



Universidade do Estado do Rio de Janeiro

Centro de Tecnologia e Ciências

Instituto Politécnico

Amaury Muñoz Oliva

**Método Espectral Determinístico para a solução de problemas
de transporte de nêutrons usando a formulação das ordenadas
discretas**

Nova Friburgo

2018

Amaury Muñoz Oliva

**Método Espectral Determinístico para a solução de problemas de transporte
de nêutrons usando a formulação das ordenadas discretas**

Tese apresentada, como requisito parcial
para obtenção do título de Doutor, ao Pro-
grama de Pós-Graduação em Modelagem
Computacional, do Instituto Politécnico, da
Universidade do Estado do Rio de Janeiro.
Linha de pesquisa: Meios porosos, termoflui-
dodinâmica e transporte de partículas.



Orientador: Prof. Dr. Hermes Alves Filho
Orientador: Prof. Dr. Carlos Rafael García Hernández

Nova Friburgo
2018

CATALOGAÇÃO NA FONTE
UERJ / REDE SIRIUS / BIBLIOTECA CTC/E

M967 Muñoz Oliva, Amaury.

Método espectral determinístico para a solução de problemas de transporte de nêutrons usando a formulação das ordenadas discretas / Amaury Muñoz Oliva. - 2018.

74 f. : il.

Orientadores: Hermes Alves Filho e Carlos Rafael García Hernández.

Tese (Doutorado) – Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico.

1. Teoria do transporte de nêutron - Modelos matemáticos – Teses. 2. Teoria cinética do transporte - Método das ordenadas discretas – Teses. I. Alves Filho, Hermes. II. García Hernández, Carlos Rafael. III. Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Instituto Politécnico. IV. Título.

CDU 621.039.512:519.6

Bibliotecária: Sandra Mueller CRB7/3633

Autorizo, apenas para fins acadêmicos e científicos, a reprodução total ou parcial desta dissertação.

Assinatura

Data

Amaury Muñoz Oliva

**Método Espectral Determinístico para a solução de problemas de transporte
de nêutrons usando a formulação das ordenadas discretas**

Tese apresentada, como requisito parcial para obtenção do título de Doutor, ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, do Instituto Politécnico, da Universidade do Estado do Rio de Janeiro. Linha de pesquisa: Meios porosos, termofluidodinâmica e transporte de partículas.

Aprovada em 27 de Fevereiro de 2018.

Banca Examinadora:

Prof. Dr. Hermes Alves Filho (Orientador)
Instituto Politécnico–UERJ

Prof. Dr. Ricardo Carvalho de Barros
Instituto Politécnico–UERJ

Prof. Dr. Fernando Carvalho da Silva
Universidade Federal do Rio de Janeiro

Prof. Dr. Alexandre Santos Francisco
Universidade Federal Fluminense

Prof. Dr. Gustavo Mendes Platt
Instituto Politécnico–UERJ

Nova Friburgo
2018

DEDICATÓRIA

Dedico esta tese à memória da minha avó Rosário Contreras Hernández.
A minha mãe Bárbara, ao meu irmão Saulius e à minha esposa Ivânia.
A minha família toda.
Aos professores da vida toda.

AGRADECIMENTOS

Ao Professor Hermes Alves Filho pela oportunidade que me brindou, pelo seu valioso exemplo, por todos os conhecimentos, conselhos compartilhados e por ter acreditado em mim. Obrigado por ser mais que um orientador!

Para meu amigo e orientador, o Professor Carlos García Hernández do InSTEC por ter confiado sempre em mim e ser o responsável por eu ter chegado até o IPRJ.

Aos professores do IPRJ em especial para, Ricardo Carvalho de Barros, Gustavo Platt, Joaquim, Silva Neto, pelos conhecimentos compartilhados nas disciplinas e durante estes quatro anos.

Aos professores Fernando Carvalho e Ricardo Carvalho de Barros, cujos comentários e sugestões ajudaram a melhorar este trabalho.

Aos professores Alexandre Santos Francisco, Gustavo Mendes Platt e Roberto Pinheiro Domingo por aceitarem fazer parte da banca de defesa de esta Tese.

Especial agradecimento à meu amigo, amigo de muitos anos Jesús Pérez Curbelo e a sua esposa Yineth, cuja ajuda foi mais que indispensável na realização desta tese.

A Joel e Yeni pelo recebimento, acolhida e apoio. À “colonia” de Cuba em Friburgo, que facilitou a estância e ajudou a acalmar a saudade.

Aos colegas do grupo de pesquisa de Neutrônica Computacional, Davi, Rafael, Odair, Leonardo e Fernando.

Ao pessoal da Secretaria, Dalva, Lia, Márcia, Mônica e Roberto. A Cleide, na Biblioteca. Aos técnicos do LABTRAN, Paulo e Guaraldi, sempre prestes a ajudar.

A família da minha esposa Ivânia, em especial para as “minhas filhas” Fran e Thaci e a minha “sobrinha” María Luiza pela acolhida.

A Laura García Fajardo pela sua ajuda incondicional com os meus trabalhos em inglês.

A Sandra e família toda. Aos amigos brasileiros, Gustavo, Sérgio, Yuri e o Boliviano.

A minha família pelo apoio, pela força, pela educação e por marcar o caminho.

A CAPES pela bolsa concedida.

A todos aqueles que não gostaria que ficassem com ciúmes, porque não estão nesta folha, para todos os que em algum momento, me ajudaram ou me vetaram, gostaria de dizer que agradeço por tudo o que fizeram ou não fizeram por mim, porque me ajudaram a avançar e aprender de e com as coisas da vida.

OBRIGADÍSIMO, MUITO OBRIGADO!!!

Everything should be made as simple as possible, but not simpler.

Albert Einstein.

RESUMO

MUÑOZ OLIVA, Amaury. *Método Espectral Determinístico para a solução de problemas de transporte de nêutrons usando a formulação das ordenadas discretas.* 2018. 74 f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2018.

Nesta tese é apresentada uma nova abordagem nodal numérica visando o desenvolvimento de um método da classe dos espectro-nodais na formulação determinística de ordenadas discretas (S_N), para o cálculo de transporte de nêutrons em meios não-multiplicativos considerando problemas de fonte-fixa. Para problemas em geometria unidimensional é aplicada esta metodologia na formulação multigrupo de energia com grau arbitrário de anisotropia L ($L \leq N - 1$), incluindo condições de contorno prescritas. Em problemas unidimensionais o denominado *Método Espectral Determinístico (MED)*, gera soluções numéricas livres de erros de truncamento espacial independentemente da grade de discretização. Para problemas de transporte de nêutrons em geometria cartesiana bidimensional, é desenvolvida a aplicação do método *MED* para numericamente resolver as equações S_N com espalhamento linearmente anisotrópico ($L = 1$), integradas transversalmente no interior de cada nodo retangular da grade de discretização espacial, com aproximações constantes para os termos correspondentes às fugas transversais. Este método numérico nodal de malha grossa em geometria bidimensional e considerando o problema monoenergético é denominado *MED-CN*. Os resultados numéricos apresentados para as simulações, comparados com o tradicional método de malha fina *Diamond Difference (DD)*, o método espectro nodal *spectral Green's function (SGF)* e o método *Matriz Resposta (MR)*, neste caso, só para os problemas unidimensionais, comprovam a precisão e estabilidade dos métodos *MED* e *MED-CN*.

Palavras-chave: Teoria de transporte de nêutrons. Ordenadas discretas. Métodos espectro-nodais. Modelagem computacional determinística.

ABSTRACT

MUÑOZ OLIVA, Amaury. *Spectral Deterministic Method for the solution of the neutron problems using discrete ordinates formulation.* 2018. 74 f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2018.

In this thesis dissertation a new numerical approach is presented aiming the development of a method of spectral-nodal class in the deterministic formulation of discrete ordinates(S_N), for neutron transport calculations in non-multiplying media with fixed-source. For one-dimensional geometry problems, this methodology is developed for the multigroup energy approximation with arbitrary order of scattering anisotropy L ($L \leq N - 1$) and prescribed boundary conditions. The *Spectral Deterministic Method (SDM)*, generates numerical solutions that are completely free from spatial truncation errors. For neutron transport problems in X, Y -geometry, the *SDM* method is applied to numerically solve the linearly anisotropic ($L = 1$) transverse-integrated S_N nodal equations with constant approximation for the terms corresponding to the transverse leakages terms. This coarse-mesh numerical method in X, Y -geometry considering monoenergetic problems, is referred to as the *SDM-CN* method. The simulations results, presented in this work are compared with the traditional fine mesh method *Diamond Difference (DD)*, the *spectral Green's function method (SGF)*, and the *Response Matrix (RM)* method, in this case, only for one-dimensional, proven the accuracy and stability of the methods *MED* and *MED-CN*.

Keywords: Neutron transport theory. Discrete ordinates. Spectral nodal methods.

Deterministic computational modelling.

LISTA DE FIGURAS

Figura	1 - Divisão da faixa de energia em G grupos	20
Figura	2 - Definição do vetor unitário que representa a direção de propagação do nêutron	22
Figura	3 - Domínio espacial de transporte de partículas V com superfície de contorno Γ	23
Figura	4 - Representação das ordenadas discretas para $N = 8$ (S_8)	29
Figura	5 - Discretização do domínio unidimensional B de comprimento H em J nodos Γ	30
Figura	6 - Discretização do domínio bidimensional D em $I \times J$ nodos Γ_{ij} de comprimento h_{x_i} e altura h_{y_j}	31
Figura	7 - Domínio homogêneo com espessura H	40
Figura	8 - Fluxos angulares emergentes no domínio homogêneo com espessura H .	41
Figura	9 - Domínio heterogêneo com comprimento H	42
Figura	10 - Fluxos incidentes no nodo Γ_1	43
Figura	11 - Fluxos incidentes e emergentes no nodo Γ_1	43
Figura	12 - Fluxos incidentes e emergentes no nodo Γ_2	44
Figura	13 - Fluxos incidentes e emergentes no domínio heterogêneo com comprimento H	44
Figura	14 - Grade espacial bidimensional heterogênea	48
Figura	15 - Fluxos angulares incidentes e emergentes do nodo Γ_{ij}^1	48
Figura	16 - Fluxos angulares incidentes e emergentes do nodo Γ_{ij}^2	49
Figura	17 - Fluxos angulares incidentes e emergentes do ultimo nodo Γ_{ij} na primeira fila	49
Figura	18 - Fluxos angulares incidentes e emergentes do nodo Γ_{ij}^1 na nova fila . .	49
Figura	19 - Fluxos angulares incidentes e emergentes nos nodos Γ_{ij} na nova fila . .	50
Figura	20 - Problema Modelo N° 1 (BARROS; LARSEN, 1991)	51
Figura	21 - Problema Modelo N° 2 (SILVA et al., 2013)	54
Figura	22 - Problema Modelo N° 3 (BARROS; LARSEN, 1990)	57
Figura	23 - Problema Modelo N° 1 (DOMÍNGUEZ, 2006)	63
Figura	24 - Configuração do Problema Modelo N° 2 (BARROS; LARSEN, 1992) .	65
Figura	25 - Configuração do Problema Modelo N° 3 (OTTO, 1983)	67

LISTA DE TABELAS

Tabela 1 - Quadratura Angular de Gauss-Legendre para domínios unidimensionais	26
Tabela 2 - Quadratura de simetria de nível (LQ_n)	28
Tabela 3 - Fluxos escalares ¹ variando a ordem de quadratura de Gauss-Legendre no experimento N° 1	52
Tabela 4 - Fluxos escalares ¹ variando o tamanho da malha no experimento N° 1 . .	53
Tabela 5 - Seção macroscópica de espalhamento do grupo $g' \rightarrow g$	54
Tabela 6 - Fluxos escalares ¹ variando a ordem de quadratura de Gauss-Legendre no experimento N° 2	55
Tabela 7 - Fluxos escalares ¹ variando o tamanho da malha no experimento N° 2 . .	56
Tabela 8 - Fluxo escalar para o problema–modelo N° 3, utilizando a quadratura angular S_2	58
Tabela 9 - Fluxo escalar para o problema–modelo N° 3, utilizando a quadratura angular S_4	58
Tabela 10 - Fluxo escalar para o problema–modelo N° 3, utilizando a quadratura angular S_8	59
Tabela 11 - Albedos A^* e Factores de Transmissão B^* para os grupos de energia ^a . .	61
Tabela 12 - Desvio relativo percentual	62
Tabela 13 - Resultados numéricos gerados pelos métodos no primeiro caso analisado	64
Tabela 14 - Resultados numéricos gerados pelos métodos no segundo caso analisado	64
Tabela 15 - Parâmetros físico-materiais do Problema–Modelo 2	66
Tabela 16 - Fugas dos nêutrons ^a pelos contornos da configuração representada na Fig. 24	66
Tabela 17 - Componentes das seções de choque macroscópicas (cm^{-1}) e densidade da fonte($neutrons/cm^3$) para o Problema–Modelo N° 3 em geometria bidimensional	68
Tabela 18 - Fuga dos nêutrons ^a pelo contorno direito	68

LISTA DE ABREVIATURAS E SIGLAS

<i>DD</i>	<i>Diamond Difference</i>
<i>LQ_N</i>	Quadratura de simetria de nível (<i>Level Symmetric Quadrature</i>)
<i>MC</i>	Monte Carlo
<i>MED</i>	<i>Método Espectral Determinístico</i>
<i>MED – CN</i>	<i>Método Espectral Determinístico–constant nodal</i>
<i>MR</i>	<i>Matriz Resposta</i>
<i>NBI</i>	<i>One-node block inversion</i>
<i>SGF</i>	<i>Spectral Green's function</i>
<i>SGF – CN</i>	<i>Spectral Green's function–constant nodal</i>
<i>SI</i>	<i>Source Iteration</i>
<i>S_N</i>	Ordenadas discretas

LISTA DE SÍMBOLOS

$a_{mg}(\nu_k)$	autovetores associados aos autovalores ν_k^{-1}
A^*	Albedos
B^*	Fator de transmissão
G	número de grupos de energia
H_x	comprimento na direção de x dos domínios unidimensional e bidimensional
H_y	comprimento na direção de y do domínio bidimensional
L	grau de anisotropia no espalhamento
M	número total de direções discretas na quadratura LQ_N
N	ordem da quadratura angular
\hat{n}	vetor unitário normal no ponto \vec{r}_0 do contorno Γ do domínio V e apontando para o exterior
P_ℓ	polinômio de Legendre de grau ℓ
Q	fente de partículas neutras
α_k	constantes arbitrárias da solução geral local
$\Gamma_{j,i}$	nodo de comprimento h_{x_j} do domínio unidimensional $B = \{(x, y) \in \mathbb{R} 0 \leq x \leq H\}$
$\Gamma_{i,j}$	nodo retangular de comprimento h_{x_i} e altura h_{y_j} do domínio retangular $D = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2 0 \leq x \leq L; 0 \leq y \leq H\}$
$\delta_{a,b}$	<i>delta de Kronecker</i>
μ_m	direção discreta na quadratura angular em geometria unidimensional
(μ_m, η_m)	direção discreta na quadratura angular em geometria bidimensional
ν_k^{-1}	autovalores locais no cálculo da componente homogênea
σ_T	seção de choque macroscópica total
σ_S	seção de choque macroscópica diferencial de espalhamento
$\sigma_{S_{g' \rightarrow g}}^{(\ell)}$	ℓ -ésima componente da seção de choque macroscópica de espalhamento diferencial do grupo de energia g para o grupo de energia g'
ψ	fluxo angular de nêutrons
ϕ	fluxo escalar
ω_m	peso da quadratura angular para a direção m
$\hat{\Omega}$	vetor unitário na direção da velocidade dos nêutrons

