as alterações necessárias para que τ possa variar no intervalo $[-a, a]$ da forma que a equação (4.54) pode ser escrita como

$$q_{\pm}(\tau) = \pi \sum_{j=1}^N [A_j e^{-(\tau+a)/\nu_j} Q_{\pm}(\nu_j) + B_j e^{-(a-\tau)/\nu_j} f Q_{\mp}(\nu_j)]. \quad (4.89)$$

com $Q_{\pm}(\nu_j)$ dado por (4.53).

Assim podemos aproximar A^* por

$$A = 2 \sum_{j=1}^N [A_j Q_{-}(\nu_j) + B_j e^{\frac{-2a}{\nu_j}} Q_{+}(\nu_j)] \quad (4.90)$$

e B^* por

$$B = 2 \sum_{j=1}^N [A_j e^{\frac{-2a}{\nu_j}} Q_{+}(\nu_j) + B_j Q_{-}(\nu_j)] \quad (4.91)$$

4.3 Resultados Numéricos

Os resultados desse capítulo foram obtidos através de implementação de programas em Fortran95, usamos as subrotinas do Lapack DGEEVX e DSTEQR

para cálculos de autovalores e autovetores, DGETRF para fatoração LU e DGETRS para resolução de sistema linear. Calculamos os valores de A^* e B^* , e comparando com os valores de A e B , usando $N = 50$ para diferentes valores de c e a podemos notar que considerando todo o domínio como um único nodo e que as aproximações feitas, (4.63) e (4.64), trazem grandes prejuízos a precisão de (4.83) e (4.88), produzindo erros inaceitáveis, na tabela 4.1 reproduzimos os resultados encontrados em [8]:

Tabela 4.1: Valores aproximados (A^* e B^*) e exatos (A e B) para o albedo e o fator de transmissão considerando $c = 0,8$

2a	A^*	B^*	A	B	$ 1 - \frac{A^*}{A} $	$ 1 - \frac{B^*}{B} $
0,07	0,0432689	0,929993	0,0477637	0,925022	9,41%	0,54%
0,1	0,0572079	0,905166	0,0649256	0,896574	11,89%	0,96%
0,45	0,139436	0,713315	0,193806	0,648991	28,05%	9,91%
0,5	0,144946	0,694252	0,205616	0,621975	29,51%	11,62%
1,0	0,169091	0,555385	0,280152	0,416245	39,64%	33,42%
2,0	0,162832	0,406553	0,327950	0,197270	50,35%	106,09%
5,0	0,115446	0,231524	0,341680	0,0229218	66,21%	910,06%

Nas tabelas 4.2, 4.3 e 4.4 estendemos os resultados encontrados no trabalho citado para diferentes valores de c .

Tabela 4.2: Valores aproximados (A^* e B^*) e exatos (A e B) para o albedo e o fator de transmissão considerando $c = 0, 2$

2a	A^*	B^*	A	B	$ 1 - \frac{A^*}{A} $	$ 1 - \frac{B^*}{B} $
0,04	0,000621262	0,933758	0,00685248	0,933474	9,34%	0,34%
0,1	0,0121406	0,860089	0,0146016	0,846956	16,85%	1,55%
0,33	0,0213607	0,65844	0,0312185	0,601103	31,58%	9,54%
0,5	0,0228195	0,572126	0,0371530	0,474323	38,58%	20,61%
1,0	0,0218625	0,408157	0,0439345	0,246269	50,24%	65,74%
2,0	0,0170670	0,260788	0,0460724	0,0727415	62,97%	258,51%
5,0	0,009555333	0,125633	0,0462647	0,00244614	79,35%	5035,97%

Tabela 4.3: Valores aproximados (A^* e B^*) e exatos (A e B) para o albedo e o fator de transmissão considerando $c = 0, 5$

2a	A^*	B^*	A	B	$ 1 - \frac{A^*}{A} $	$ 1 - \frac{B^*}{B} $
0,05	0,0194483	0,934671	0,0214311	0,931156	9,25%	0,38%
0,1	0,0328324	0,88079	0,0384327	0,870438	14,57%	1,19%
0,37	0,0649095	0,683331	0,0932575	0,622668	30,40%	9,74%
0,5	0,0700096	0,619316	0,107676	0,534993	34,98%	15,76%
1,0	0,0720499	0,458344	0,134165	0,306709	46,30%	49,44%
2,0	0,0601266	0,303848	0,145085	0,107055	58,56%	183,82%
5,0	0,0358932	0,151971	0,146541	0,00528758	75,51%	2774,11%

Tabela 4.4: Valores aproximados (A^* e B^*) e exatos (A e B) para o albedo e o fator de transmissão considerando $c = 0,99$

$2a$	A^*	B^*	A	B	$ 1 - \frac{A^*}{A} $	$ 1 - \frac{B^*}{B} $
0,1	0,075042	0,922982	0,0832930	0,914711	9,92%	0,90%
0,49	0,218137	0,772179	0,266835	0,703442	23,95%	9,77%
0,5	0,220407	0,769713	0,290663	0,699417	24,17%	10,05%
1,0	0,297074	0,683368	0,435962	0,544352	31,86%	25,54%
2,0	0,358962	0,602683	0,588000	0,373347	38,95%	61,43%
5,0	0,396636	0,512713	0,737507	0,173152	46,22%	196,11%

Percebemos que, no caso da placa, quanto maior a espessura, maior o erro das medidas e que o erro decresce com o aumento de c . Isso é mais facilmente visto nas figuras 4.1 e 4.2.