SUMÁRIO

	INTRODUÇÃO	14
1	MODELO MATEMÁTICO PARA O TRANSPORTE DE PAR-	
	TÍCULAS NEUTRAS.	18
1.1	Discretização energética com a aproximação multigrupo	20
1.2	Condições de contorno e de continuidade	22
1.2.1	Condições de contorno prescritas	23
1.2.2	Condições de contorno albedo e reflexiva	23
1.2.3	Condição de Continuidade	24
1.3	Modelagem matemática dos problemas de transporte unidimen-	
	sionais	24
1.3.1	Método de ordenadas discretas (S_N) em geometria unidimensional	25
1.4	Modelagem matemática dos problemas de transporte em geome-	
	tria bidimensional cartesiana na formulação multigrupo de energia	26
1.4.1	Método de ordendas discretas (S_N) em geometria bidimensional cartesiana	27
1.5	Discretização das variáveis espaciais	30
1.5.1	Variável espacial em geometria unidimensional	30
1.5.2	Discretização das variáveis espaciais x e y, problema S_N em geometria	
	bidimensional	30
2	ANÁLISE ESPECTRAL DAS EQUAÇÕES S_N PARA PRO-	
	BLEMAS DE FONTE FIXA.	32
2.1	Equações S_N em geometria unidimensional	32
2.2	Equações S_N bidimensionais na formulação multigrupo de energia	
	integradas transversalmente com aproximação constante para os	
	termos de fugas transversais	34
3	DESENVOLVIMENTO DO MÉTODO ESPECTRAL DETERMÍNISTICO	
	(MED) EM GEOMETRIA UNIDIMENSIONAL NA FORMULAÇÃO	
	S_N E MULTIGRUPO DE ENERGIA.	39
3.1	O método MED para problemas de transporte S_N considerando	
	um domínio homogêneo	40
3.2	O método MED para problemas de transporte S_N considerando	
	domínios heterogêneos	42
3.2.1	Esquema iterativo para o método MED	42
4	MÉTODO ESPECTRAL DETERMÍNISTICO (MED) EM GE-	
	OMETRIA BIDIMENSIONAL CARTESIANA NA FORMULAÇÃO	
	S_N E MULTIGRUPO DE ENERGIA.	45

4.1	O método <i>MED</i> para problemas de transporte S_N em geometria bidimensional cartesiana considerando espalhamento linearmente anisotrópico	45
4.1.1	<u>Solução numérica do problema discretizado</u>	47
5	RESULTADOS NUMÉRICOS	51
5.1	Resultados numéricos para problemas unidimensionais.	51
5.1.1	<u>Problema–Modelo N° 1 (BARROS; LARSEN, 1991)</u>	51
5.1.2	<u>Problema–Modelo N° 2 (SILVA et al., 2013)</u>	53
5.1.3	<u>Problema–Modelo N° 3 (BARROS; LARSEN, 1990)</u>	57
5.1.4	<u>Problema–Modelo N° 4 (GARCIA; SIEWERT, 1983)</u>	59
5.2	Resultados numéricos para problemas bidimensionais.	62
5.2.1	<u>Problema absorvedor puro 1 nodo, em geometria bidimensional</u>	62
5.2.2	<u>Problema–Modelo N° 2 em geometria bidimensional</u>	65
5.2.3	<u>Problema–Modelo N° 3 em geometria bidimensional</u>	67
	CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS	69
	REFERÊNCIAS	72

INTRODUÇÃO

A produção de energia elétrica no mundo, desde o final do século XIX, tem sido majoritariamente baseada no uso de combustíveis fósseis (carvão e petróleo). O crescimento acelerado da população mundial e a necessidade de desenvolvimento econômico e tecnológico dos países têm estimulado o rápido aumento na produção e consumo de energia elétrica. O aumento do consumo global de combustíveis fósseis nos últimos 100 anos, especialmente nos países emergentes, tem ocasionando um rápido crescimento das necessidades energéticas nestas regiões.(BARTELS, 2013). Este crescimento tem causado um aumento na queima dos combustíveis fósseis; aumentando a emissão dos gases de efeito estufa que estão causando o aquecimento global e afetando a camada de ozônio (FIGUEIRA, 2015)(SEMARNAT, 2009).

Devido a estes problemas energéticos e ambientais e as mudanças climáticas, surgiu a necessidade de pesquisas e investimentos em fontes de energia “limpas” e economicamente rentáveis, como uma das formas de resolver o problema do aquecimento climático no planeta e rever a matriz energética usada até agora. As energias renováveis (eólica, solar, biomassa, maremotriz, etc.) são apresentadas como a solução do problema energético futuro, mas atualmente esses tipos de fontes de energia não estão preparadas para assumir uma grande percentagem do consumo energético global, provocado essencialmente por problemas de disponibilidade e custos relativamente elevados.

A energia nuclear se apresenta como uma alternativa viável para ajudar na redução da emissão dos gases de efeito estufa. As centrais nucleares não emitem CO₂, não poluem o ar com material particulado, gases de enxofre, nitrogênio, etc., e possuem uma grande capacidade de produzir energia elétrica de forma eficiente. Em termos ambientais, de sustentabilidade e de segurança energética, devido à eficiência e o custo do combustível, é previsto que a energia nuclear seja uma parte importante no futuro energético global.

Atualmente estão em operação 448 usinas nucleares no mundo (Power Reactor Information System(PRIS)/IAEA, 2017), sendo que este número de reatores nucleares em operação tem sido mantido quase constante desde começos dos anos 90. As usinas mais velhas no momento da desativação tem sido substituídas por usinas mais modernas e com maior capacidade de geração elétrica, permitindo que a capacidade total instalada continue em aumento, mesmo que o número total de reatores nucleares em operação tenha sido mantido quase constante todos estes anos.

Neste contexto, a engenharia e a física de reatores nucleares tem sido um tema de muito interesse, tendo como objetivo continuar desenvolvendo reatores nucleares mais eficientes e seguros. Portanto, a neutrônica computacional vem contribuir de forma vital para novos projetos, desenvolvendo códigos e modelos de cálculo que permitam simular e descrever o comportamento neutrônico e termo-hidráulico dos reatores nucleares de

agora e do futuro. Também possui aplicações na proteção radiológica, medicina nuclear, etc., possibilitando uma importante economia monetária e garantindo a segurança das instalações através da utilização de simuladores.

A descrição da migração dos nêutrons no interior de um meio material, considerando a probabilidade de interação com os núcleos dos átomos deste meio, constitui a modelagem física do fenômeno de transporte de nêutrons (DUDERSTADT; MARTIN, 1979). Uma vez feita esta modelagem física, o próximo passo é arquitetar uma modelagem matemática deste problema físico, de modo que seja possível simular e analisar a distribuição e comportamento dos nêutrons no domínio de interesse (DUDERSTADT; MARTIN, 1979) (LEWIS; MILLER, 1993). Na neutrônica computacional tem sido desenvolvidos diferentes modelos e sistemas de códigos baseados em métodos estocásticos (Monte Carlo) (HAMMERSLEY; HANDSCOMB, 1964) ou determinísticos (difusão e transporte) (LAURENCE, 1986) (BADRUZZAMAN, 1990), para tratar os problemas de transporte de nêutrons e radiação.

Os métodos de Monte Carlo modelam o problema de transporte estatisticamente, simulando uma grande quantidade de histórias de partículas individuais, e contabilizando algum aspecto do seu comportamento, o que é inferido partindo do comportamento médio das partículas simuladas e o resultado final é deduzido do valor médio dessas observações. Estas técnicas podem ser aplicadas no transporte de partículas, devido a que as seções de choque macroscópicas podem ser interpretadas como uma probabilidade de interação por unidade de distância percorrida pela partícula desde que foi emitida, esta partícula é acompanhada ao longo de sua vida desde o surgimento até a morte (absorção, escape, etc.). Esta natureza estatística também se apresenta como uma desvantagem devido a que não apresenta uma solução exata do problema estudado, mas sim uma estimativa da solução com as incertezas associadas. Para conseguir reduzir as incertezas é preciso de um tempo de simulação grande o que resulta em alto custo computacional (BRIESMEISTER, 2000). A necessidade de definir a composição do meio e as condições termo-hidráulicas como parâmetros fixos do problema (BRIESMEISTER, 2000), faz que as técnicas de Monte Carlo sejam mais difíceis de se utilizar nas simulações de cenários operacionais onde os efeitos da realimentação não linear são importantes, ao contrário dos problemas de transporte e de difusão.

Nos métodos determinísticos, as variáveis espaço, direção, energia e tempo, são discretizadas. As aproximações realizadas facilitam a modelagem matemática, onde é resolvida a equação de transporte de nêutrons, frequentemente denominada equação linearizada de Boltzmann (LEWIS; MILLER, 1993) (DUDERSTADT; MARTIN, 1979). A equação de transporte de nêutrons representa um balanço entre produção e perda destas partículas, sendo que, em sua generalidade, ela é uma equação integro-diferencial parcial com sete variáveis independentes: três espaciais, duas angulares, uma energética e uma temporal.

Devido à complexidade do tratamento analítico da equação linearizada de transporte de nêutrons, métodos numéricos são desenvolvidos no intuito de se obter soluções aproximadas para os problema de blindagem de nêutrons e cálculos globais de reatores nucleares. Esses métodos numéricos permitem fazer a modelagem computacional usando uma abordagem determinística (LEWIS; MILLER, 1993).

Nesta tese é apresentada uma nova metodologia nodal numérica que serve de base para um novo método da classe dos espectronodais (BARROS, 1990) que será testada em problemas estacionários na formulação de ordenadas discretas (S_N) (LEWIS; MILLER, 1993), este método é chamado de Método Espectral Determinístico (*MED*) (OLIVA et al., 2017) (OLIVA et al., 2018). Os resultados obtidos com o método *MED* são comparados com o tradicional método de malha fina DD, cf., Diamond Difference (LEWIS; MILLER, 1993), o método de malha grossa SGF, cf., spectral Green's function (BARROS, 1990) e o método MR, cf., Matriz Resposta (GUIDA, 2011) só para casos unidimensionais.

Como modelos determinísticos, os métodos nodais constituem uma classe de métodos numéricos desenvolvidos para gerarem soluções numéricas precisas para a equação de transporte de Boltzmann para partículas neutras.

Os métodos espetronodais, são algébrica e computacionalmente mais trabalhosos que os métodos numéricos determinísticos tradicionais de malha fina, e.g., o método DD, porém, apresentam precisão maior nas soluções numéricas para grades espaciais mais grossas. Por esta razão estes métodos numéricos, e seus possíveis algoritmos de solução utilizando esquemas diretos ou iterativos (SIEWERT, 1978) (BARROS, 1990) (MOHAMAD, 1996) (BARICELLO; SIEWERT, 1999) (GUIDA, 2011), têm sido motivo de diversos estudos.

Nesta tese se faz um estudo inicial das soluções (análise espectral) das equações de transporte de nêutrons na formulação S_N , em geometria cartesiana unidimensional e bidimensional. Essa análise espectral dá subsídios para a arquitetura das equações dos métodos espetronodais, usadas na discretização das variáveis espaciais das equações. Esta análise espectral das equações de transporte de partículas neutras é realizada em analogia ao estudo feito pela referência CASE e ZWEIFEL (1967). Esses resultados são obtidos a través de um aplicativo computacional em linguagem C++ construído para esse fim.

O modelo matemático usado para o problema de transporte de partículas neutras é apresentado no Capítulo 1. São apresentados também neste capítulo, os métodos clássicos de discretização das variáveis independentes da equação linearizada de transporte de Boltzmann para problemas estacionários em meios não multiplicativos.

No Capítulo 2 são desenvolvidas análises espetrais das equações de transporte multigrupo na formulação S_N para a geometria unidimensional e bidimensional. Nos capítulos 3 e 4 são descritas as equações constitutivas do método *MED* junto aos processos de varreduras para o caso de geometrias cartesianas unidimensionais e bidimensio-

onais, respectivamente. Resultados numéricos para problemas-modelo são apresentados no Capítulo 5.

Finalmente, no último capítulo, são apresentadas as conclusões desta tese e sugestões para trabalhos futuros.

1 MODELO MATEMÁTICO PARA O TRANSPORTE DE PARTÍCULAS NEUTRAS.

As raízes da teoria do transporte de partículas se remontam há mais de um século à equação de Boltzmann, formulada inicialmente para o estudo da teoria cinética dos gases (DUDERSTADT; MARTIN, 1979) (LEWIS; MILLER, 1993), e até hoje a equação de Boltzmann continua sendo o principal instrumento da dinâmica dos gases. Sua contraparte para o “gás” nêutron (DUDERSTADT; MARTIN, 1979), a chamada equação de transporte de partículas neutras, sejam nêutrons ou fôtons, possui 80 anos. Esta equação de transporte é uma equação integro-diferencial parcial de primeira ordem, usada para descrever a população de nêutrons ou fôtons num domínio fechado, sob condições de um estado estável (i.e., estacionário) (CACUCI, 2010). A solução desta equação de transporte é muito importante em vários campos da engenharia nuclear, como a física de reatores, a criticidade e segurança e a proteção contra radiações ionizantes. Neste trabalho de tese são abordados apenas problemas desenvolvidos em meios não multiplicativos e independentes do tempo, portanto a equação de transporte de nêutrons em regime estacionário, aparece na forma

$$\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) + \sigma_T(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) = \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} \sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) \psi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}') d\hat{\Omega}' + Q(\vec{r}, E), \quad (1)$$

onde são definidos:

- a) $\psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$: fluxo angular de nêutrons, que representa o número de nêutrons com energia E em dE , migrando na direção $\hat{\Omega}$ em $d\hat{\Omega}$, que passam pela posição \vec{r} em $d\vec{r}$;
- b) $\hat{\Omega}$: vetor unitário na direção da velocidade dos nêutrons;
- c) $\sigma_T(\vec{r}, E)$: seção de choque macroscópica total no ponto \vec{r} para nêutron com a energia E ;
- d) $\sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega})$: seção de choque macroscópica diferencial de espalhamento de nêutrons na posição \vec{r} , que migram com energia E' e na direção $\hat{\Omega}'$ e após a colisão com os núcleos dos átomos constituintes do meio, passem a migrar com energia E em dE e na direção $\hat{\Omega}$ em $d\hat{\Omega}$;

- e) $Q(\vec{r}, E)$: representa uma fonte isotrópica na posição \vec{r} emitindo partículas neutras com energia E .

Para a construção da Equação (1), foram assumidas como verdadeiras várias hipóteses físicas para o tratamento das partículas produzidas pelo espalhamento e a modelagem matemática do problema físico de transporte de nêutrons (LEWIS; MILLER, 1993). Elas são as seguintes:

1. *As partículas podem ser consideradas como pontuais.* Somente são consideradas partículas nas quais o comprimento de onda é pequeno em comparação com o diâmetro atômico. As partículas, entre as colisões, viajam em média muitas distâncias interatômicas, fazendo com que para esses comprimentos de onda tão pequenos, à partícula possa ser adequadamente associada a um ponto de localização e velocidade.

2. *As partículas viajam em uma linha reta entre os pontos de colisão.* Com exceção dos campos nucleares, normalmente os campos de forças que agem sobre os nêutrons são nulos. As forças gravitacionais são muito fracas para influenciarem o movimento dos nêutrons. As forças elétricas e magnéticas não tem influência no movimento dos nêutrons e raios Gamma, pois estes não possuem carga elétrica. Os campos nucleares são fenomenologicamente incorporados nos termos de espalhamento e absorção. Portanto, pode-se concluir que as partículas viajam em linha reta e velocidade constante entre colisões.

3. *As interações partícula-partícula podem ser desconsideradas.* As densidades de partículas em reatores nucleares, blindagens e outras aplicações é muito pequena quando comparada com a densidade dos núcleos alvos, o que permite desprezar as interações nêutron - nêutron. Consequentemente somente os encontros binários nêutron - núcleo são considerados.

4. *O tempo de colisão é considerado instantâneo.* Depois da colisão, para todos os efeitos práticos, as partículas resultantes são emitidas instantaneamente. Existe a exceção dos nêutrons atrasados que emergem dos fragmentos de fissão. A incorporação dos nêutrons atrasados nos cálculos de transporte de partículas, não será abordada nesta tese.

5. *O espaço deve ser isotrópico.* Efeitos que dependam da orientação dos nêutrons (ou fôtons) não são incorporados na equação linearizada de Boltzmann.

6. *As propriedades dos núcleos e a composição dos materiais considerados são assumidos como conhecidos e independentes do tempo, a menos que seja explicitamente especificado de outra forma.*

1.1 Discretização energética com a aproximação multigrupo

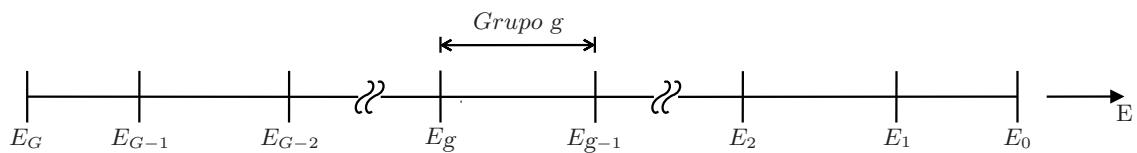
A resolução analítica da equação linearizada de transporte de nêutrons é complexa, e ainda não se conhece uma técnica analítica para resolver os casos mais gerais. Métodos numéricos tem sido desenvolvidos no intuito de se obterem soluções aproximadas para os problemas de fonte fixa multidimensionais (BARROS, 1990).

Para resolver numericamente a Equação (1) e achar o fluxo angular $\psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$, deve-se especificar o sistema de coordenadas a ser utilizado, o valor das seções de choque macroscópicas σ_T e σ_s , a distribuição das fontes isotrópicas $Q(\vec{r}, E)$, que surgem a partir da presença de radionuclídeos no meio, e as condições de contorno que indicam o fluxo incidente nos limites estruturais do domínio, com as quais se quer solucionar o problema (BARROS, 1990).

Para a maioria dos problemas práticos na física de reatores, o modelo monoennergético não é adequado. A grande limitação deste modelo está em considerar que todos os nêutrons possuem a mesma energia (DUDERSTADT; MARTIN, 1979). Portanto, para que os cálculos sejam mais precisos, a variável energia deve ser tratada de modo mais realista.

Uma abordagem clássica para o tratamento da variável energia consiste em discretizar o domínio energético dos nêutrons em intervalos ou grupos de energia, ao invés de considerar a variável energia como uma variável contínua (DUDERSTADT; HAMILTON, 1976). Este procedimento é conhecido como apoximação multigrupos ou método multigrupo de energia. A Figura 1 ilustra o esquema de discretização, onde são divididas as faixas de energia em G intervalos contíguos. A ordenação crescente dos grupos indica que, a medida que o número do grupo aumenta a energia diminui (LEWIS; MILLER, 1993).

Figura 1 - Divisão da faixa de energia em G grupos



Fonte: DUDERSTADT; HAMILTON, 1976.

As partículas no grupo g são tomadas como sendo apenas aquelas com energias entre E_g e E_{g-1} , onde $\Delta E_g = E_{g-1} - E_g$.

A Equação (1) então é integrada no g -ésimo grupo (BARROS, 1990) e assume a

forma

$$\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi_g(\vec{r}, \hat{\Omega}) + \sigma_{T_g}(\vec{r}) \psi_g(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \sum_{g'=1}^G \int_{4\pi} \sigma_{s_{g' \rightarrow g}}(\vec{r}, \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}') \psi_{g'}(\vec{r}, \hat{\Omega}') d\hat{\Omega}' + Q_g(\vec{r}), \quad (2)$$

onde são definidos o fluxo angular e a fonte no g -ésimo grupo na forma

$$\psi_g(\vec{r}, \hat{\Omega}) \equiv \int_{E_g}^{E_{g-1}} \psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) dE, \quad (3)$$

e

$$Q_g(\vec{r}) \equiv \int_{E_g}^{E_{g-1}} Q(\vec{r}, E) dE. \quad (4)$$

As seções de choque total e de espalhamento no g -ésimo grupo, são definidas como:

$$\sigma_{T_g}(\vec{r}, \hat{\Omega}) \equiv \frac{1}{\psi_g(\vec{r}, \hat{\Omega})} \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_{T_g}(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) dE \quad (5)$$

e

$$\sigma_{s_{g' \rightarrow g}}(\vec{r}, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) \equiv \frac{1}{\psi_{g'}(\vec{r}, \hat{\Omega}')} \int_{E_g}^{E_{g-1}} dE \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega} \rightarrow \hat{\Omega}') \psi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}') dE' \quad (6)$$

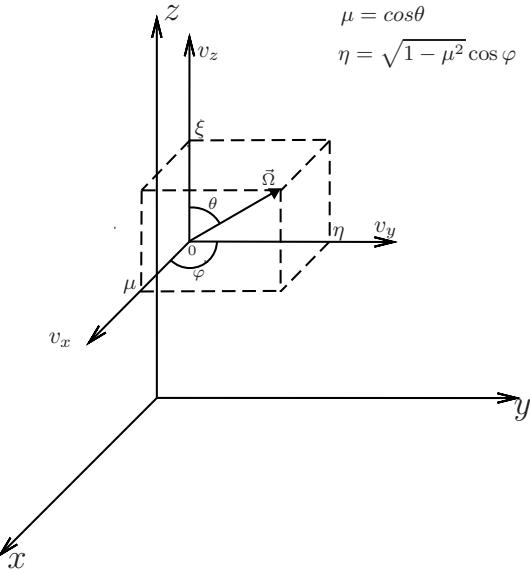
Como explicado anteriormente, para solucionar numericamente a Equação (1) deve ser escolhido o sistema de coordenadas onde vai ser analisado o problema. Para os casos analisados neste trabalho foi escolhido o sistema de coordenadas cartesianas, gerando o resultado

$$\begin{aligned} \hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} &= [(\sin \theta \cos \varphi) \vec{i} + (\sin \theta \sin \varphi) \vec{j} + (\cos \theta) \vec{k}] \cdot (\vec{i} \frac{\partial}{\partial x} + \vec{j} \frac{\partial}{\partial y} + \vec{k} \frac{\partial}{\partial z}), \\ 0 \leq \theta &\leq \pi, \quad 0 \leq \varphi \leq 2\pi, \end{aligned} \quad (7)$$

onde θ é o ângulo polar $[0, \pi]$ e φ é o ângulo azimutal $[0, 2\pi]$, como pode ser visto na Figura 2.

Assumindo que $\mu \equiv \cos \theta$, a Equação (2) assume a forma

Figura 2 - Definição do vetor unitário que representa a direção de propagação do nêutron



Fonte: Adaptado de CACUCI, 2010.

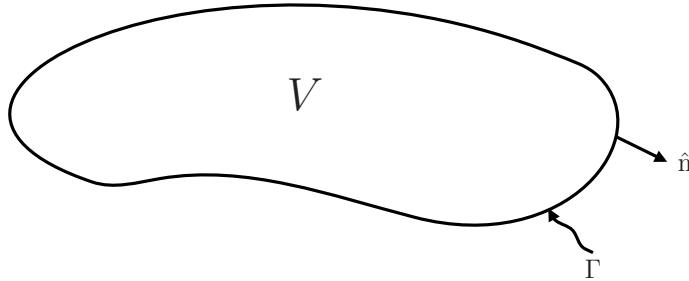
$$\sqrt{1 - \mu^2} \cos\varphi \frac{\partial}{\partial x} \psi_g(\vec{r}, \hat{\Omega}) + \sqrt{1 - \mu^2} \sin\varphi \frac{\partial}{\partial y} \psi_g(\vec{r}, \hat{\Omega}) + \mu \frac{\partial}{\partial z} \psi_g(\vec{r}, \hat{\Omega}) + \sigma_{T_g}(\vec{r}) \psi_g(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \sum_{g'=1}^G \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \sigma_{s_{g' \rightarrow g}}(\vec{r}, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) \psi_{g'}(\vec{r}, \hat{\Omega}') + Q_g(\vec{r}) \quad (8)$$

1.2 Condições de contorno e de continuidade

Para começar a explicar as condições de contorno que indicam o fluxo incidente nos limites estruturais do domínio, primeiro se deve supor um domínio espacial onde a equação de transporte vai ser resolvida. Este domínio espacial tem um volume V, que está coberto por uma superfície de contorno Γ , onde \hat{n} é o vetor unitário normal à superfície Γ (LEWIS; MILLER, 1993), como pode ser observado na Figura 3.

Para resolver a equação de transporte, a distribuição do fluxo angular de nêutrons entrando em V pelos contornos da superfície Γ devem ser especificados.

Figura 3 - Domínio espacial de transporte de partículas V
com superfície de contorno Γ



Fonte: LEWIS; MILLER, 1993.

1.2.1 Condições de contorno prescritas

Se \hat{n} é o vetor unitário normal à superfície do contorno Γ do domínio V , direcionado para fora de Γ , então $\psi_g(\vec{r}, \hat{\Omega})$ com $\hat{n} \cdot \hat{\Omega} < 0$ é necessário como condição de contorno (LEWIS; MILLER, 1993). Se o valor do fluxo de entrada na superfície de contorno igual a um valor $\Psi_g(\vec{r}, \hat{\Omega})$ conhecido, então

$$\psi_g(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \Psi_g(\vec{r}, \hat{\Omega}) \quad , \quad \hat{n} \cdot \hat{\Omega} < 0 \quad , \quad \vec{r} \in \Gamma. \quad (9)$$

Se nenhuma partícula incide no domínio V a partir do exterior, no caso onde $\Psi_g = 0$, então esta condição de contorno pode ser representada como

$$\psi_g(\vec{r}, \hat{\Omega}) = 0 \quad , \quad \hat{n} \cdot \hat{\Omega} < 0 \quad , \quad \vec{r} \in \Gamma \quad (10)$$

Esta condição de contorno é conhecida como condição do tipo vácuo, onde o fluxo de entrada na superfície de contorno é igual a zero. Esta condição pode ser considerada como uma idealização, já que considera que os nêutrons que abandonam o domínio V , terminam a sua contribuição para o problema estudado.

1.2.2 Condições de contorno albedo e reflexiva

Albedo é a fração da radiação incidente (como a luz) que é refletida por uma superfície ou corpo. Esta condição de contorno é utilizada para relacionar o fluxo de entrada com o fluxo de saída conhecido. O fluxo de entrada no contorno é definido por um albedo isotrópico conhecido, $\alpha(E)$, vezes o fluxo de saída no mesmo limite no sentido

correspondente ao de reflexão espectral (LEWIS; MILLER, 1993).

$$\psi_g(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \alpha(E)\psi_g(\vec{r}, \hat{\Omega}'), \quad \hat{n} \cdot \hat{\Omega} < 0, \quad \vec{r} \in \Gamma, \quad (11)$$

$$\hat{n} \cdot \hat{\Omega} = -\hat{n} \cdot \hat{\Omega}' \quad e \quad (\hat{\Omega} \times \hat{\Omega}') \cdot \hat{n} = 0,$$

onde $\hat{\Omega}$ representa o ângulo de reflexão, correspondente ao ângulo incidente $\hat{\Omega}'$. O caso onde $\alpha(E) = 1$, é conhecido como uma *condição de contorno reflexiva* uma vez que todas as partículas de saída são refletidas de volta.

1.2.3 Condição de Continuidade

Dentro do domínio V , o fluxo angular $\psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega})$ deve ser contínuo em todos as interfaces internas na direção $\hat{\Omega}$ da partícula em movimento (CACUCI, 2010). Descontinuidades ao longo de $\hat{\Omega}$ podem acontecer se a densidade de fonte $Q(\vec{r}, E)$ contém uma função Delta de Dirac devido a uma fonte localizada (LEWIS; MILLER, 1993).

1.3 Modelagem matemática dos problemas de transporte unidimensionais

A Equação (8), para o caso unidimensional pode ser escrita na forma

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \psi_g(x, \mu) + \sigma_{T_g}(x) \psi_g(x, \mu) = \sum_{g'=1}^G \int_{-1}^1 d\mu' \sigma_{s_{g' \rightarrow g}}(x, \mu' \rightarrow \mu) \psi_g(x, \mu') + Q_g(x). \quad (12)$$

A seção de choque de espalhamento pode ser expandida em polinômios de Legendre na variável angular. Logo, a Equação (12), assume a forma

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \psi_g(x, \mu) + \sigma_{T_g}(x) \psi_g(x, \mu) = \sum_{g'=1}^G \sum_{\ell=0}^{\infty} (2\ell + 1) \sigma_{s_{g' \rightarrow g}}^{(\ell)}(x) P_\ell(\mu) \phi_g^{(\ell)}(x) + Q_g(x), \quad (13)$$

onde

$$\phi_g^{(\ell)}(x) \equiv \int_{-1}^1 \frac{d\mu}{2} P_\ell(\mu) \psi_g(x, \mu) \quad (14)$$

representa o momento angular de ordem ℓ do fluxo angular de nêutrons no g -ésimo grupo de energia.

A componente do vetor unitário da direção de propagação da partícula é repre-

sentada por μ e $\psi_g(x, \mu)$ descreve o fluxo angular dos nêutrons no grupo de energia g que migram na direção μ em x . $\sigma_{T_g}(x)$ é definida como a seção de choque macroscópica total do grupo de energia g ; que inclui todas as possíveis interações das partículas; e $\sigma_{s_{g'} \rightarrow g}^{(\ell)}(x)$ constitui a ℓ -ésima componente da seção de choque macroscópica de espalhamento diferencial do grupo de energia g' para o grupo g em x . O número de grupos de energia é representado por G , $P_\ell(\mu)$ simboliza o polinômio de Legendre de grau ℓ e $Q_g(x)$ corresponde à fonte de nêutrons do grupo de energia g .

1.3.1 Método de ordenadas discretas (S_N) em geometria unidimensional

O método de ordenadas discretas ou formulação S_N , foi desenvolvido por Chandrasekhar (1960) e Carlson e Lathrop (1968). Desde então, tem sido amplamente usado na resolução numérica da equação de transporte de partículas neutras. A aproximação por ordenadas discretas para o caso unidimensional consiste basicamente em seleccionar um conjunto finito de direções $\{\mu_m\}$, $m = 1, 2, \dots, N$ e o correspondente conjunto de pesos $\{\omega_m\}$, $m = 1, 2, \dots, N$, de modo que o momento angular do fluxo angular de nêutrons no grupo de energia g , dado pela Equação (14), possa ser aproximado por quadraturas numéricas na forma (BARROS, 1990)

$$\phi_g^\ell(x) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \omega_n P_\ell(\mu_n) \psi_{n,g}(x) \quad (15)$$

onde $\psi_{n,g}(x) \equiv \psi_g(x, \mu_n)$.

Nesta tese são utilizados números pares para os conjuntos de quadraturas angulares, μ_m e ω_m , de Gauss-Legendre, como é convencional (LEWIS; MILLER, 1993).

A Equação (13) na formulação S_N assume a forma

$$\begin{aligned} \mu_m \frac{d}{dx} \psi_{m,g}(x) + \sigma_{T_g}(x) \psi_{m,g}(x) = \\ \frac{1}{2} \sum_{g'=1}^G \left[\sum_{\ell=0}^{N-1} (2\ell+1) \sigma_{s_{g'} \rightarrow g}^{(\ell)}(x) P_\ell(\mu_m) \sum_{n=1}^N P_\ell(\mu_n) \psi_{n,g'}(x) \omega_n \right] + Q_g(x), \\ m = 1, \dots, N, \quad g = 1, 2, \dots, G. \end{aligned} \quad (16)$$

Para garantir a unicidade da solução do sistema de Equações (16), as condições de contorno $\psi_{m,g}(0)$ para $\mu_m > 0$ e $\psi_{m,g}(X)$ para $\mu_m < 0$ devem ser especificadas, assim como o valor e a posição da fonte $Q_g(x)$.

A Tabela 1 lista os valores das ordenadas discretas, com os seus respectivos pesos para $N = 2, 4, 6$ e 8 . Os valores de μ_m representam as ordenadas discretas.

Tabela 1 - Quadratura Angular de Gauss-Legendre
para domínios unidimensionais.

N	m	$\pm\mu_m$	ω_n
2	1	0,5773502691	1,0000000000
4	1	0,3399810435	0,6521451549
	2	0,8611363115	0,3478548451
6	1	0,2386191860	0,4679139346
	2	0,6612093864	0,3607615730
	3	0,9324695142	0,1713244924
8	1	0,1834346424	0,3626837834
	2	0,5255324099	0,3137066459
	3	0,7966664774	0,2223810344
	4	0,9602898564	0,1012285363

Fonte: LEWIS; MILLER, 1993.

Para a resolução do sistema de Equações (16), neste trabalho são consideradas as condições de contorno prescritas, representadas na forma

$$\begin{aligned}\psi_{m,g}(0) &= f_{m,g}(0), \text{ se } \mu_m > 0, \\ \psi_{m,g}(X) &= p_{m,g}(X), \text{ se } \mu_m < 0.\end{aligned}\tag{17}$$

A condição de contorno reflexiva Equação (18), como o objetivo de simplificar os cálculos em domínios geométricos e materiais simétricos.

$$\begin{aligned}\psi_g(0, \mu_m) &= \psi_g(0, -\mu_m), \text{ se } \mu_m > 0, \\ \psi_g(X, -\mu_m) &= \psi_g(X, \mu_m), \text{ se } \mu_m < 0.\end{aligned}\tag{18}$$

1.4 Modelagem matemática dos problemas de transporte em geometria bidimensional cartesiana na formulação multigrupo de energia

A Equação (8), na formulação multigrupo de energia, em geometria bidimensional cartesiana, pode ser escrita na forma

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \psi_g(x, y, \mu, \eta) + \eta \frac{\partial}{\partial y} \psi_g(x, y, \mu, \eta) + \sigma_{T_g}(x, y) \psi_g(x, y, \mu, \eta) = \sum_{g'=1}^G \int_{-1}^1 \int_0^{2\pi} \sigma_{s_{g' \rightarrow g}}(x, y, \mu', \eta' \rightarrow \mu, \eta) \psi_{g'}(x, y, \mu', \eta') d\mu' d\eta' + Q_g(x, y), \quad (19)$$

onde as variáveis μ e η representam as direções angulares nas direções de x e y , por essa ordem.