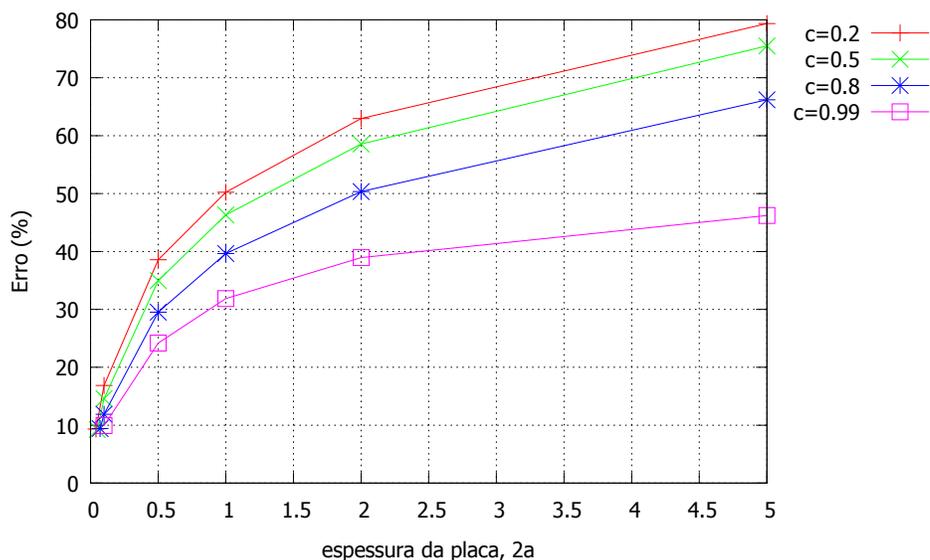


Figura 4.1: Erro de A^* e A conforme valor de c e espessura

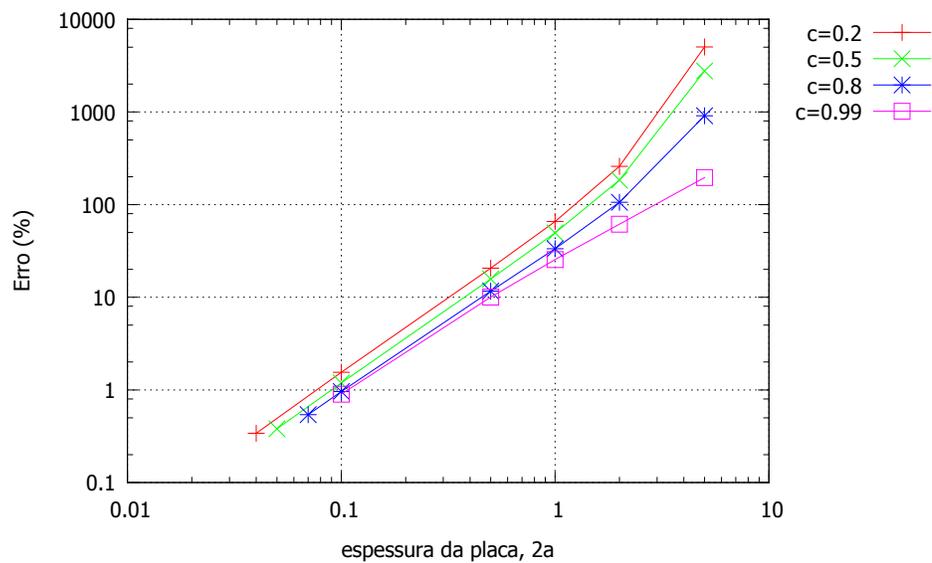


Figura 4.2: Erro de B^* e B conforme valor de c e espessura (log)

Então, avaliando valores pequenos de c , procuramos qual espessura deve ter a placa para termos um erro menor que 10%, o que vemos nas tabelas 4.5 e 4.6.

Tabela 4.5: Valores de c e da espessura para termos erros aceitáveis do albedo

c	$2a$	A^*	A	$ 1 - \frac{A^*}{A} $
0,1	0,04	0,00306529	0,00339758	9,78%
0,09	0,04	0,00275513	0,00305527	9,82%
0,08	0,04	0,00244578	0,00271353	9,87%
0,05	0,04	0,00152259	0,00169172	10,00%

Tabela 4.6: Valores de c e da espessura para termos erros aceitáveis do fator de transmissão

c	$2a$	B^*	B	$ 1 - \frac{B^*}{B} $
0,05	0,34	0,642044	0,570713	12,50%
0,05	0,3	0,668752	0,606578	10,25%
0,05	0,29	0,675809	0,615972	9,71%

Então, verificamos que para termos um erro menor que 10% precisamos ter, para o fator de transmissão (B^*), $0,05 \leq c < 1$ e $2a \leq 0,29$ e para o albedo (A^*), $0,05 \leq c < 1$ e $2a \leq 0,04$. Logo, se queremos uma precisão mínima de 10% de erro temos que dividir nosso domínio em subintervalos com espessura óptica máxima de 0.04.

Todos os métodos nodais convencionais precisam estimar os fluxos nos contornos como aqui feito nas equações (4.55) e (4.56). Em geral tais metodologias são associadas com processos iterativos ao longo do domínio. No caso da abordagem analítica isto não é necessário, mas fica evidente a importância da aproximação usada, como nas equações (4.63) e (4.64).

Assim temos duas abordagens diferentes para resolver um mesmo problema de transporte, na forma mais simplificada, onde a diferença entre eles é que no primeiro as aproximações feitas são apenas a aplicação de ordenadas discretas e a quadratura de Gauss-Legendre para o termo integral, o que gera resultados para qualquer ponto no domínio. Na segunda abordagem usamos aproximações nos contornos e trabalhamos com médias, dessa forma não temos soluções para cada ponto do domínio, e sim uma solução média para o problema.

5 MÉTODOS ITERATIVOS

Em simulações de ordenadas discretas de grandes problemas envolvendo interação linear entre radiação e matéria, o problema de interesse é discretizado e o sistema de equações algébricas resultante é resolvido iterativamente [1]. Durante os últimos 50 anos, progressos significativos têm sido alcançados no desenvolvimento de métodos que aceleram a convergência iterativa desses problemas. Os progressos consistem em [1]:

- i uma teoria para derivar as estratégias de aceleração;
- ii uma teoria para prever as propriedades de convergência das novas estratégias;
- iii a implementação desses conceitos em códigos computacionais.

Devido ao grande tamanho do sistema, pelas aproximações feitas tornando a equação íntegro-diferencial em um sistema de equações, onde a precisão está diretamente ligada com o grau da quadratura e a espessura da malha, métodos diretos para a solução são impraticáveis, então, métodos iterativos se fazem necessários. Os melhores métodos iterativos são os que convergem rápido e incondicionalmente.