Em geometria bidimensional existem várias formulações que levam à discretização angular (DOMÍNGUEZ, 2006):

- A aproximação P_L ou método dos harmônicos esféricos, onde o fluxo angular é expandido em uma série truncada de harmônicos esféricos (STACEY, 2001) e (DOMÍNGUEZ, 2006).
- A aproximação S_N ou método das ordenadas discretas (LEWIS; MILLER, 1993) e (DOMÍNGUEZ, 2006).

Nesta tese para a aproximação das variáveis angulares foi utilizado o método das ordenadas discretas.

1.4.1 Método de ordendas discretas (S_N) em geometria bidimensional cartesiana

A Equação (19) na formulação multigrupo de energia em ordenadas discretas (S_N), para problemas bidimensionais e espalhamento linearmente anisotrópico,¹ aparece na forma

$$\mu_m \frac{\partial}{\partial x} \psi_{m,g}(x, y) + \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \psi_{m,g}(x, y) + \sigma_{T_g}(x, y) \psi_{m,g}(x, y) = \frac{1}{4} \sum_{g'=1}^G \left\{ \sigma_{s_{g' \rightarrow g}}^{(0)}(x, y) \sum_{n=1}^M \psi_{n,g'}(x, y) \omega_n + 3\sigma_{s_{g' \rightarrow g}}^{(1)}(x, y) \mu_m \sum_{n=1}^M \mu_n \psi_{n,g'}(x, y) \omega_n + 3\sigma_{s_{g' \rightarrow g}}^{(1)}(x, y) \eta_m \sum_{n=1}^M \eta_n \psi_{n,g'}(x, y) \omega_n \right\} + Q_g(x, y), \quad (20)$$

onde é definido

$$\psi_{m,g}(x, y) \equiv \psi_{m,g}(x, y, \mu_m, \eta_m),$$

¹ Nesta tese serão só abordados os casos com espalhamento isotrópico e linearmente anisotrópico. Os casos com graus de anisotropia maiores que 1 constituirão parte da análise de trabalhos futuros.

com $g = 1 : G$ e $m = 1 : M$, onde M é o número total de direções discretas, que para o caso bidimensional, é calculado pela expressão

$$M = \frac{N(N+2)}{2}, \quad (21)$$

N representa a ordem da quadratura. A quadratura angular, usada neste trabalho é a quadratura de simetria de nível ou quadratura LQ_n (*Level Symmetric Quadrature*) (LEWIS; MILLER, 1993), onde ω_m é o peso da quadratura angular para a direção discreta representada pelo par (μ_m, η_m) .

A quadratura LQ_n utiliza o mesmo conjunto de $N/2$ valores positivos dos cossenos diretores com relação a cada um dos eixos x e y , onde $\mu_1 = \eta_1$, $\mu_2 = \eta_2$, ..., $\mu_{\frac{N}{2}} = \eta_{\frac{N}{2}}$. Todas as ordenadas com um cosseno diretor μ_m , no que diz respeito ao eixo x , são consideradas sobre o m -ésimo nível com respeito a esse eixo. O mesmo acontece para η_m (LEWIS; MILLER, 1993).

A Tabela 2 lista os valores dos parâmetros de quadraturas LQ_n e os pesos para os níveis S_2, S_4, S_6 e S_8 .

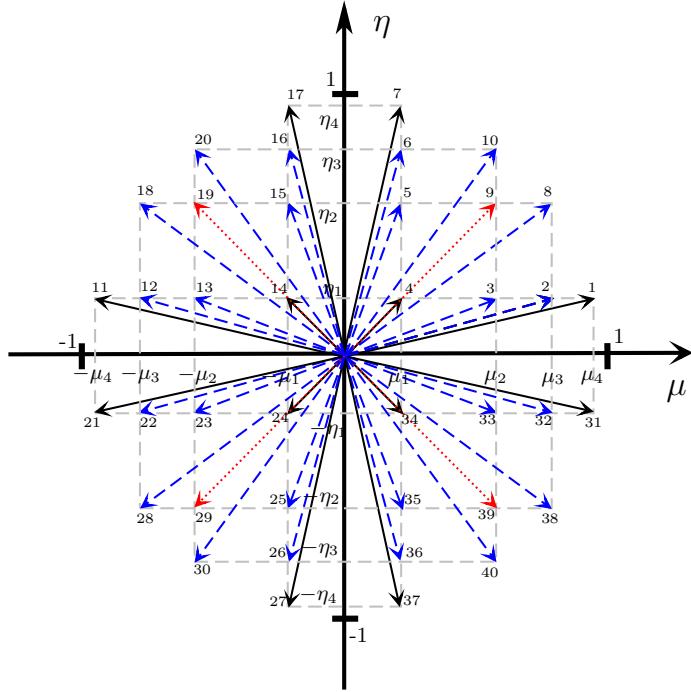
Tabela 2 - Quadratura de simetria de nível (LQ_n)

<i>Nível</i>	<i>n</i>	μ_n	ω_n
S_2	1	0,5773503	1,0000000
S_4	1	0,3500212	0,3333333
	2	0,8688903	
S_6	1	0,2666355	0,1761263
	2	0,6815076	0,1572071
	3	0,9261808	
S_8	1	0,2182179	0,1209877
	2	0,5773503	0,0907407
	3	0,7867958	0,0925926
	4	0,9511897	

Fonte: LEWIS; MILLER, 1993.

Na Figura 4 pode-se observar a representação das direções angulares, com a atribuição dos pesos para cada direção, no caso S_8 , onde $M = 40$, o qual dá 10 direções por quadrante. Neste trabalho foi adotada para todos os casos bidimensionais analisados, a numeração das direções angulares por quadrante no sentido anti-horário, o que também pode ser observado na Figura 4. As condições de contorno prescritas, são dadas por

Figura 4 - Representação das ordenadas discretas para
 $N = 8 (S_8)$



Fonte: O autor, 2016.

$$\begin{aligned}
 \psi_{m,g}(0, y) &= p_{m,g}(0, y), \text{ se } \mu_m > 0, \\
 \psi_{m,g}(X, y) &= q_{m,g}(X, y), \text{ se } \mu_m < 0, \\
 \psi_{m,g}(x, 0) &= u_{m,g}(x, 0), \text{ se } \eta_m > 0 \text{ e} \\
 \psi_{m,g}(x, Y) &= v_{m,g}(x, Y), \text{ se } \eta_m < 0. \tag{22}
 \end{aligned}$$

e as condições de contorno reflexiva, aparecem na forma

$$\begin{aligned}
 \psi_g(0, y, \mu_m, \eta_m) &= \psi_g(0, y, -\mu_m, \eta_m), \text{ se } \mu_m > 0, \\
 \psi_g(X, y, -\mu_m, \eta_m) &= \psi_g(X, y, \mu_m, \eta_m), \text{ se } \mu_m < 0, \\
 \psi_g(x, 0, \mu_m, \eta_m) &= \psi_g(x, 0, \mu_m, -\eta_m), \text{ se } \eta_m > 0 \text{ e} \\
 \psi_g(x, Y, \mu_m, -\eta_m) &= \psi_g(x, Y, \mu_m, \eta_m), \text{ se } \eta_m < 0. \tag{23}
 \end{aligned}$$

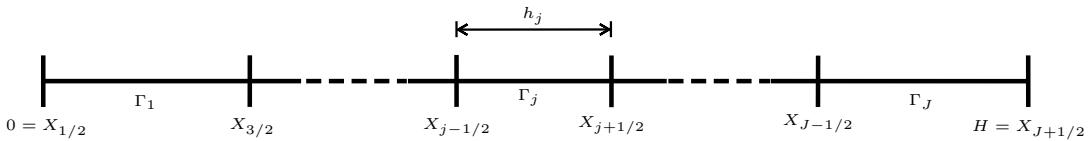
Após discretizar a variável energética e as variáveis angulares, com as condições de contorno apropriadas, se faz necessário discretizar as variáveis espaciais para os problemas unidimensionais (1D) e os problemas bidimensionais (2D). Na próxima seção serão analisadas as considerações ou aproximações numéricas relativas aos métodos de discretização espacial da equação de transporte de Boltzmann para partículas neutras, na formulação S_N .

1.5 Discretização das variáveis espaciais

1.5.1 Variável espacial em geometria unidimensional.

Apresentamos a seguir a equação constitutiva do problema S_N multigrupo unidimensional, discretizada na variável espacial x . Para isto é considerada uma grade espacial arbitrária Γ , definida em um domínio unidimensional B de comprimento H , como mostrado na Figura 5. Esta grade espacial é composta por J nodos espaciais Γ_j de comprimento h_j . Cada nodo espacial possui parâmetros físico-materiais $\sigma_{T_g}^j$, $\sigma_{s'_{g \rightarrow g}}^{(0)j}$ e Q_g^j uniformes, onde $j = 1 : J$.

Figura 5 - Discretização do domínio unidimensional B de comprimento H em J nodos Γ



Fonte: O autor, 2016.

Considerando que cada nodo Γ_j representado na Figura 5, possui parâmetros físico-materiais uniformes, pode-se reescrever o sistema de equações S_N multigrupo unidimensional (16), para um nodo arbitrário, na forma

$$\mu_m \frac{d}{dx} \psi_{m,g}(x) + \sigma_{T_g}^j \psi_{m,g}(x) = \sum_{\ell=0}^L \frac{(2\ell+1)}{2} P_\ell(\mu_m) \sum_{g'=1}^G \sigma_{s'_{g \rightarrow g}}^{(\ell)j} \sum_{n=1}^N P_\ell(\mu_n) \psi_{n,g'}(x) \omega_n + Q_g^j$$

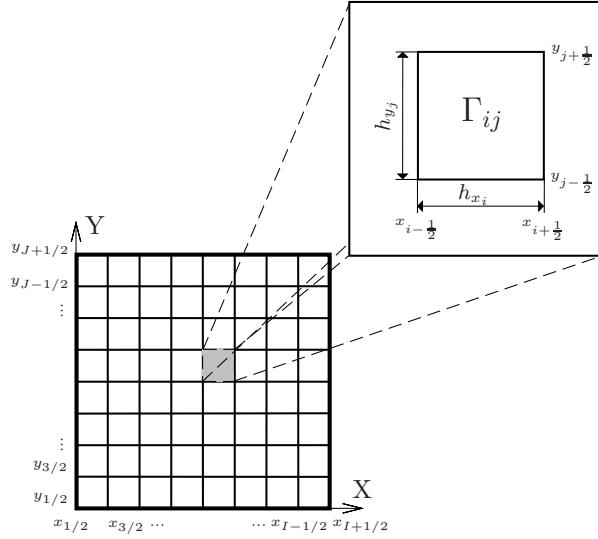
$$x_{j-1/2} \leq x \leq x_{j+1/2}, \quad j = 1 : J, \quad m = 1 : N, \quad g = 1 : G. \quad (24)$$

1.5.2 Discretização das variáveis espaciais x e y, problema S_N em geometria bidimensional.

Para a geometria bidimensional cartesiana vai ser considerada uma grade espacial arbitrária Γ definida num domínio bidimensional D , Figura 6. Esta grade é composta pela união de nodos retangulares conjuntos Γ_{ij} , com comprimento h_{x_i} e altura h_{y_j} . Na Figura 6 pode se observar como são definidos os elementos do nodo arbitrário Γ_{ij} pertencente à grade de discretização espacial D .

Como no caso unidimensional, é considerado que cada nodo Γ_{ij} possui parâmetros físico-materiais uniformes. A Equação (19), na formulação de ordenadas discretas S_N , definida em um nodo arbitrário homogêneo com espalhamento linearmente anisotrópico,

Figura 6 - Discretização do domínio bidimensional D em $I \times J$ nodos Γ_{ij} de comprimento h_{x_i} e altura h_{y_j}



Fonte: Adaptado de DOMÍNGUEZ; BARROS, 2007.

pode ser considerada na forma

$$\begin{aligned}
 & \mu_m \frac{\partial}{\partial x} \psi_{m,g}(x, y) + \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \psi_{m,g}(x, y) + \sigma_{T_g}^{ij} \psi_{m,g}(x, y) = \frac{1}{4} \sum_{g'=1}^G \{ \sigma_{s_{g'} \rightarrow g}^{(0)ij} \sum_{n=1}^M \psi_{n,g'}(x, y) \omega_n + \dots \\
 & + 3\sigma_{s_{g'} \rightarrow g}^{(1)ij} \mu_m \sum_{n=1}^M \mu_n \psi_{n,g'}(x, y) \omega_n + 3\sigma_{s_{g'} \rightarrow g}^{(1)ij} \eta_m \sum_{n=1}^M \eta_n \psi_{n,g'}(x, y) \omega_n \} + Q_g^{ij}, \\
 & x_{i-1/2} \leq x \leq x_{i+1/2}, \quad y_{j-1/2} \leq y \leq y_{j+1/2}, \quad i = 1 : I, \quad j = 1 : J, \quad m = 1 : M, \quad g = 1 : G
 \end{aligned} \tag{25}$$

2 ANÁLISE ESPECTRAL DAS EQUAÇÕES S_N PARA PROBLEMAS DE FONTE FIXA.

2.1 Equações S_N em geometria unidimensional

A solução geral analítica da Equação (24) no interior de um nodo arbitrário Γ_j pode ser representada na forma

$$\psi_{m,g}(x) = \psi_{m,g}^h(x) + \psi_{m,g}^p(x), \quad x \in \Gamma_j , \quad (26)$$

onde p denota a solução particular do problema multigrupo e h indica a componente homogênea da solução geral do sistema de equações (24).

A solução particular $\psi_{m,g}^p(x)$ no interior do nodo Γ_j é considerada constante espacialmente para cada grupo, devido à que as fontes Q_g^j para cada região são assumidas como uniformes e isotrópicas. Substituindo na Equação (24) a expressão $\psi_g^{p,j}$, obtém-se

$$\sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^N \left(\sigma_{T_g}^j \delta_{m,n} \delta_{g'g} - \frac{1}{2} \sum_{\ell=0}^L (2\ell+1) P_\ell(\mu_m) \sigma_{s_{g'} \rightarrow g}^{(\ell)j} P_\ell(\mu_n) \omega_n \right) \psi_g^{p,j} = Q_g^j ,$$

$$j = 1 : J, \quad m = 1 : N, \quad g = 1 : G , \quad (27)$$

$$\text{onde } \delta_{a,b} = \begin{cases} 1 & \text{para } a = b \\ 0 & \text{para } a \neq b \end{cases} ,$$

corresponde ao *delta de Krönecker*.