O desenvolvimento de esquemas iterativos eficientes para problemas de ordenadas discretas tem sido interesse de muitos pesquisadores desde o início dos anos 60 [1]. Atualmente, é quase impensável escrever um código S_N de transporte de partículas de grande escala que não empregue um método iterativo razoavelmente eficiente. No entanto, o desenvolvimento de tais métodos não é simples e dificuldades significativas permanecem, como [1]:

- A solução de um problema de transporte de nêutrons, como já vimos, é uma função de sete variáveis livres;

- A solução da equação linear de Boltzmann não é uma função suave das variáveis espacial e angular;
- Como a equação linear de Boltzmann se comporta de maneiras diferentes, para regiões diferentes é extremamente difícil encontrar métodos de discretização que sejam precisos sobre essa vasta gama de comportamentos.

Por essas razões, e por causa do desafio prático de modelagem de problemas cada vez mais complexos, com precisão cada vez maior, o desenvolvimento de métodos de discretização avançados para a equação de transporte tem sido uma importante área de pesquisa. Igualmente importante é o problema de desenvolver estratégias iterativas eficientes para resolver o sistema algébrico de equações discretizadas.

Para tratarmos de problemas mais simples podemos considerar um caso de transporte de partículas em estado estacionário, monoenergético, com espalhamento isotrópico, fonte fixa e geometria plana, com $0 \leq x \leq X$, como é o caso da equação (3.24), sujeita as condições de contorno impostas

$$\psi(0, \mu) = F_1(\mu), \quad \mu \in (0, 1] \quad (5.1)$$

$$\psi(X, \mu) = F_2(\mu), \quad \mu \in [-1, 0). \quad (5.2)$$

A discretização das equações (3.24), (5.1) e (5.2) introduz complicações significativas no desenvolvimento dos métodos iterativos. Simplificando a notação, escrevemos (3.24) definindo

$$L = \mu \frac{\partial}{\partial x} + \sigma_t(x) = \text{operador fuga + colisão}, \quad (5.3)$$

$$S = \frac{\sigma_s(x)}{2} \int_{-1}^1 (\cdot) d\mu' = \text{operador espalhamento}, \quad (5.4)$$

$$q(x) = S(x). \quad (5.5)$$

Então (3.24) pode ser escrita

$$L\psi = S\psi + q. \quad (5.6)$$

O esquema iterativo de transporte mais básico é o chamado *Source Iteration* (SI) [1], definido por

$$L\psi^{(l+1)} = S\psi^{(l)} + q, \quad l \geq 0, \quad (5.7)$$

onde $\psi^{(0)}$ é escolhido pelo usuário. Operacionalmente o esquema SI funciona da seguinte maneira:

No início de cada iteração, é introduzido uma estimativa inicial para ϕ do fluxo escalar

$$\phi(x) = \int_{-1}^1 \psi(x, \mu') d\mu' \quad (5.8)$$

no lado direito de (3.24). Usando essa estimativa, (3.24), (5.1) e (5.2) são resolvidas para obter uma estimativa para ψ , que é introduzida em (5.8) para obter a nova estimativa para ϕ .

O processo é repetido até satisfazer o critério de convergência requerido. Se o sistema tem absorção significativa ou é opticamente fino, as partículas geralmente têm histórias curtas, e o esquema SI convergirá rapidamente. Contudo, se o sistema físico é opticamente largo e com baixa absorção, isto é, difusivo, então a maioria das partículas terão histórias longas e o esquema convergirá lentamente [2].

Para avaliar a convergência de um esquema usamos o conceito de razão espectral, ρ , que é a razão do erro na l -ésima iteração com o erro na $(l - 1)$ -ésima iteração (para l grande)

$$\rho = \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{\|\psi - \psi^{(l)}\|}{\|\psi - \psi^{(l-1)}\|} \quad (5.9)$$

Uma definição equivalente permite ρ ser estimado sem conhecer o limite da sequência de iteração [2]

$$\rho = \lim_{l \rightarrow \infty} \frac{\|\psi^{(l)} - \psi^{(l-1)}\|}{\|\psi^{(l-1)} - \psi^{(l-2)}\|}. \quad (5.10)$$

Um esquema rapidamente convergente terá $\rho \ll 1$, um esquema lentamente convergente terá $\rho < 1$, e um esquema não convergente terá $\rho \geq 1$. Segundo Azmy & Sartori [2], o esquema SI aplicado para a equação de transporte para um grupo em um meio homogêneo infinito têm razão espectral:

$$\rho = \frac{\sigma_s}{\sigma_t} = c = \text{razão de espalhamento}$$

Portanto, segundo [2], o esquema SI aplicado a problemas de um grupo de energia sempre converge. Mas se c é arbitrariamente próximo de 1, isto é, a probabilidade de absorção é pequena, o esquema convergirá lentamente.

Para avaliar os conceitos apresentados, segue-se com uma abordagem iterativa com discretização espacial, onde podemos variar o razão espectral e assim observarmos o tempo de convergência quando o ρ se aproxima da unidade e o que pode ocorrer quando o consideramos domínios maiores.

Considerando uma abordagem simplificada, apresentada anteriormente, temos a equação do transporte (3.24), seguindo trabalho de Barros [9], começamos com a discretização angular utilizando o método S_N , obtendo a equação (3.25), onde utilizamos o esquema de quadratura de Gauss-Legendre. Por simplicidade, chamaremos

$$\psi(x, \mu_i) = \psi_i(x), \quad (5.11)$$

assim nossa equação é escrita como

$$\mu_i \frac{d}{dx} \psi_i(x) + \sigma_t(x) \psi_i(x) = \frac{\sigma_s(x)}{2} \sum_{k=1}^N \psi_k(x) \omega_k + S(x), \quad 0 < x < L. \quad (5.12)$$

Depois discretizamos o domínio espacial, utilizando os métodos mencionados no capítulo 3. Então, considerando um domínio unidimensional de comprimento L , consideraremos um nodo espacial de espessura h_j , os parâmetros σ_{t_j} , σ_{s_j} constantes e fonte isotrópica constante S_j .

A abordagem de ordenadas discretas é válida para qualquer célula arbitrária, então, podemos escrever a equação (5.12) como

$$\mu_i \frac{d}{dx} \psi_i(x) + \sigma_{t_j} \psi_i(x) = \frac{\sigma_{s_j}}{2} \sum_{k=1}^N \psi_k(x) \omega_k + S_j, \quad (5.13)$$

onde

$$x_{j-1/2} < x < x_{j+1/2}, \quad i = 1, \dots, N. \quad (5.14)$$

Ilustramos a grade espacial na figura abaixo.