Para determinar uma solução elementar homogênea $\psi_{m,g}^h(x)$ no interior do nodo Γ_j , é feita uma analogia ao método de Case (CASE; ZWEIFEL, 1967) de resolução analítica da equação de transporte de Boltzmann monoenergética em geometria cartesiana unidimensional, considerando a expressão

$$\psi_{m,g}(x) = a_{m,g}(\nu) e^{-\frac{(x - x_{j-\frac{1}{2}})}{\nu}} , \quad m = 1 : N, \quad g = 1 : G, \quad x \in \Gamma_j , \quad (28)$$

onde $x_{j-\frac{1}{2}}$ é o contorno esquerdo do nodo Γ_j , como visto na Figura 5. Substituindo a Equação (28) na Equação (24), e fazendo o termo de fonte fixa $Q_g^j = 0$, resulta em

$$\begin{aligned}
& \mu_m \frac{d}{dx} \left[a_{m,g}(\nu) e^{\frac{-\left(x - x_{j-\frac{1}{2}}\right)}{\nu}} \right] + \sigma_{T_g}^j(x) \left[a_{m,g}(\nu) e^{\frac{-\left(x - x_{j-\frac{1}{2}}\right)}{\nu}} \right] \\
&= \sum_{\ell=0}^L \frac{(2\ell+1)}{2} P_\ell(\mu_m) \sum_{g'=1}^G \sigma_{s_{g'} \rightarrow g}^{(\ell)j} \sum_{n=1}^N P_\ell(\mu_n) \omega_n \left[a_{n,g'}(\nu) e^{\frac{-\left(x - x_{j-\frac{1}{2}}\right)}{\nu}} \right] \\
& \quad x_{j-1/2} \leq x \leq x_{j+1/2}, \quad j = 1 : J, \quad m = 1 : N, \quad g = 1 : G . \quad (29)
\end{aligned}$$

Após algumas manipulações algébricas, obtem-se o seguinte problema de autovalor.

$$\begin{aligned}
& \sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^N \frac{\sigma_{T_g}^j}{\mu_m} \left[\delta_{m,n} \delta_{g'g} - \sum_{\ell=0}^L \frac{(2\ell+1) \sigma_{s_{g'} \rightarrow g}^{(\ell)j}}{2 \sigma_{T_g}^j} P_\ell(\mu_m) P_\ell(\mu_n) \omega_n \right] a_{n,g'}(\nu) = \frac{1}{\nu} a_{m,g}(\nu) , \\
& \quad m = 1 : N, \quad g = 1 : G . \quad (30)
\end{aligned}$$

A Equação (30) pode ser colocada numa notação matricial da forma

$$A\mathbf{a}(\nu) = \frac{1}{\nu} \mathbf{a}(\nu) . \quad (31)$$

Neste ponto deve ser destacado que o ν a rigor é o inverso do autovalor da matriz A , ou seja $\frac{1}{\nu}$, porém por uma questão de simplicidade e para seguir a nomenclatura clássica na literatura (CASE; ZWEIFEL, 1967) continuaremos a nos referir aos números ν como autovalores.

Assim, obtemos GN autovetores $\mathbf{a}(\nu_k)$ correspondentes a GN autovalores ν_k , cada um dos GN autovetores possui dimensão GN, $k = 1 : GN$. Os autovalores ν_k são todos simétricos e aparecem em pares de sinais opostos, devido também a simetria da quadratura de Gauss-Legendre.

Portanto, a solução geral local das equações S_N no interior de cada nodo Γ_j aparece na forma

$$\begin{aligned}
\psi_{m,g}^j(x) &= \sum_{k=1}^{GN} \alpha_k a_{m,g}(\nu_k) e^{\frac{-\left(x - x_{j-\frac{1}{2}}\right)}{\nu_k}} + \psi_g^{p,j} , \\
& \quad m = 1 : N, \quad g = 1 : G, \quad k = 1 : GN , \quad x \in \Gamma_j . \quad (32)
\end{aligned}$$

onde os α_k são os parâmetros constantes a serem determinados de acordo com as condições de contorno. (BARROS, 1990).

2.2 Equações S_N bidimensionais na formulação multigrupo de energia integradas transversalmente com aproximação constante para os termos de fugas transversais

Tradicionalmente os métodos nodais para cálculos S_N multidimensionais são baseados em integrações transversais das equações S_N no interior de cada nodo de discretização espacial (WALTERS, 1986). Para integrar transversalmente a Equação (25), no interior de cada nodo de discretização espacial Γ_{ij} , é definido o operador de integração generalizado

$$\frac{1}{h_{u_s}} \int_{u_{s-\frac{1}{2}}}^{u_{s+\frac{1}{2}}} (\cdot) du , \quad (33)$$

onde $u = x$ (ou y) e $s = i$ (ou j). Integrando a Equação (25) na direção y , onde $u = y$ e $s = j$, o resultado aparece como

$$\begin{aligned} \mu_m \frac{d}{dx} \tilde{\psi}_{m,g}^j(x) + \frac{\eta_m}{h_{y_j}} \left(\psi_{m,g}^{j+\frac{1}{2}}(x) - \psi_{m,g}^{j-\frac{1}{2}}(x) \right) + \sigma_{T_g}^{ij} \tilde{\psi}_{m,g}^j(x) &= \frac{1}{4} \sum_{g'=1}^G \{ \sigma_{s_{g'} \rightarrow g}^{(0)ij} \sum_{n=1}^M \tilde{\psi}_{n,g'}^j(x) \omega_n \\ &+ 3\sigma_{s_{g'} \rightarrow g}^{(1)ij} \mu_m \sum_{n=1}^M \mu_n \tilde{\psi}_{n,g'}^j \omega_n + 3\sigma_{s_{g'} \rightarrow g}^{(1)ij} \eta_m \sum_{n=1}^M \eta_n \tilde{\psi}_{n,g'}^j(x) \omega_n \} + Q_g^{ij} , \\ x \in \Gamma_{ij}, \quad i = 1 : I, \quad j = 1 : J, \quad m = 1 : M, \quad g = 1 : G . \end{aligned} \quad (34)$$

De forma análoga ao efetuado anteriormente, agora se integra na direção x , considerando $u = x$ e $s = i$.

$$\begin{aligned} \frac{\mu_m}{h_{x_i}} \left(\psi_{m,g}^{i+\frac{1}{2}}(y) - \psi_{m,g}^{i-\frac{1}{2}}(y) \right) + \eta_m \frac{d}{dy} \hat{\psi}_{m,g}^i(y) + \sigma_{T_g}^{ij} \hat{\psi}_{m,g}^i(y) &= \frac{1}{4} \sum_{g'=1}^G \{ \sigma_{s_{g'} \rightarrow g}^{(0)ij} \sum_{n=1}^M \hat{\psi}_{n,g'}^i(y) \omega_n \\ &+ 3\sigma_{s_{g'} \rightarrow g}^{(1)ij} \mu_m \sum_{n=1}^M \mu_n \hat{\psi}_{n,g'}^i(y) \omega_n + 3\sigma_{s_{g'} \rightarrow g}^{(1)ij} \eta_m \sum_{n=1}^M \eta_n \hat{\psi}_{n,g'}^i(y) \omega_n \} + Q_g^{ij} , \\ y \in \Gamma_{ij}, \quad i = 1 : I, \quad j = 1 : J, \quad m = 1 : M, \quad g = 1 : G , \end{aligned} \quad (35)$$

onde os fluxos angulares médios em cada direção coordenada no interior do nodo $\Gamma_{i,j}$ do grupo de energia g são definidos na forma

$$\tilde{\psi}_{m,g}^j(x) = \frac{1}{h_{y_j}} \int_{y_{j-\frac{1}{2}}}^{y_{j+\frac{1}{2}}} \psi_{m,g}(x, y) dy \quad (36)$$

e

$$\widehat{\psi}_{m,g}^i(y) = \frac{1}{h_{x_i}} \int_{x_{i-\frac{1}{2}}}^{x_{i+\frac{1}{2}}} \psi_{m,g}(x, y) dx . \quad (37)$$

As equações (34) e (35) representam dois sistemas de GM equações diferenciais ordinárias nas direções coordenadas x e y , respectivamente. Cada sistema possui $2GM$ incógnitas, GM incógnitas representadas por $\tilde{\psi}_{m,g}^j(x)$ (ou $\widehat{\psi}_{m,g}^i(y)$) e GM incógnitas representadas pelos termos de fugas transversais. Estes termos de fugas transversais, são apresentados nas equações, como

$$\frac{\eta_m}{h_{y_j}} \left(\psi_{m,g}^{j+\frac{1}{2}}(x) - \psi_{m,g}^{j-\frac{1}{2}}(x) \right) \quad (38)$$

e

$$\frac{\mu_m}{h_{x_i}} \left(\psi_{m,g}^{i+\frac{1}{2}}(y) - \psi_{m,g}^{i-\frac{1}{2}}(y) \right) . \quad (39)$$

Os termos correspondentes aos termos de fugas transversais são aproximados por constantes, constituindo a única aproximação realizada nestes cálculos (BARROS; LARSEN, 1992) (DOMÍNGUEZ; BARROS, 2007). Considerando isto, pode-se assumir que estas constantes correspondem aos valores médios dos fluxos angulares ao longo dos lados do nodo analisado, por conseguinte

$$\psi_{m,g}^{j\pm\frac{1}{2}}(x) \approx \widehat{\psi}_{m,g}^{i,j\pm\frac{1}{2}} \quad (40)$$

e

$$\psi_{m,g}^{i\pm\frac{1}{2}}(y) \approx \widetilde{\psi}_{m,g}^{i\pm\frac{1}{2},j} . \quad (41)$$

Depois de assumidas estas aproximações, os termos de fugas transversais podem

ser definidos na forma

$$\frac{\eta_m}{h_{y_j}} \left(\widehat{\psi}_{m,g}^{i,j+\frac{1}{2}} - \widehat{\psi}_{m,g}^{i,j-\frac{1}{2}} \right) = \widehat{L}_{m,g}^{i,j}, \quad (42)$$

e

$$\frac{\mu_m}{h_{x_i}} \left(\widetilde{\psi}_{m,g}^{i+\frac{1}{2},j} - \widetilde{\psi}_{m,g}^{i-\frac{1}{2},j} \right) = \widetilde{L}_{m,g}^{i,j}. \quad (43)$$

Ao considerar aproximações constantes para os termos de fuga transversal, o objetivo é garantir a unicidade da solução das equações S_N integradas transversalmente no interior de cada nodo de discretização espacial Γ_{ij} com as condições de contorno e as condições de continuidade nas interfaces dos nodos. Ou seja, obter dois sistemas com GM equações e GM incógnitas, acoplados pelos termos de fuga transversal (DOMÍNGUEZ, 2006) (SILVA, 2016). As constantes que aproximam estes termos são escolhidas convenientemente, pois é desejado que se preservem os fluxos médios nos lados do nodo Γ_{ij} . Deste modo, usando as definições (42) e (43) nas Equações (34) e (35), pode-se reescrever as equações S_N em geometria bidimensional, na forma

$$\begin{aligned} \mu_m \frac{d}{dx} \widetilde{\psi}_{m,g}^j(x) + \widehat{L}_{m,g}^{i,j} + \sigma_{T_g}^{ij} \widetilde{\psi}_{m,g}^j(x) &= \frac{1}{4} \sum_{g'=1}^G \left\{ \sigma_{s_{g'} \rightarrow g}^{(0)ij} \sum_{n=1}^M \widetilde{\psi}_{n,g'}^j(x) \omega_n \right. \\ &\quad \left. + 3\sigma_{s_{g'} \rightarrow g}^{(1)ij} \mu_m \sum_{n=1}^M \mu_n \widetilde{\psi}_{n,g'}^j \omega_n + 3\sigma_{s_{g'} \rightarrow g}^{(1)ij} \eta_m \sum_{n=1}^M \eta_n \widetilde{\psi}_{n,g'}^j(x) \omega_n \right\} + Q_g^{ij}, \end{aligned} \quad (44)$$

e

$$\begin{aligned} \widetilde{L}_{m,g}^{i,j} + \eta_m \frac{d}{dy} \widehat{\psi}_{m,i}(y) + \sigma_{T_g}^{ij} \widehat{\psi}_{m,i}(y) &= \frac{1}{4} \sum_{g'=1}^G \left\{ \sigma_{s_{g'} \rightarrow g}^{(0)ij} \sum_{n=1}^M \widehat{\psi}_{n,g'}^i(y) \omega_n \right. \\ &\quad \left. + 3\sigma_{s_{g'} \rightarrow g}^{(1)ij} \mu_m \sum_{n=1}^M \mu_n \widehat{\psi}_{n,g'}^i(y) \omega_n + 3\sigma_{s_{g'} \rightarrow g}^{(1)ij} \eta_m \sum_{n=1}^M \eta_n \widehat{\psi}_{n,g'}^i(y) \omega_n \right\} + Q_g^{ij}. \end{aligned} \quad (45)$$

Os sistemas de equações (44) e (45), considerando um domínio bidimensional, com os parâmetros físico materiais uniformes em cada nodo Γ_{ij} a analisar, como nos problemas unidimensionais, possuem uma solução geral, na forma

$$\widetilde{\psi}_{m,g}(x) = \widetilde{\psi}_{m,g}^h(x) + \widetilde{\psi}_{m,g}^p(x), \quad x \in \Gamma_{ij}, \quad (46)$$

para o sistema de equações (44), e

$$\widehat{\psi}_{m,g}(y) = \widehat{\psi}_{m,g}^h(y) + \widehat{\psi}_{m,g}^p(y), \quad y \in \Gamma_{ij}, \quad (47)$$

para o sistema (45). O índice superior h refere-se à componente homogênea da solução e o índice p a componente particular.

Para determinar a componente particular do sistema (44), são substituídos na Equação(44) os fluxos $\tilde{\psi}_{m,g}^j(x)$ pelo $\tilde{\psi}_{m,g}^p$ obtendo

$$\frac{1}{4} \sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^M \left(4\sigma_{T_g}^{ij} \delta_{mn} \delta_{g'g} - \left[\sigma_{s_{g' \rightarrow g}}^{(0)ij} + 3\sigma_{s_{g' \rightarrow g}}^{(1)ij} \{ \mu_m \mu_n + \eta_m \eta_n \} \right] \omega_n \right) \tilde{\psi}_{n,g'}^p = Q_g^{ij} - \tilde{L}_{m,g}^{i,j} \quad (48)$$

$$\text{onde } \delta_{a,b} = \begin{cases} 1 & \text{para } a = b \\ 0 & \text{para } a \neq b \end{cases},$$

representa o *delta de Krönecker*. Fazendo a mesma análise para o sistema dado na Equação (45), obtém-se

$$\frac{1}{4} \sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^M \left(4\sigma_{T_g}^{ij} \delta_{mn} \delta_{g'g} - \left[\sigma_{s_{g' \rightarrow g}}^{(0)ij} + 3\sigma_{s_{g' \rightarrow g}}^{(1)ij} \{ \mu_m \mu_n + \eta_m \eta_n \} \right] \omega_n \right) \widehat{\psi}_{n,g'}^p = Q_g^{ij} - \tilde{L}_{m,g}^{i,j}. \quad (49)$$

A solução homogênea da Equação (44) possui a forma

$$\tilde{\psi}_{m,g}^{hj}(x) = a_{m,g}^x(\nu^x) e^{-\left(x - x_{j-\frac{1}{2}} \right)}, \quad m = 1 : M, \quad x \in \Gamma_{ij}, \quad (50)$$

Substituindo a Equação (50) na parte homogênea da Equação (44) e considerando a fonte $Q_g^{ij} = 0$, obtém-se

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\mu_m} \sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^M \left(4\sigma_{T_g}^{ij} \delta_{g'g} \delta_{mn} - \left[\sigma_{s_{g' \rightarrow g}}^{(0)ij} + 3\sigma_{s_{g' \rightarrow g}}^{(1)ij} \{ \mu_m \mu_n + \eta_m \eta_n \} \right] \omega_n \right) a_{n,g'}^x(\nu^x) = \\ \frac{1}{\nu^x} a_{m,g}^x(\nu^x). \end{aligned} \quad (51)$$

Um procedimento análogo ao que foi feito, pode ser realizado para solucionar o sistema de equações (45), obtendo o sistema de equações

$$\begin{aligned} \frac{1}{4\eta_m} \sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^M \left(4\sigma_{T_g}^{ij} \delta_{g'g} \delta_{mn} - \left[\sigma_{s_{g' \rightarrow g}}^{(0)ij} + 3\sigma_{s_{g' \rightarrow g}}^{(1)ij} \{ \mu_m \mu_n + \eta_m \eta_n \} \right] \omega_n \right) a_{n,g'}^y(\nu^y) = \\ \frac{1}{\nu^y} a_{m,g}^y(\nu^y), \end{aligned} \quad (52)$$

ambas as equações (51) e (52), numa notação matricial, podem ser escritas na forma

$$A\mathbf{a}(\nu) = \frac{1}{\nu}\mathbf{a}(\nu),$$

onde, similar ao caso unidimensional, A é uma matriz real quadrada, de ordem $GM \times GM$, e os autovalores ν_ℓ são todos simétricos e aparecem em pares de sinais opostos, devido à simetria das quadraturas angulares utilizadas.