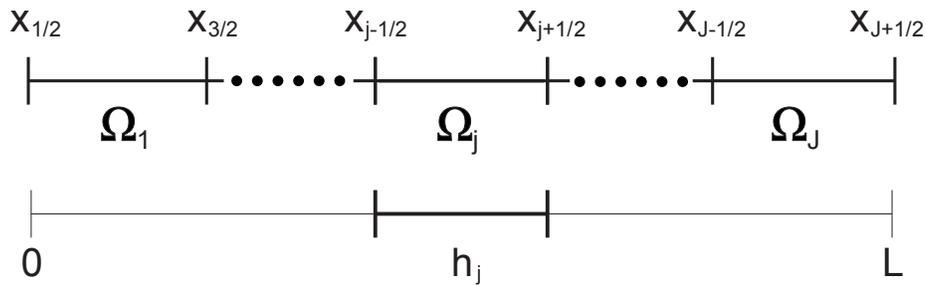


Figura 5.1: Grade Espacial

Usando o teorema de valor médio para integrais

$$\bar{f} = \frac{1}{b-a} \int_a^b f(x) dx, \quad (5.15)$$

podemos escrever o fluxo angular médio na célula de discretização espacial

$$\bar{\psi}_{i,j} = \frac{1}{h_j} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} \psi_{i,j}(x) dx, \quad (5.16)$$

integrando a equação (5.13) utilizando o operador

$$\frac{1}{h_j} \int_{x_{j-1/2}}^{x_{j+1/2}} (\cdot) dx, \quad (5.17)$$

obtemos as equações discretizadas de balanço espacial

$$\frac{\mu_i}{h_j} (\psi_{i,j+1/2} - \psi_{i,j-1/2}) + \sigma_{t_j} \bar{\psi}_{i,j} = \frac{\sigma_{s_j}}{2} \sum_{k=1}^N \bar{\psi}_{k,j} \omega_k + S_j, \quad (5.18)$$

onde

$$\psi_{i,j\pm 1/2} = \psi_i(x_{j\pm 1/2}). \quad (5.19)$$

Assim, temos $3N$ incógnitas para a solução do sistema de N equações (5.18), como as condições de contorno nos fornecem mais N equações, reduzimos a quantidade de incógnitas para $2N$, teremos então N equações e $2N$ incógnitas.

Para que possamos encontrar uma única solução desse problema, é necessário que utilizemos N equações auxiliares, assim como no capítulo anterior usamos as equações (4.63) e (4.64) para solucionarmos o problema, que escrevemos na forma

$$\bar{\psi}_{i,j} = \frac{(1 + \theta_{i,j})\psi_{i,j+1/2} + (1 - \theta_{i,j})\psi_{i,j-1/2}}{2}. \quad (5.20)$$

Substituindo (5.20) em (5.18) temos

$$\psi_{i,j+1/2} = \frac{\left(\frac{\mu_i}{h_j} - \frac{\sigma_{t_j}}{2}(1 - \theta_{i,j})\right) \psi_{i,j-1/2} + \frac{\sigma_{s_j}}{2} \sum_{k=1}^N \bar{\psi}_{k,j} \omega_k + S_j}{\frac{\mu_i}{h_j} + \frac{\sigma_{t_j}}{2}(1 + \theta_{i,j})}, \quad (5.21)$$

onde

$$j = 1, \dots, J; \quad i = 1, \dots, \frac{N}{2} \quad (\mu_i > 0) \quad (5.22)$$

e

$$\psi_{i,j-1/2} = \frac{\left(\frac{|\mu_i|}{h_j} - \frac{\sigma_{t_j}}{2}(1 + \theta_{i,j})\right) \psi_{i,j+\frac{1}{2}} + \frac{\sigma_{s_j}}{2} \sum_{k=1}^N \bar{\psi}_{k,j} \omega_k + S_j}{\frac{|\mu_i|}{h_j} + \frac{\sigma_{t_j}}{2}(1 - \theta_{i,j})}, \quad (5.23)$$

onde

$$j = J, \dots, 1; \quad i = \left(\frac{N}{2} + 1\right), \dots, N \quad (\mu_i < 0). \quad (5.24)$$

O que pode variar nessas equações é o valor de θ , esse valor é definido conforme o método utilizado nos cálculos, discutiremos agora os métodos de discretização espacial já citados.

5.1 Método *Diamond Difference* (DD)

Considera que o fluxo angular médio em cada nodo é a média aritmética dos fluxos angulares nas interfaces da célula espacial [9], método trapezoidal. Para satisfazermos (5.20) tomamos $\theta_{i,j} = 0$, e temos a equação auxiliar

$$\bar{\psi}_{i,j} = \frac{\psi_{i,j-1/2} + \psi_{i,j+1/2}}{2} \quad (5.25)$$

para finalizar, substituímos o valor de $\theta_{i,j} = 0$ nas equações (5.21) e (5.23) para termos o esquema iterativo completo.

5.2 Método Degrau

Aproximamos o fluxo angular médio em cada nodo pelo fluxo angular em uma das interfaces da célula [9]. Para a varredura a direita, aproximamos o fluxo angular médio pelo fluxo angular na posição $x_{j+\frac{1}{2}}$, e para a varredura para a esquerda, aproximamos pelo fluxo na posição $x_{j-\frac{1}{2}}$. Assim, consideramos $\theta_{i,j} = 1$ para $\mu_i > 0$ e $\theta_{i,j} = -1$ para $\mu_i < 0$, temos então as seguintes equações auxiliares

$$\bar{\psi}_{i,j} = \psi_{i,j+1/2}, \quad \mu_i > 0 \quad (5.26)$$

e

$$\bar{\psi}_{i,j} = \psi_{i,j-1/2}, \quad \mu_i < 0. \quad (5.27)$$

Usando esses valores de $\theta_{i,j}$ nas equações (5.21) e (5.23) temos o esquema iterativo.