Por conseguinte, a solução geral local para cada sistema de equações S_N no interior de cada nodo Γ_{ij} , (44) e (45) respectivamente, aparecem na forma

$$\tilde{\psi}_{m,g}^j(x) = \sum_{\ell=1}^{GM} \alpha_\ell^x a_{m,g}^x(\nu_\ell^x) e^{-\frac{(x - x_{i-\frac{1}{2}})}{\nu_\ell^x}} + \tilde{\psi}_g^p, \quad m = 1 : M, \quad g = 1 : G, \quad x \in \Gamma_{ij} \quad (53)$$

e

$$\widehat{\psi}_{m,g}^i(y) = \sum_{\ell=1}^{GM} \alpha_\ell^y a_{m,g}^y(\nu_\ell^y) e^{-\frac{(y - y_{j-\frac{1}{2}})}{\nu_\ell^y}} + \widehat{\psi}_g^p, \quad m = 1 : M, \quad g = 1 : G, \quad y \in \Gamma_{ij} \quad (54)$$

onde os parâmetros α_ℓ^x e α_ℓ^y são constantes arbitrárias a serem determinadas de acordo com as condições de contorno.

3 DESENVOLVIMENTO DO MÉTODO ESPECTRAL DETERMÍNISTICO (MED) EM GEOMETRIA UNIDIMENSIONAL NA FORMULAÇÃO S_N E MULTIGRUPO DE ENERGIA.

A resolução de problemas de transporte de partículas na formulação S_N em geometria unidimensional usando métodos de malha fina como o *DD*, apresenta uma série de desvantagens do ponto de vista computacional. Entre elas podemos citar a dificuldade para obter soluções com uma boa precisão e livres de erros de truncamento espacial quando o tamanho do passo na malha é aumentado (LEWIS; MILLER, 1993). Mesmo que o desvio não cresça exponencialmente, é necessário um refinamento grande da malha, o que ocasiona um alto consumo de recursos computacionais (BURDEN; FAIRES, 2010). Para melhorar a eficiência e precisão na modelagem computacional de problemas S_N e reduzir tempo computacional das simulações, é conveniente realizar a discretização das variáveis espaciais usando métodos de malha grossa. Neste contexto, podemos citar a classe de métodos numéricos especktronodais, e.g., spectral Green's function - *SGF* (BARROS, 1990) e Spectral Diamond - *SD* (ABREU, 1996). Na determinação das equações discretizadas desses métodos, além de utilizar as equações de balanço espacial, os métodos especktronodais utilizam equações auxiliares nos nodos das regiões analisadas, *SD* e *SGF* (ABREU, 1996). Estas equações possuem parâmetros que são determinados de tal forma a preservar a solução geral analítica local do problema no interior de cada nodo (SILVA, 2016), elevando o grau de complexidade na obtenção das equações constitutivas desses métodos.

De forma antagônica ao que se faz na utilização dos métodos numéricos tradicionais para a resolução da equação de transporte de nêutrons, onde é preciso obter as equações auxiliares, onerando as simulações do ponto de vista do desenvolvimento algébrico e provável tempo de execução dos códigos computacionais, propõe-se resolver as equações de transporte de nêutrons, na formulação de ordenadas discretas S_N , partindo da obtenção de parâmetros arbitrários, conhecendo-se inicialmente os fluxos de entrada nos nodos espaciais da grade no problema estudado. Com esse procedimento, pretende-se obter todos os outros fluxos angulares nos contornos e interior dos nodos espaciais, para assim poder calcular algumas grandezas de interesse nesse tipo de simulação, como os fluxos escalares, taxas de absorção nas regiões homogêneas do domínio espacial e as taxas de fuga de nêutrons nos contornos externos do domínio analisado.

Neste capítulo, será definido o Método Espectral Determinístico(*MED*) (OLIVA et al., 2017) (OLIVA et al., 2018) desenvolvido para problemas em geometria unidimensional cartesiana com fonte fixa, espalhamento com grau arbitrário de anisotropia L ($L \leq N - 1$) (YAVUZ, 1995), na formulação multigrupos de energia. A seção 3.1 abordará os problemas considerando domínios homogêneos. Na seção 3.2 será apresentado o método de solução para os problemas heterogêneos.

3.1 O método *MED* para problemas de transporte S_N considerando um domínio homogêneo

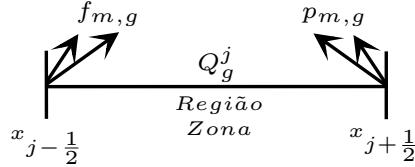
Tomando como ponto de partida a Equação (24), que representa a equação de transporte de partículas neutras na formulação de ordenadas discretas S_N . Esta equação é definida para um nodo arbitrário homogêneo Γ_j de largura h_j , como descrito na Figura 7. Considerando

$$\psi_{m,g}(x) = \begin{cases} f_{m,g} & \text{for } x = x_{j-\frac{1}{2}}, \\ p_{m,g} & \text{for } x = x_{j+\frac{1}{2}}, \end{cases} \quad \begin{array}{ll} \text{se} & \mu_m > 0 \\ \text{se} & \mu_m < 0 \end{array} \quad (55)$$

como condições de contorno prescritas do domínio.

Se procede a realizar a análise espectral da Equação (24), já estabelecidas as condições de contorno e os parâmetros físico-materiais como condições iniciais na Figura 7.

Figura 7 - Domínio homogêneo com espessura H



Fonte: O autor, 2016.

Fazendo uso do procedimento executado na Seção 2.1, se começa por determinar a solução particular $\psi_{m,g}^p(x)$ a partir da Equação (27). A solução particular é considerada constante espacialmente para cada grupo no interior do nodo Γ_j dado que as fontes são assumidas como uniformes e isotrópicas na região analisada. A Equação (27), assume a forma

$$\sum_{n=1}^N \sum_{g'=1}^G \left(\sigma_{T_g}^j \delta_{m,n} \delta_{g'g} - \frac{1}{2} \sum_{\ell=0}^L (2\ell+1) P_\ell(\mu_m) \sigma_{s_{g'} \rightarrow g}^{(\ell)j} P_\ell(\mu_n) \omega_n \right) \psi_{g'}^{pj} = Q_g^j, \quad j = 1 : J, \quad m = 1 : N, \quad g = 1 : G, \quad (56)$$

quando o espalhamento considerado apresenta um grau de anisotropia arbitrário, L ($L \leq N-1$).

Determinada a solução particular, os autovalores ν e autovetores $a_{m,g}(\nu)$ no nodo Γ_j são calculados segundo a Equação (30). A Equação (30) na forma matricial define um

problema de autovalor, onde $a_{m,g}(\nu)$ com $m = 1 : N$ e $g = 1 : G$ são as componentes do autovetor correspondente ao autovalor ν . Para a construção do problema de autovalor de ordem GN , é fixado o grupo de energia g e é variada a direção m . Portanto, serão obtidos GN autovalores ν com os GN autovetores correspondentes, cada um deles de dimensão igual a GN .

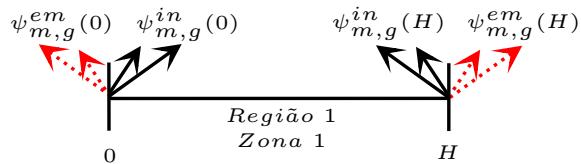
Conhecendo a solução particular, os autovalores e os autovetores, são calculados os parâmetros α_k utilizando a Equação (57), em conjunto com as condições de contorno pré-estabelecidas (setas pretas na Figura 7).

$$\psi_{m,g}^j(x) = \sum_{k=1}^{GN} \alpha_k a_{m,g}(\nu_k) e^{\frac{-\left(x - x_{j-\frac{1}{2}}\right)}{\nu_k}} + \psi_g^{pj},$$

$$m = 1 : N, \quad g = 1 : G, \quad k = 1 : GN. \quad x \in \Gamma_j, \quad (57)$$

Para determinar os fluxos angulares emergentes no domínio, setas pontilhadas na Figura 8, se faz uso novamente da Equação (57). Este processo iterativo é realizado até que o

Figura 8 - Fluxos angulares emergentes no domínio homogêneo com espessura H



Fonte: O autor, 2016.

critério de parada prescrito seja alcançado. Este critério estabelece que o desvio relativo entre duas estimativas consecutivas para o fluxo escalar nos grupos de energia, Φ_g , nos contornos do domínio não exceda um valor ε pré-estabelecido.

$$\max_{1 \leq j \leq J+1} \left| \frac{\Phi_{g,j-\frac{1}{2}}^i - \Phi_{g,j-\frac{1}{2}}^{i+1}}{\Phi_{g,j-\frac{1}{2}}^i} \right| \leq \varepsilon, \quad g = 1 : G \quad (58)$$

onde $(\Phi_g^i - \Phi_g^{i+1})$ representa a diferença entre o fluxo escalar da iteração i e a iteração executada no momento, $i + 1$. O fluxo escalar é calculado, usando a definição

$$\Phi_g(x) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \psi_{n,g}(x) \omega_n, \quad g = 1 : G. \quad (59)$$

3.2 O método *MED* para problemas de transporte S_N considerando domínios heterogêneos

Nesta seção o método *MED* (OLIVA et al., 2016) (OLIVA et al., 2017) é estendido para problemas multigrupo de energia em domínios heterogêneos como mostrado na Figura 9. O domínio é dividido em regiões locais que serão denominadas células espaciais ou nodos. As seções macroscópicas e as fontes interiores em cada uma de estas células são consideradas uniformes. Portanto, cada uma delas pode ser classificada como uma célula material homogênea e o método descrito na seção 3.1 pode ser utilizado no interior de cada uma delas.

Figura 9 - Domínio heterogêneo com comprimento H



Fonte: O autor, 2016.

O algoritmo de cálculo do método *MED* nos domínios heterogêneos, é implementado avançando de esquerda para a direita, calculando os fluxos angulares emergentes em todas as direções, $\mu_m > 0$ e $\mu_m < 0$. Quando se alcança o final do domínio, com $x = H$, verifica-se se o critério de parada é atendido, empregando a Equação 58. Se este critério é satisfeito, o algoritmo é terminado, senão se começa novamente em $x = 0$.

Este esquema de discretização e algoritmo preservam a solução analítica geral em cada célula espacial, gera resultados numéricos contínuos nas interfaces das células e satisfaz as condições de contorno independente do tamanho das malhas espaciais (BARROS, 1990). Portanto pode-se dizer que os resultados numéricos são livres de erros de truncamento espacial.

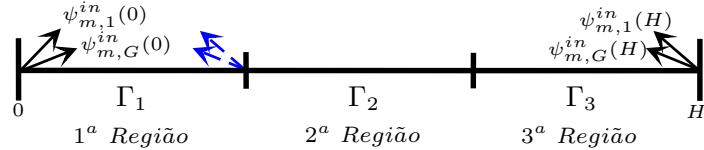
3.2.1 Esquema iterativo para o método MED

O algoritmo iterativo para solucionar o método *MED* em domínios heterogêneos, é basicamente diferente das varreduras de transporte empregadas pelo método de malha fina Diamond Difference (DD) (LEWIS; MILLER, 1993), e aquelas empregadas pelo método de malha grossa, spectral Green's function (*SGF*) (BARROS, 1990).

Este processo iterativo começa realizando a análise espectral da Equação (24) na célula Γ_1 , como mostrado na Seção 2.1. Depois de obtidas a solução particular, $\psi_{m,g}^p(x)$, os autovalores ν e os autovetores $a_{m,g}(\nu)$ nesta primeira célula espacial, são calculados os

parâmetros α_k utilizando a Equação (57), em conjunto com as condições de contorno pré-estabelecidas no lado esquerdo do nodo Γ_1 . Estas condições de contorno são ilustradas por setas pretas na Figura 10. Para aproximar o fluxo angular incidente na interface do lado direito do nodo faz-se uma estimativa inicial, ilustrado por setas tracejadas na Figura 10.

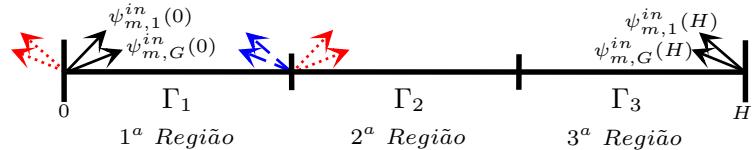
Figura 10 - Fluxos incidentes no nodo Γ_1



Fonte: O autor, 2016.

Obtidos os parâmetros α_k no nodo Γ_1 , podem ser determinados os fluxos angulares emergentes do nodo, setas pontilhadas na Figura 11, fazendo uso novamente da Equação (57).

Figura 11 - Fluxos incidentes e emergentes no nodo Γ_1

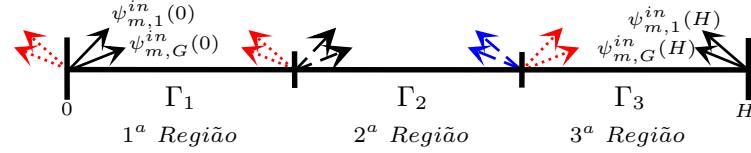


Fonte: O autor, 2016.

Aplicando a condição de continuidade, os fluxos angulares emergentes de todos os grupos de energia na interface do lado direito do nodo Γ_1 , são usados como aproximação inicial para os fluxos angulares incidentes pelo lado esquerdo da célula adjacente Γ_2 (setas tracejadas emergentes do nodo Γ_1 , na Figura 12). O fluxo angular incidente na interface do lado direito do nodo Γ_2 continua como uma aproximação inicial, (setas tracejadas incidentes, no contorno direito do nodo Γ_2 na Figura 12). Com os fluxos angulares incidentes do nodo Γ_2 , os parâmetros α_k deste nodo podem ser estimados e os fluxos angulares emergentes calculados (setas pontilhadas na Figura 12).

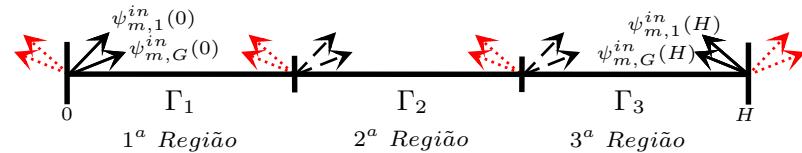
Continuando o movimento da esquerda para a direita, fazendo uso da Equação (57), são determinados os parâmetros α_k e os fluxos angulares emergentes nas células restantes, para todas as direções $\mu_m > 0$ e $\mu_m < 0$, Figura 13, até chegar a $x = H$. Os fluxos angulares incidentes no contorno direito de Γ_3 , são as condições de contorno pré-estabelecidas para o lado direito do domínio heterogêneo.

Figura 12 - Fluxos incidentes e emergentes no nodo Γ_2



Fonte: O autor, 2016.

Figura 13 - Fluxos incidentes e emergentes no domínio heterogêneo com comprimento H



Fonte: O autor, 2016.

O processo iterativo é realizado até que um critério de parada prescrito seja alcançado. Este critério estabelece que o desvio relativo entre duas estimativas consecutivas para o fluxo escalar nos grupos de energia nas interfaces dos nodos do domínio, Φ_g , não exceda um valor positivo ε pré-estabelecido, Equação (58). Se este critério é satisfeito, o algoritmo é terminado; senão, começa-se novamente em $x = 0$.

4 MÉTODO ESPECTRAL DETERMÍNISTICO (MED) EM GEOMETRIA BIDIMENSIONAL CARTESIANA NA FORMULAÇÃO S_N E MULTIGRUPO DE ENERGIA.

Os métodos espetronodais não podem ser imediatamente aplicáveis aos problemas multidimensionais de tal forma que gerem soluções numéricas livres de erros de truncamento espacial como nos problemas unidimensionais. Porém, podem ser utilizados para melhorar a precisão dos métodos nodais em geometria cartesiana retangular, já que estes são fundamentados em integrações transversais das equações S_N no interior de cada nodo da discretização espacial (WALTERS, 1986). As equações S_N multigrupo bidimensionais são integradas transversalmente na direção x , obtendo-se um sistema de equações diferenciais ordinárias em y . Analogamente, para obter o sistema de equações diferenciais ordinárias em x se integra transversalmente na direção y .

Neste capítulo é desenvolvido um novo método numérico para resolver os problemas S_N bidimensionais em geometria $x - y$, este método numérico nodal de malha grossa é denominado de *Método Espectral Determinístico Constant Nodal (MED-CN)*. Será aplicado o método espectral descrito na Seção 2.2 para resolver as equações unidimensionais integradas transversalmente nas direções de x e y no interior de cada nodo de discretização espacial Γ_{ij} . Esta nova abordagem espetronodal é baseada essencialmente na aplicação do método *MED* (OLIVA et al., 2017) (OLIVA et al., 2018), descrito no Capítulo 3 para resolver as equações S_N integradas transversalmente.