5.3 Método Degrau Característico (DC)

Esse método não apresenta valores constantes para o parâmetro da equação auxiliar, ele aproxima o termo de espalhamento por uma constante que chamaremos que Q_j , podemos escrever (5.12) como

$$\mu_i \frac{d}{dx} \psi_i(x) + \sigma_t(x) \psi_i(x) = F_j, \quad (5.28)$$

onde

$$F_j = S_j + Q_j. \quad (5.29)$$

Multiplicando a equação (5.28) por $e^{\frac{\sigma_{t_j}}{\mu_i} x}$, dividindo por μ_i e usando a regra do produto para derivação temos que

$$d \left[\psi_i(x) e^{(\sigma_{t_j}/\mu_i)x} \right] = \frac{F_j}{\mu_i} e^{(\sigma_{t_j}/\mu_i)x} dx. \quad (5.30)$$

Integrando a equação acima com relação a x temos

$$\int_{x_{j-1/2}}^x d \left[\psi_i(x) e^{(\sigma_{t_j}/\mu_i)x'} \right] = \frac{F_j}{\mu_i} \int_{x_{j-1/2}}^x e^{(\sigma_{t_j}/\mu_i)x'} dx' \quad (5.31)$$

e resolvendo as integrais acima obtemos uma expressão geral para o fluxo angular

$$\psi_i(x) = \psi_{i,j-1/2} e^{-\sigma_{t_j}/\mu_i (x-x_{j-1/2})} + \frac{F_j}{\sigma_{t_j}} \left[1 - e^{-\sigma_{t_j}/\mu_i (x-x_{j-1/2})} \right], \quad x \in \Omega_j. \quad (5.32)$$

Para definirmos o valor do parâmetro, começamos com a definição de fluxo angular médio no nodo (5.20), e usando o valor de $\psi_m(x)$ dado em (5.32),

chegamos na expressão

$$\bar{\psi}_{i,j} = \frac{\mu_i}{\sigma_{t_j}} \left[\frac{\psi_{i,j-1/2}}{h_j} - \frac{F_j}{h_j \sigma_{t_j}} \right] \left[1 - e^{-\sigma_{t_j}/\mu_i} \right] + \frac{F_j}{\sigma_{t_j}}. \quad (5.33)$$

Para avaliar os termos $\psi_{i,j-1/2}$ e $\psi_{i,j+1/2}$, substituímos $x = x_{j-1/2}$ e $x = x_{j+1/2}$ em (5.32) e encontramos

$$\psi_i(x_{j-1/2}) = \psi_{i,j-1/2} \quad (5.34)$$

e

$$\psi_i(x_{j+1/2}) = \psi_{i,j-1/2} e^{-\sigma_{t_j}/\mu_i} h_j + \frac{F_j}{\sigma_{t_j}} \left[1 - e^{-\sigma_{t_j}/\mu_i} h_j \right]. \quad (5.35)$$

Substituindo os valores encontrados acima na equação (5.20), obtemos

$$\frac{2\mu_i}{h_j \sigma_{t_j}} \left[1 - e^{-\sigma_{t_j} h_j / \mu_i} \right] = \left[1 + e^{-\sigma_{t_j} h_j / \mu_i} \right] - \left[1 - e^{-\sigma_{t_j} h_j / \mu_i} \right] \theta_{i,j}. \quad (5.36)$$

Multiplicando (5.36) por $\frac{1}{2} e^{\sigma_{t_j} h_j / 2\mu_i}$, temos

$$\frac{2\mu_i}{h_j \sigma_{t_j}} \left[\frac{e^{\sigma_{t_j} h_j / 2\mu_i} - e^{-\sigma_{t_j} h_j / 2\mu_i}}{2} \right] = \left[\frac{e^{\sigma_{t_j} h_j / 2\mu_i} + e^{-\sigma_{t_j} h_j / 2\mu_i}}{2} \right] - \left[\frac{e^{\sigma_{t_j} h_j / 2\mu_i} - e^{-\sigma_{t_j} h_j / 2\mu_i}}{2} \right] \theta_{i,j}, \quad (5.37)$$

que pode ser reescrita na forma

$$\frac{2\mu_i}{h_j \sigma_{t_j}} \left[\sinh \left(\frac{\sigma_{t_j} h_j}{2\mu_i} \right) \right] = \cosh \left(\frac{\sigma_{t_j} h_j}{2\mu_i} \right) - \sinh \left(\frac{\sigma_{t_j} h_j}{2\mu_i} \right) \theta_{i,j}. \quad (5.38)$$

Explicitando $\omega_{i,j}$ temos

$$\omega_{i,j} = \coth \left(\frac{h_j \sigma_{t_j}}{2\mu_i} \right) - \frac{2\mu_i}{h_j \sigma_{t_j}}. \quad (5.39)$$

Para $\mu_i > 0$, usamos a própria expressão (5.39), pois na varredura a direita, os valores de μ_i são sempre positivos, como nas tabelas das quadratura de

Gauss-Legendre. Para $\mu_i < 0$, precisamos analisar os sinais da equação (5.39), dado que os valores tabelados são sempre positivos. Então temos

$$\cosh\left(\frac{h_j\sigma_{t_j}}{2\mu_i}\right) = \cosh\left(\frac{h_j\sigma_{t_j}}{2|\mu_i|}\right) \quad (5.40)$$

e

$$\sinh\left(\frac{h_j\sigma_{t_j}}{2\mu_i}\right) = -\sinh\left(\frac{h_j\sigma_{t_j}}{2|\mu_i|}\right) \quad (5.41)$$

Então, reescrevemos a equação (5.39) como

$$\omega_{i,j} = -\coth\left(\frac{h_j\sigma_{t_j}}{2|\mu_i|}\right) + \frac{2|\mu_i|}{h_j\sigma_{t_j}}, \quad \mu_i < 0. \quad (5.42)$$

E assim, voltando em (5.21) e (5.23) temos a solução do sistema iterativo.

Em qualquer um dos métodos podemos definir o fluxo escalar como

$$\phi(x) = \sum_{k=1}^N \psi_k(x)\omega_k. \quad (5.43)$$

5.4 Resultados Numéricos

Nesse capítulo, os resultados foram obtidos através de implementação de programas em Fortran95, usamos as subrotinas do Lapack DGEEVX e DSTEQR para cálculos de autovalores e autovetores, DGETRF para fatoração LU e DGETRS para resolução de sistema linear, para todos os resultados apresentados o tempo computacional não apresentou diferenças significativas entre os métodos, não ultrapassando 2s.