4.1 O método *MED* para problemas de transporte S_N em geometria bidimensional cartesiana considerando espalhamento linearmente anisotrópico

Iniciando a análise com a integração transversal da Equação (25), definida para um nodo arbitrário homogêneo Γ_{ij} num domínio bidimensional D , como apresentado na Figura 6, considera-se como condições de contorno prescritas do domínio as representadas na forma

$$\begin{aligned} \psi_{m,g}(0, y) &= p_{m,g}(y), \quad \mu_m > 0, \\ \psi_{m,g}(X, y) &= q_{m,g}(y), \quad \mu_m < 0, \\ \psi_{m,g}(x, 0) &= u_{m,g}(x), \quad \eta_m > 0, \\ \psi_{m,g}(x, Y) &= v_{m,g}(x), \quad \eta_m < 0, \end{aligned} \tag{60}$$

A integração transversal da Equação (25) é implementada fazendo uso do operador

$$\frac{1}{h_{u_s}} \int_{u_{s-\frac{1}{2}}}^{u_{s+\frac{1}{2}}} (\cdot) du , \quad (61)$$

onde $u = x$ (ou y) e $s = i$ (ou j) respectivamente. Esta integração permite que sejam obtidas as equações S_N nas direções coordenadas x e y , Equações (34) e (35), respectivamente.

Contando, com as equações S_N unidimensionais integradas transversalmente, se realiza a análise espectral das Equações (34) e (35), considerando aproximações auxiliares constantes para os termos de fuga transversal, seguindo um procedimento igual ao efetuado na Seção 2.2.

Similar ao método *MED* descrito na Seção 3.1, para geometria unidimensional homogênea, a solução particular nos problemas bidimensionais é considerada constante espacialmente para cada grupo no interior do nodo Γ_{ij} dado que as fontes são assumidas como uniformes e isotrópicas no interior da região analisada. Estas soluções particulares, que são determinadas a partir dos sistemas de equações (48) e (49), constituem a forma de cálculo destas soluções quando os problemas consideram espalhamento linearmente anisotrópico. Para os problemas que apresentam espalhamento isotrópico, os sistemas de equações (48) e (49) assumem a forma

$$\frac{1}{4} \sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^M \left(4\sigma_{T_g}^{ij} \delta_{mn} \delta_{g' \rightarrow g} - \sigma_{s_{g' \rightarrow g}}^{(0)ij} \omega_n \right) \tilde{\psi}_{n,g}^p = Q_g^{ij} - \hat{L}_{m,g}^{i,j} \quad (62)$$

e

$$\frac{1}{4} \sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^M \left(4\sigma_{T_g}^{ij} \delta_{mn} \delta_{g' \rightarrow g} - \sigma_{s_{g' \rightarrow g}}^{(0)ij} \omega_n \right) \hat{\psi}_{n,g}^p = Q_g^{ij} - \tilde{L}_{m,g}^{i,j} . \quad (63)$$

Definidas as soluções particulares $\tilde{\psi}_{n,g}^p$ e $\hat{\psi}_{n,g}^p$, as componentes dos autovetores $a_{m,g}^x(\nu_\ell^x)$ e $a_{m,g}^y(\nu_\ell^y)$ juntos com os autovalores correspondentes ν_ℓ^x e ν_ℓ^y , em cada um dos nodos no domínio, podem ser calculados usando os sistemas de equações (51) e (52). Para a construção dos problemas de autovalor nas direções x e y , analogamente ao caso unidimensional, as direções angulares m são variadas mantendo fixo o grupo de energia. Consequentemente, para cada direção x e y , é obtido um grupo de GM autovetores com os correspondentes GM autovalores ν_ℓ .

Conhecendo os autovalores, autovetores e a solução particular, os parâmetros α_ℓ^x e α_ℓ^y são calculados utilizando as Equações (64) e (65), em conjunto com as condições de

contorno pré-estabelecidas.

$$\tilde{\psi}_{m,g}^j(x) = \sum_{\ell=1}^{GM} \alpha_\ell^x a_{m,g}^x(\nu_\ell^x) e^{-\frac{(x - x_{i-\frac{1}{2}})}{\nu_\ell^x}} + \tilde{\psi}_{m,g}^p, \quad m = 1 : M, \quad g = 1 : G, \quad x \in \Gamma_{ij} \quad (64)$$

$$\widehat{\psi}_{m,g}^i(y) = \sum_{\ell=1}^{GM} \alpha_\ell^y a_{m,g}^y(\nu_\ell^y) e^{-\frac{(y - y_{j-\frac{1}{2}})}{\nu_\ell^y}} + \widehat{\psi}_{m,g}^p, \quad m = 1 : M, \quad g = 1 : G, \quad y \in \Gamma_{ij} \quad (65)$$

Depois de obtidos os parâmetros α_ℓ^x e α_ℓ^y , os fluxos emergentes do nodo analisado são calculados usando novamente as Equações (64) e (65).

4.1.1 Solução numérica do problema discretizado

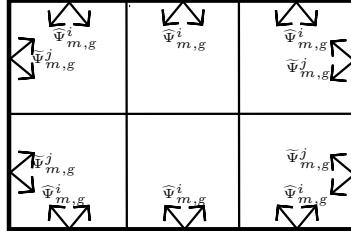
Similar ao que acontece com o algoritmo iterativo do método *MED* para problemas unidimensionais, o algoritmo iterativo para o caso bidimensional é essencialmente diferente das varreduras de transporte empregadas pelos métodos *DD* (LEWIS; MILLER, 1993) e *SGF* (BARROS, 1990).

Definindo o conceito de varredura para uma grade de discretização espacial bidimensional, Figura 6, utilizando o método *MED*, inicialmente é tomado como referência o sistema de coordenadas no plano cartesiano. Os eixos coordenados $(\mu; \eta)$ são orientados nas direções de $(x; y)$ respectivamente. Ambos eixos vão do sentido negativo ao positivo no sistema de coordenadas cartesianas.

Este processo iterativo é iniciado realizando-se a análise espectral das Equações (34) e (35), no nodo eleito para começar a partida da varredura. Este nodo Γ_{ij} pode ser situado na primeira ou na última linha da grade de discretização espacial (Figura 14) combinando esta com a primeira ou a última coluna da mesma grade. Nesta figura também podem ser observadas as condições de contorno pré-estabelecidas no problema a tratar.

Uma vez obtidos os autovalores ν_ℓ^x e ν_ℓ^y com os autovetores correspondentes $a_{m,g}^x(\nu_\ell^x)$ e $a_{m,g}^y(\nu_\ell^y)$, junto às soluções particulares $\tilde{\psi}_{n,g}^p$ e $\widehat{\psi}_{n,g}^p$, se procede o cálculo dos parâmetros α_ℓ^x e α_ℓ^y no primeiro nodo Γ_{ij} , usando as Equações (64) e (65) em conjunto com as condições de contorno pré-estabelecidas nos lados esquerdo e inferior do nodo. Para os fluxos angulares incidentes nas interfaces superior e direita do nodo analisado é

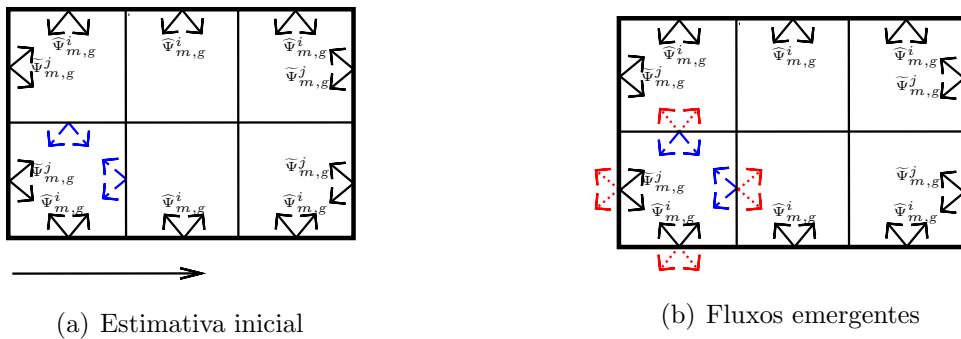
Figura 14 - Grade espacial bidimensional heterogênea



Fonte: O autor, 2017.

feita uma aproximação inicial. Esta estimativa inicial é ilustrada por setas tracejadas na Figura 15(a).

Figura 15 - Fluxos angulares incidentes e emergentes do nodo Γ_{ij}^1

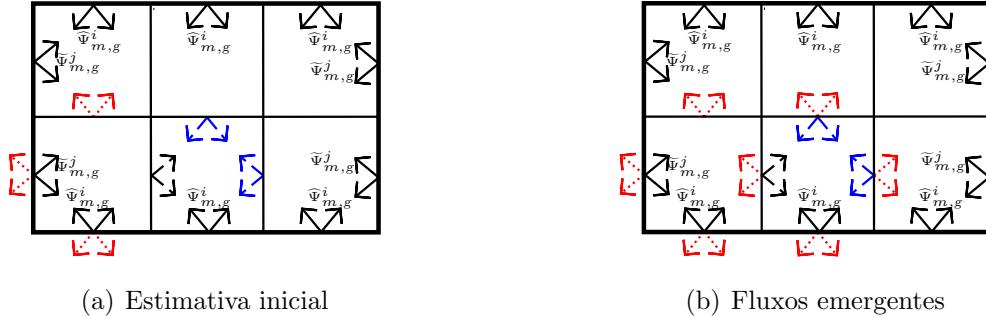


Fonte: O autor, 2017.

Calculados os parâmetros α_ℓ^x e α_ℓ^y no primeiro nodo Γ_{ij} , fazendo uso novamente das Equações (64) e (65), os fluxos angulares emergentes do nodo Γ_{ij} em todos os grupos de energia podem ser determinados, setas pontilhadas na Figura 15(b).

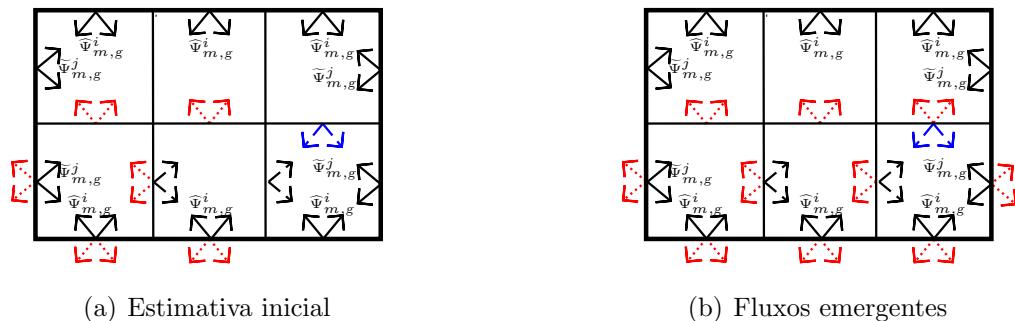
Avançando para a direita do nodo inicial Γ_{ij} e aplicando a condição de continuidade, os fluxos angulares emergentes em todos os grupos de energia na interface direita do nodo Γ_{ij} , são usados como aproximação inicial para os fluxos angulares incidentes pelo lado esquerdo do nodo adjacente, setas tracejadas na Figura 16(a). No nodo adjacente, os fluxos angulares incidentes nas interfaces direita e superior continuam como aproximações iniciais, ilustrados por setas tracejadas na Figura 16(a). Com a aproximação dos fluxos angulares incidentes no nodo, os parâmetros α_ℓ e os fluxos angulares emergentes podem ser calculados, (setas pontilhadas na Figura 16(b)). Avançando da esquerda para a direita de um nodo Γ_{ij} na linha inicial, as Equações (64) e (65) são utilizadas, para determinar os parâmetros α_ℓ e os fluxos angulares emergentes $\widetilde{\psi}_{m,g}^j$ e $\widehat{\psi}_{m,g}^i$ nas interfaces dos nodos restantes (Figura. 17). Quando é atingido o extremo oposto ao ponto de saída na direção de x , troca-se para a próxima linha na direção de y (Figura 18)

Figura 16 - Fluxos angulares incidentes e emergentes do nodo Γ_{ij}^2



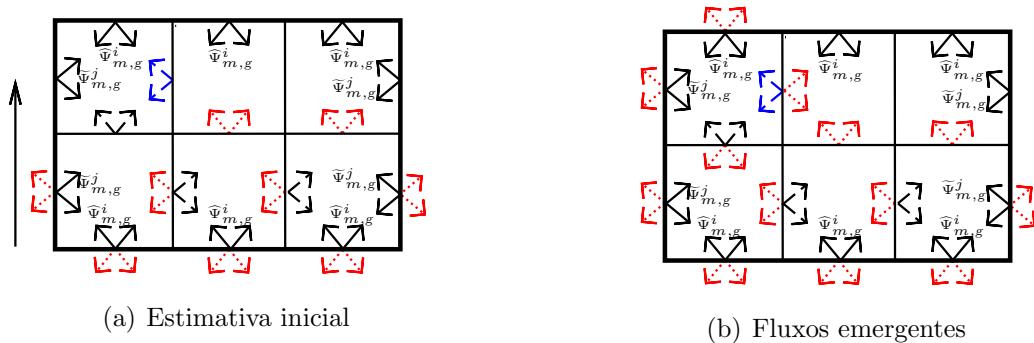
Fonte: O autor, 2017.

Figura 17 - Fluxos angulares incidentes e emergentes do ultimo nodo Γ_{ij} na primeira fila



Fonte: O autor, 2017.

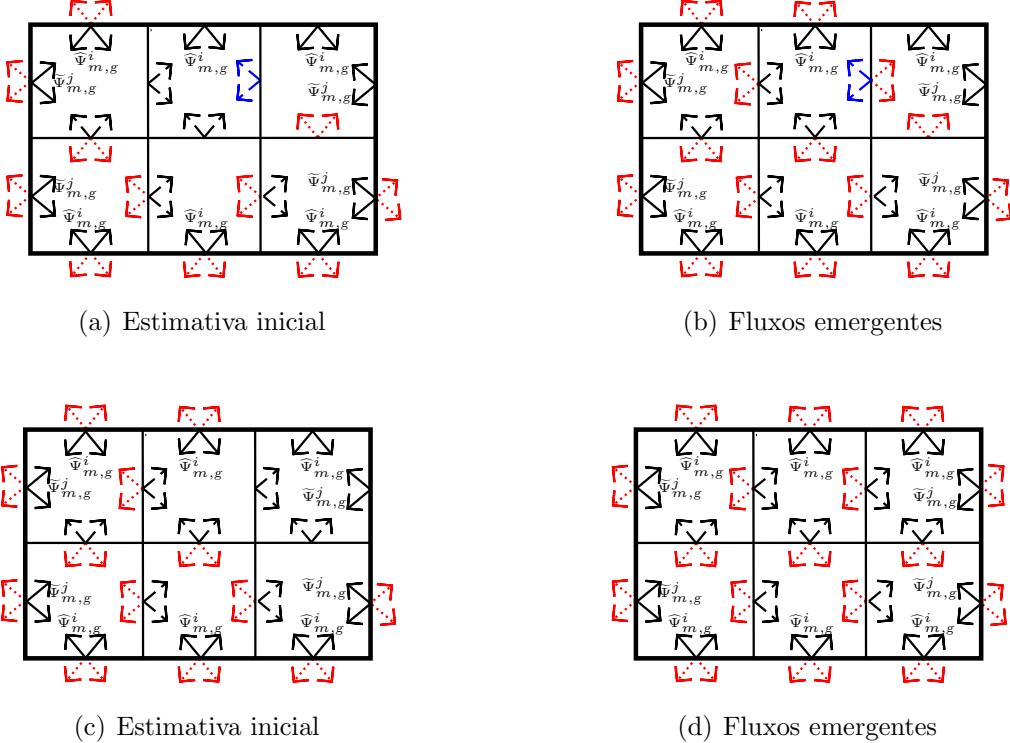
Figura 18 - Fluxos angulares incidentes e emergentes do nodo Γ_{ij}^1 na nova fila



Fonte: O autor, 2017.