Usando o valor encontrado para o fluxo escalar na equação (5.43), observamos a convergência de cada método conforme alteramos os valores de ρ e a dimensão do sistema. Para o problema com comprimento $X = 1$, dividindo o domínio em 1000 partes, com as condições de contorno $\psi(0, \mu) = 1$ e $\psi(X, \mu) = 0$

e $N = 20$ número de nós do esquema de quadratura de Gauss-Legendre, $\sigma_{s_j} = \rho$ e $\sigma_{t_j} = 1$, verificamos a solução analítica e o número de iterações necessárias na solução numérica para que os critérios de parada abaixo, normalmente utilizados na literatura, sejam atingidos

$$\left\| \frac{\psi^{(l)} - \psi^{(l-1)}}{\psi^{(l-1)}} \right\|_{\infty} < 10^{-5} \quad (5.44)$$

e

$$\|\psi^{(l)} - \psi^{(l-1)}\|_{\infty} < 10^{-6}, \quad (5.45)$$

onde consideramos

$$\|\boldsymbol{\rho}\|_{\infty} = \max_{i=1}^N |\rho_i| \quad (5.46)$$

Temos como resultado os vistos nas tabelas 5.1 - 5.4:

Tabela 5.1: Convergência do fluxo escalar nos esquemas para $\rho = 0, 1$

método	DD	DD	Degrau	Degrau	DC	DC	Analítico
x	l=6	l=7	l=6	l=7	l=11	l=12	
0,0	1,02565	1,02565	1,025652	1,025652	1,02565	1,02565	1,02565
0,1	0,759414	0,759414	0,759937	0,759937	0,759414	0,759414	0,75471
0,2	0,605470	0,605470	0,605929	0,605929	0,605470	0,605470	0,60647
0,3	0,498789	0,498789	0,499173	0,499173	0,498789	0,498789	0,49988
0,4	0,417510	0,417510	0,417850	0,417850	0,417510	0,417510	0,41796
0,5	0,352723	0,352723	0,353032	0,353032	0,352723	0,352723	0,35279
0,6	0,299848	0,299848	0,300132	0,300132	0,299848	0,299848	0,29976
0,7	0,256038	0,256038	0,256298	0,256298	0,256038	0,256038	0,25593
0,8	0,219283	0,219283	0,219520	0,219520	0,219283	0,219283	0,21920
0,9	0,187996	0,187996	0,188210	0,188210	0,187996	0,187996	0,18798
1,0	0,160610	0,160610	0,160807	0,160807	0,160610	0,160610	0,16057

Tabela 5.2: Convergência do fluxo escalar nos esquemas para $\rho = 0,4$

método	DD	DD	Degrau	Degrau	DC	DC	Analítico
x	l=11	l=12	l=11	l=12	l=11	l=12	
0,0	1,12128	1,12128	1,12127	1,12127	1,12128	1,12128	1,12129
0,1	0,880396	0,880396	0,880857	0,880858	0,880396	0,880396	0,87599
0,2	0,730244	0,730245	0,730682	0,730683	0,730244	0,730245	0,73076
0,3	0,619946	0,619947	0,620336	0,620336	0,619946	0,619947	0,62071
0,4	0,531912	0,531913	0,532272	0,532272	0,531912	0,531913	0,53220
0,5	0,458780	0,458780	0,459118	0,459118	0,458780	0,458780	0,45876
0,6	0,396646	0,396646	0,396964	0,396964	0,396646	0,396647	0,39649
0,7	0,342955	0,342956	0,343251	0,343251	0,342955	0,342956	0,34276
0,8	0,295694	0,295694	0,295964	0,295965	0,295694	0,295694	0,29554
0,9	0,252775	0,252775	0,253020	0,253021	0,252775	0,252775	0,25292
1,0	0,210767	0,210767	0,211008	0,211008	0,210767	0,210767	0,21064

Tabela 5.3: Convergência do fluxo escalar nos esquemas para $\rho = 0,6$

método	DD	DD	Degrau	Degrau	DC	DC	Analítico
x	l=15	l=16	l=15	l=16	l=15	l=16	
0,0	1,208793	1,208794	1,208760	1,208760	1,208793	1,208794	1,20881
0,1	0,992385	0,992385	0,992771	0,992771	0,992385	0,992385	0,98841
0,2	0,848807	0,848807	0,849196	0,849196	0,848807	0,848807	0,84901
0,3	0,737951	0,737952	0,738313	0,738314	0,737952	0,737952	0,73846
0,4	0,645753	0,645753	0,646098	0,646099	0,645753	0,645753	0,64592
0,5	0,566240	0,566240	0,566574	0,566574	0,566240	0,566240	0,56615
0,6	0,496172	0,496172	0,496492	0,496492	0,496172	0,496172	0,49597
0,7	0,433312	0,433313	0,433615	0,433615	0,433312	0,433313	0,43306
0,8	0,375677	0,375677	0,375956	0,375956	0,385677	0,385677	0,67550
0,9	0,320703	0,320703	0,320957	0,320958	0,320703	0,320703	0,32106
1,0	0,263101	0,263101	0,263371	0,263371	0,263101	0,263101	0,26291

Tabela 5.4: Convergência dos esquemas para $\rho = 0,99$

método	DD	DD	Degrau	Degrau	DC	DC	Analítico
x	l=28	l=29	l=28	l=29	l=28	l=29	
0,0	1,504317	1,504317	1,504100	1,504101	1,504317	1,504317	1,50453
0,1	1,375553	1,375554	1,375512	1,375512	1,375553	1,375554	1,37370
0,2	1,268714	1,268714	1,268693	1,268694	1,268714	1,268714	1,26863
0,3	1,170242	1,170243	1,170232	1,170232	1,170242	1,170243	1,17040
0,4	1,075412	1,075413	1,075417	1,075418	1,075412	1,075413	1,07549
0,5	0,982225	0,982226	0,982248	0,982249	0,982225	0,982226	0,98221
0,6	0,889484	0,889485	0,889525	0,889526	0,889484	0,889485	0,88937
0,7	0,796025	0,796026	0,796080	0,796081	0,796025	0,796026	0,79584
0,8	0,699979	0,699979	0,700042	0,700043	0,699979	0,699980	0,70003
0,9	0,597000	0,597001	0,597080	0,597081	0,597000	0,597001	0,59868
1,0	0,474681	0,474682	0,474917	0,474917	0,474681	0,474682	0,47444

Percebemos um pequeno aumento no número de iterações necessárias para satisfazermos os critérios de convergência para o domínio dado. Então para avaliarmos melhor a razão de convergência mantemos o problema com $\rho = 0,99$ e aumentamos o tamanho do domínio, resultados são vistos nas tabelas 5.5 - 5.10:

Tabela 5.5: Convergência do fluxo escalar para o esquema iterativo DD para $X = 20$

x	l=532	l=533	Analítico
0,0	1,817928	1,817928	1,81793
2,0	1,252608	1,252608	1,25251
4,0	0,885055	0,885055	0,88501
6,0	0,624780	0,624780	0,62477
8,0	0,439688	0,439689	0,43970
10,0	0,307474	0,307475	0,30750
12,0	0,212240	0,212241	0,21227
14,0	0,142533	0,142534	0,14257
16,0	$8,99708 \times 10^{-2}$	$8,997144 \times 10^{-2}$	$9,0003 \times 10^{-2}$
18,0	$4,81944 \times 10^{-2}$	$4,81948 \times 10^{-2}$	$4,8218 \times 10^{-2}$
20,0	$1,00141 \times 10^{-2}$	$1,00142 \times 10^{-2}$	$1,0017 \times 10^{-2}$

Tabela 5.6: Convergência do fluxo escalar para o esquema iterativo Degrau para $X = 20$

x	l=527	l=528	Analítico
0,0	1,817901	1,817901	1,81793
2,0	1,259801	1,259801	1,25251
4,0	0,894565	0,894566	0,88501
6,0	0,634587	0,634588	0,62477
8,0	0,448718	0,448719	0,43970
10,0	0,315217	0,315218	0,30750
12,0	0,218506	0,218507	0,21227
14,0	0,147298	0,147299	0,14257
16,0	$9,32838 \times 10^{-2}$	$9,32844 \times 10^{-2}$	$9,0003 \times 10^{-2}$
18,0	$5,01190 \times 10^{-2}$	$5,01194 \times 10^{-2}$	$4,8218 \times 10^{-2}$
20,0	$1,05510 \times 10^{-2}$	$1,05511 \times 10^{-2}$	$1,0017 \times 10^{-2}$

Tabela 5.7: Convergência do fluxo escalar para o esquema iterativo DC para $X = 20$

x	l=532	l=533	Analítico
0,0	1,818027	1,818027	1,81793
2,0	1,252929	1,252929	1,25251
4,0	0,885442	0,885443	0,88501
6,0	0,625164	0,625165	0,62477
8,0	0,440033	0,440034	0,43970
10,0	0,307764	0,307765	0,30750
12,0	0,212470	0,212471	0,21227
14,0	0,142704	0,142705	0,14257
16,0	$9,00864 \times 10^{-2}$	$9,00870 \times 10^{-2}$	$9,0003 \times 10^{-2}$
18,0	$4,82584 \times 10^{-2}$	$4,82588 \times 10^{-2}$	$4,8218 \times 10^{-2}$
20,0	$1,00279 \times 10^{-2}$	$1,00279 \times 10^{-2}$	$1,0017 \times 10^{-2}$

Tabela 5.8: Convergência do fluxo escalar para o esquema iterativo DD para $X = 50$

x	l=1011	l=1012	Analítico
0,0	1,81818	1,81818	1,8181
5,0	0,746682	0,746682	0,7466
10,0	0,315150	0,315150	0,3151
15,0	0,133017	0,133017	0,1330
20,0	$5,61417 \times 10^{-2}$	$5,61417 \times 10^{-2}$	$5,613 \times 10^{-2}$
25,0	$2,36926 \times 10^{-2}$	$2,36926 \times 10^{-2}$	$2,369 \times 10^{-2}$
30,0	$9,99291 \times 10^{-3}$	$9,99293 \times 10^{-3}$	$9,993 \times 10^{-3}$
35,0	$4,20187 \times 10^{-3}$	$4,20189 \times 10^{-3}$	$4,202 \times 10^{-3}$
40,0	$1,73685 \times 10^{-3}$	$1,73686 \times 10^{-3}$	$1,7376 \times 10^{-3}$
45,0	$6,46984 \times 10^{-4}$	$6,46989 \times 10^{-4}$	$6,474 \times 10^{-4}$
50,0	$5,65622 \times 10^{-5}$	$5,65628 \times 10^{-5}$	$5,660 \times 10^{-5}$

Tabela 5.9: Convergência do fluxo escalar para o esquema iterativo Degrau para

 $X = 50$

x	l=986	l=987	Analítico
0,0	1,81818	1,81818	1,8181
5,0	0,771704	0,771704	0,7466
10,0	0,336042	0,336042	0,3151
15,0	0,146334	0,146334	0,1330
20,0	$6,37210 \times 10^{-2}$	$6,37210 \times 10^{-2}$	$5,613 \times 10^{-2}$
25,0	$2,77431 \times 10^{-2}$	$2,77431 \times 10^{-2}$	$2,369 \times 10^{-2}$
30,0	$1,20703 \times 10^{-2}$	$1,20703 \times 10^{-2}$	$9,993 \times 10^{-3}$
35,0	$5,23272 \times 10^{-3}$	$5,23274 \times 10^{-3}$	$4,202 \times 10^{-3}$
40,0	$2,22591 \times 10^{-3}$	$2,22592 \times 10^{-3}$	$1,7376 \times 10^{-3}$
45,0	$8,49064 \times 10^{-4}$	$8,49072 \times 10^{-4}$	$6,474 \times 10^{-4}$
50,0	$7,75304 \times 10^{-5}$	$7,75312 \times 10^{-5}$	$5,660 \times 10^{-5}$

Tabela 5.10: Convergência do fluxo escalar para o esquema iterativo DC para $X = 50$

x	l=1015	l=1016	Analítico
0,0	1,818790	1,818790	1,8181
5,0	0,749162	0,749162	0,7466
10,0	0,317104	0,317104	0,3151
15,0	0,134226	0,134226	0,1330
20,0	$5,68146 \times 10^{-2}$	$5,68146 \times 10^{-2}$	$5,613 \times 10^{-2}$
25,0	$2,40453 \times 10^{-2}$	$2,40453 \times 10^{-2}$	$2,369 \times 10^{-2}$
30,0	$1,01705 \times 10^{-2}$	$1,01705 \times 10^{-2}$	$9,993 \times 10^{-3}$
35,0	$4,28848 \times 10^{-3}$	$4,28850 \times 10^{-3}$	$4,202 \times 10^{-3}$
40,0	$1,77718 \times 10^{-3}$	$1,77719 \times 10^{-3}$	$1,7376 \times 10^{-3}$
45,0	$6,63238 \times 10^{-4}$	$6,63244 \times 10^{-4}$	$6,474 \times 10^{-4}$
50,0	$5,80267 \times 10^{-5}$	$5,80273 \times 10^{-5}$	$5,660 \times 10^{-5}$

Analisando os três métodos: *Diamond Difference*, Degrau e Degrau Característico, encontrados em Barros [9] e Domingues [14], é possível notar que quando o razão espectral se aproxima de 1, o número de iterações necessárias para que o esquema atinja os critérios de convergência cresce significativamente. Em comparação com o método analítico vemos que os resultados são mais próximos em domínios menores.

6 CONCLUSÕES

Neste trabalho esquemas nodais foram desenvolvidos para o tratamento de problemas unidimensionais de transporte de partículas, com aplicação em geofísica nuclear. Em tais esquemas, baseados na definição de grandezas médias, a complexidade do modelo matemático da equação de transporte é reduzida pela definição de um processo de integração. Devido a tal processo de integração, incógnitas adicionais, relacionadas com fluxos desconhecidos nas fronteiras do domínio de integração são introduzidas e equações auxiliares são necessárias para seu tratamento. No caso da abordagem analítica aqui proposta, o domínio de integração pode ser o mesmo de definição do problema. No caso dos métodos numéricos, o domínio é dividido em nodos. Para ambos os casos foram usadas diferentes aproximações para os termos desconhecidos relativos a fluxos nas fronteiras e tais propostas resultaram em diferenças na performance do esquema. Em ambos os casos também se verificou que estas aproximações podem gerar resultados incorretos ao problema. Contudo, no caso das técnicas analíticas, em geral, processos iterativos são dispensados.

Com base no estudo aqui iniciado alguns tópicos devem ser investigados em maiores detalhes na continuidade desta pesquisa:

- (i) implementação do caso bidimensional;
- (ii) proposta de novas equações auxiliares associadas com os esquemas nodais para casos bidimensionais;
- (iii) associação das técnicas analíticas com esquemas iterativos para problemas multidimensionais;
- (iv) utilização de tais técnicas para problemas dependentes do tempo, de interesse particular em problemas de geofísica nuclear.

Referências Bibliográficas

- [1] M. L. Adams and E. W. Larsen. Fast iterative methods for discrete-ordinates particle transport calculations. *Progress in Nuclear Energy*, 40(1):3 – 159, 2002.
- [2] Y. Azmy and E. Sartori. *Nuclear Computational Science: A Century in Review*. Springer, 2010.
- [3] Y. Y. Azmy. Arbitrarily high order characteristic methods for solving the neutron transport equation. *Ann. Nucl. Energy*, 19(10–12):593–606, 1992.
- [4] A. Badruzzaman. Nodal methods in transport theory. *Advances in Nuclear Science and Technology*, 21, 1990.
- [5] A. Badruzzaman. Computational methods in nuclear geophysics. *Progress in Nuclear Energy*, 25(2 - 3):265 – 290, 1991.
- [6] L.B. Barichello. *Thermal Measurements and Inverse Techniques*. CRC Press, Boca Raton, 2011.
- [7] L.B. Barichello, L.C. Cabrera, and J.F. Prolo Filho. An analytical discrete ordinates solution for two dimensional problems based on nodal schemes. *International Nuclear Atlantic Conference*, 2009.
- [8] L.B. Barichello and C.E. Siewert. Some evaluations of basic nodal-like schemes for a selection of classical problems in particle transport theory. *Annals of Nuclear Energy*, 38:2101–2104, 2011.
- [9] R. Barros. Curso em teoria do transporte de partículas neutras: Modelagem matemática e computacional. *Programa de Pós Graduação em Engenharia Mecânica - UFRGS*, 2013.

- [10] G.I. Bell and S. Glasstone. *Nuclear Reactor Theory*. Robert E. Krieger Publishing Company, New York, 1979.
- [11] C. Cercignani. *Theory and Application of the Boltzmann Equation*. Elsevier, New York, 1975.
- [12] C. Cercignani. *The Boltzmann Equation and Its Application*. Springer, New York, 1988.
- [13] S. Chandrasekhar. *Radiative Transfer*. Oxford University Press, London, 1950.
- [14] D. S. Dominguez. *Método Espectro-Nodal Linear para Problemas de Transporte de Nêutrons na Formulação de Ordenadas Discretas em Geometria Bidimensional Cartesiana*. Doutorado modelagem computacional, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, 2006.
- [15] D.V. Ellis. *Well Logging for Earth Scientists*. Elsevier, 1987.
- [16] R.D.M. Garcia. Métodos para solução da equação de transportes de partículas íntegro-diferencial. *Escola de Verão em Teoria de Transporte de Partículas Neutras, PUC - Porto Alegre - RS*, 2002.
- [17] K. N. Leung, A.X. Chen, and A.J. Antolak. Eletronic neutron sources for compensated porosity well logging. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, (684):52 – 56, 2012.
- [18] K.N. Liou. *An Introduction to Atmospheric Radiation*. Academic Press, Inc, London, 1980.
- [19] M. F. Modest. *Radiative Heat Transfer*. Mc Graw-Hill, New York, 1993.
- [20] S. W. Mosher, M. Maucec, J. Spanier, A. Badruzzaman, C. Chedester, and M. Evans. Expected- value techniques for monte carlo modeling of well

- logging problems. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, (613):334 – 341, 2010.
- [21] J.F. Prolo Filho. *Abordagens Espectronodais para Modelos Multidimensionais em Transporte de Partículas*. Doutorado em matemática aplicada, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2011.
- [22] I.V. Serov, T.M. John, and J.E. Hoogenboom. A new efective monte carlo midway coupling method in mcnp applied to a well logging problem. *Applied Radiation and Isotopes*, 49(12):1737 – 1744, 1998.
- [23] J. E. Thomas. *Fundamentos de Engenharia de Petróleo*. Interciência, 2001.
- [24] J.J. Ullo. Use of multidimensional transport methodology on nuclear logging problems. *Nuclear Science and Engineering*, (228):92 – 98, 1986.