Começa-se novamente o movimento partindo da esquerda para a direita na linha nova (Figura 19). As Equações (64) e (65) continuam sendo utilizadas para determinar os parâmetros α_ℓ e os fluxos angulares emergentes $\tilde{\psi}_{m,g}$ e $\hat{\psi}_{m,g}$ nas interfaces das células Γ_{ij} . Completando os cálculos para todos os nodos da grade, verifica-se se o critério de

Figura 19 - Fluxos angulares incidentes e emergentes nos nodos Γ_{ij} na nova fila



Fonte: O autor, 2017.

parada é satisfeito. Este critério estabelece que o desvio relativo entre duas estimativas consecutivas para o fluxo escalar nos grupos de energia nas faces dos nodos do domínio não exceda um valor positivo ε pré-estabelecido. Se o critério de parada é satisfeito, o algoritmo é terminado; caso contrario inicia-se novamente o processo no nodo de partida Γ_{ij} .

A atualização dos termos de fugas transversais e das soluções particulares em cada um dos nodos Γ_{ij} , é realizada sempre utilizando os parâmetros físico-materiais destes junto as condições de contorno e/ou as estimativas dos fluxos angulares incidentes em cada um destes nodos. Estas estimativas para os fluxos angulares incidentes nos nodos Γ_{ij} vão sendo atualizados constantemente a medida que avança o processo iterativo.

Uma vez apresentado o esquema iterativo do método *MED-CN*, define-se como varredura de transporte o percurso realizado na grade de discretização espacial D , onde possam ser calculados todos os fluxos angulares emergentes $\tilde{\psi}_{m,g}^j$ e $\hat{\psi}_{m,g}^i$ nas interfaces dos nodos até atingir o extremo oposto do ponto de saída.

5 RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo são apresentados resultados numéricos para diferentes problemas-modelo utilizando o método *MED* para a geometria unidimensional e *MED-CN* na geometria bidimensional cartesiana.

Na Seção 5.1 são considerados quatro problemas-modelo que foram usados nesta tese, tendo como objetivo mostrar a acurácia, precisão e consistência do método *MED* monoenergético e multigrupo para geometria unidimensional com fonte fixa. Na Seção 5.2 são apresentados resultados numéricos referentes à solução do problemas S_N com o método *MED-CN* monoenergético e com dois grupos de energia com fonte fixa.

Todas as execuções do aplicativo computacional desenvolvido para os métodos *MED* e *MED-CN* nesta tese, foram realizadas num computador com processador *Intel® Core™ i7-4510U CPU @ 2,0 GHz 2,6 GHz* e 16,00 GB de memória RAM.

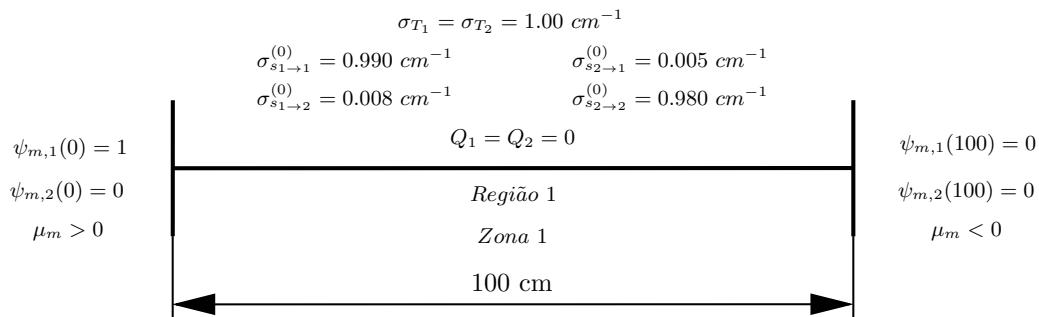
5.1 Resultados numéricos para problemas unidimensionais.

5.1.1 Problema-Modelo Nº 1 (BARROS; LARSEN, 1991)

Neste primeiro problema-modelo é considerado um domínio homogêneo com espessura de 100 cm (BARROS; LARSEN, 1991), como ilustrado na Figura 20, onde também podem ser observados os parâmetros físico-materiais para o problema.

São considerados 2 grupos de energia com fonte externa nula para todos os grupos de energia. As condições de contorno consideram um fluxo incidente unitário em $x = 0\text{ cm}$ apenas para o grupo 1 de energia ($g = 1$) e vácuo no contorno direito para ambos grupos de energia, $x = 100\text{ cm}$. Para modelar o primeiro teste do problema representado na

Figura 20 - Problema Modelo Nº 1 (BARROS; LARSEN, 1991)



Fonte: O autor, 2017.

Figura 20 foram considerados os conjuntos de quadraturas angulares de Gauss-Legendre de ordens S_4 , S_8 , S_{16} e S_{32} (LEWIS; MILLER, 1993). O critério de convergência requer que o valor da norma máxima para o desvio relativo entre duas iterações, para o fluxo escalar, não seja superior a 10^{-6} .

Neste teste são comparados o método de malha fina DD , os métodos de malha grossa SGF e MR com os resultados gerados pelo método MED para comprovar a acurácia deste último. Para o método DD , que foi o método usado como referência, foi considerada como malha fina uma grade de 300 nodos. Esta grade, para um refinamento maior, não apresenta modificação do resultado até a sexta casa decimal, portanto atende aos requerimentos para ser considerada uma malha fina. Como pode ser observado na Ta-

Tabela 3 - Fluxos escalares¹ variando a ordem de quadratura de Gauss-Legendre no experimento N° 1

Ordem de Quadratura	x	Grupo	DD^a		SGF^b		MR^c		MED^d	
				Número de Iterações		Número de Iterações		Número de Iterações		Número de Iterações
4	0	g= 1	9,12675E-01 ^e		9,12675E-01		9,12675E-01		9,12675E-01	
		g= 2	2,72639E-02	2359	2,72639E-02	2	2,72639E-02	2	2,72639E-02	2
	100	g= 1	6,25882E-08	(0,059 s)*	6,27702E-08	(0,001 s)	6,27692E-08	(0,001 s)	6,27700E-08	(0,001 s)
		g= 2	3,83316E-08		3,84431E-08		3,84425E-08		3,84429E-08	
8	0	g= 1	9,12675E-01		9,12675E-01		9,12675E-01		9,12675E-01	
		g= 2	2,72639E-02	2359	2,72639E-02	2	2,72639E-02	2	2,72639E-02	2
	100	g= 1	6,23594E-08	(0,070 s)	6,25408E-08	(0,002 s)	6,25412E-08	(0,002 s)	6,25406E-08	(0,001 s)
		g= 2	3,81915E-08		3,83026E-08		3,83028E-08		3,83024E-08	
16	0	g= 1	9,12674E-01		9,12674E-01		9,12675E-01		9,12674E-01	
		g= 2	2,72636E-02	2359	2,72636E-02	2	2,72639E-02	2	2,72636E-02	2
	100	g= 1	6,23009E-08	(0,073 s)	6,24822E-08	(0,012 s)	6,24932E-08	(0,011 s)	6,24817E-08	(0,055 s)
		g= 2	3,81557E-08		3,82667E-08		3,82734E-08		3,82664E-08	
20	0	g= 1	9,12673E-01		9,12673E-01		9,12680E-01	2	9,12673E-01	
		g= 2	2,72634E-02	2359	2,72634E-02	2	2,72640E-02	0,708666667	2,72634E-02	2
	100	g= 1	6,22849E-08	(0,879 s)	6,24661E-08	(0,832 s)	6,24880E-08	(0,719 s)	6,24660E-08	(0,569 s)
		g= 2	3,81459E-08		3,82568E-08		3,82700E-08		3,82568E-08	

¹ $cm^{-2}s^{-1}$,

* Tempo de CPU ,

^a Método DD com 300 nodos por região,

^b Método SGF com 1 nodo por região,

^c Método MR com 1 nodo por região,

^d Método MED com 1 nodo por região,

^e Leia-se: 9,12675 x 10^{-1} .

Fonte: O autor, 2017.

belas 3, os resultados usando o método MED coincidem com os obtidos usando os métodos DD , MR e SGF até, pelo menos, a sexta casa decimal. Portanto, pode-se afirmar que os três métodos apresentam os mesmos resultados para diferentes conjuntos de quadraturas angulares de Gauss-Legendre considerando o valor da precisão preestabelecida de 10^{-6} .

Para modelar o segundo teste realizado neste problema modelo, foi utilizada a ordem de quadratura S_4 de Gauss-Legendre, e foi variado o tamanho das malhas espaciais usadas para cada método.

Tabela 4 - Fluxos escalares¹ variando o tamanho da malha no experimento N° 1

Grade espacial	Posição (cm)	Grupo	<i>SGF</i>		<i>MR</i>		<i>MED</i>	
			Número de Iterações		Número de Iterações		Número de Iterações	
300	0	g= 1	9,12675E-01 ^a		9,12675E-01		9,12675E-01	
		g= 2	2,72639E-02	477	2,72639E-02	478	2,72639E-02	1737
	100	g= 1	6,27702E-08	(0,161 s)*	6,27678E-08	(0,349 s)	6,27628E-08	(4,365 s)
		g= 2	3,84431E-08		3,84416E-08		3,84386E-08	
200	0	g= 1	9,12675E-01		9,12675E-01		9,12675E-01	
		g= 2	2,72639E-02	426	2,72639E-02	426	2,72639E-02	1245
	100	g= 1	6,27702E-08	(0,115 s)	6,27680E-08	(0,206 s)	6,27652E-08	(2,061 s)
		g= 2	3,84431E-08		3,84417E-08		3,84400E-08	
100	0	g= 1	9,12675E-01		9,12675E-01		9,12675E-01	
		g= 2	2,72639E-02	325	2,72639E-02	325	2,72639E-02	651
	100	g= 1	6,27702E-08	(0,088 s)	6,27683E-08	(0,830 s)	6,27676E-08	(0,570 s)
		g= 2	3,84431E-08		3,84419E-08		3,84415E-08	
24	0	g= 1	9,12675E-01		9,12675E-01		9,12675E-01	
		g= 2	2,72639E-02	142	2,72639E-02	142	2,72639E-02	175
	100	g= 1	6,27702E-08	(0,073 s)	6,27690E-08	(0,011 s)	6,27694E-08	(0,054 s)
		g= 2	3,84431E-08		3,84423E-08		3,84426E-08	
2	0	g= 1	9,12675E-01		9,12675E-01		9,12675E-01	
		g= 2	2,72639E-02	36	2,72639E-02	36	2,72639E-02	37
	100	g= 1	6,27702E-08	(0,070 s)	6,27692E-08	(0,001 s)	6,27698E-08	(0,001 s)
		g= 2	3,84431E-08		3,84425E-08		3,84428E-08	
1	0	g= 1	9,12675E-01		9,12675E-01		9,12675E-01	
		g= 2	2,72639E-02	2	2,72639E-02	2	2,72639E-02	2
	100	g= 1	6,27702E-08	(0,060 s)	6,27694E-08	(0,001 s)	6,27700E-08	(0,001 s)
		g= 2	3,84431E-08		3,84426E-08		3,84429E-08	

¹ $cm^{-2}s^{-1}$,

* Tempo de CPU ,

^a Leia-se: 9,12675 x 10⁻¹ .

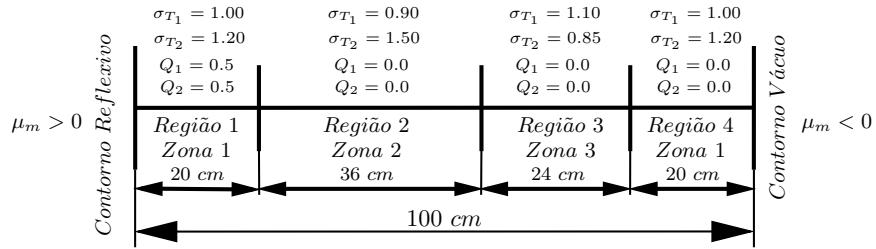
Fonte: O autor, 2017.

Como pode ser observado na Tabela 4 os métodos especktronodais *MR*, *SGF* e *MED* geraram os mesmos resultados para diferentes grades de discretização espacial. Os resultados obtidos para os fluxos escalares apresentam os mesmos valores independente do tamanho da malha utilizada no domínio até, ao menos, a sexta casa decimal. Consequentemente, pode-se dizer que o método *MED* é consistente, e como se observa na Tabela 4, gera resultados numéricos livres de erros de truncamento espacial, similar ao método *SGF* (BARROS, 1990).

5.1.2 Problema–Modelo N° 2 (SILVA et al., 2013)

Para o segundo problema–modelo é considerado um domínio heterogêneo com espessura de $H = 100 cm$, 4 regiões e 3 zonas com propriedades materiais diferentes (SILVA et al., 2013), como pode ser observado na Figura 21. São considerados 2 grupos

Figura 21 - Problema Modelo N° 2 (SILVA et al., 2013)



Fonte: O autor, 2017.

de energia e fonte externa de energia na primeira região, ($0 < x < 20$), com valor de 0,5 ou seja $Q_g = 0,5$ para cada grupo de energia. As condições de contorno consideram contorno reflexivo à esquerda em $x = 0\text{ cm}$ e vácuo à direita em $x = 100\text{ cm}$.

As seções de choque macroscópica diferencial de espalhamento isotrópico $(\sigma_{s' \rightarrow g}^{(0)j})$, aparecem listadas na Tabela 5. Similar ao primeiro problema-modelo, neste problema foi

Tabela 5 - Seção macroscópica de espalhamento do grupo

 $g' \rightarrow g$

$\sigma_{s' \rightarrow g}^{(0)j} (\text{cm}^{-1})$						
Zona 1		Zona 2		Zona 3		
$g' \downarrow g \rightarrow$	1	2	1	2	1	2
1	0,900	0,200	0,750	0,300	0,950	0,600
2	0,050	0,800	0,100	0,990	0,000	0,200

Fonte: O autor, 2017.

realizado um teste com o método de malha fina *DD* para determinar o tamanho exato da malha fina para a grade apresentada neste problema e poder comparar os resultados com os métodos de malha grossa *MR*, *SGF* e *MED*.

A malha fina para o método *DD* ficou definida em 40, 72, 48, 40 nodos para as regiões 1, 2, 3, 4, respectivamente. Determinada a malha fina para o método *DD*, é realizado um teste modificando a ordem dos conjuntos de quadraturas angulares de Gauss-Legendre, S_4 , S_8 , S_{16} e S_{32} , tendo como objetivo verificar a precisão do método *MED* em domínios heterogêneos quando é comparado com o método de malha fina *DD* e os métodos de malha grossa *SGF* e *MR*. O critério de parada, neste caso, foi igual ao do primeiro problema-modelo, ou seja igual a 10^{-6} .

Como pode ser visto na Tabela 6, os valores listados para as diferentes ordens de quadratura de Gauss-Legendre do método *MED*, mostram-se igual ao do método *SGF*. Os resultados são exatos até a sexta casa decimal independente da quadratura angular usada, certificando sua acurácia.

Tabela 6 - Fluxos escalares¹ variando a ordem de quadratura de Gauss-Legendre no experimento N° 2

		<i>DD</i> ^a		<i>SGF</i> ^b		<i>MR</i> ^c		<i>MED</i> ^d	
Ordem de Quadratura	x	Grupo	Número de Iterações	Número de Iterações	Número de Iterações	Número de Iterações	Número de Iterações		
4	0	g=1	7,49906E+00	7,49903E+00	7,49901E+00	7,49902E+00			
		g=2	4,99945E+00	4,99943E+00	4,99942E+00	4,99943E+00			
	20	g=1	3,51469E+00	3,51470E+00	3,51469E+00	3,51469E+00			
		g=2	2,55948E+00	2,55949E+00	2,55948E+00	2,55948E+00			
	56	g=1	1,73820E-07 ^e	420	1,87163E-07	25	1,87163E-07	25	1,87163E-07
		g=2	1,26435E-07	(0,575 s)*	1,36141E-07	(0,048 s)	1,36141E-07	(0,007 s)	1,36141E-07
	80	g=1	2,15563E-14		2,69484E-14		2,69484E-14		2,69484E-14
		g=2	2,72488E-14		3,40605E-14		3,40604E-14		3,40604E-14
	100	g=1	1,22247E-18		1,58688E-18		1,58688E-18		1,58688E-18
		g=2	6,39400E-19		8,30005E-19		8,30002E-19		8,30004E-19
8	0	g=1	7,49906E+00	7,49901E+00	7,49899E+00	7,49902E+00			
		g=2	4,99945E+00	4,99942E+00	4,99942E+00	4,99943E+00			
	20	g=1	3,51534E+00	3,51534E+00	3,51534E+00	3,51534E+00			
		g=2	2,55838E+00	2,55838E+00	2,55838E+00	2,55838E+00			
	56	g=1	1,74086E-07	420	1,87442E-07	24	1,87442E-07	24	1,87442E-07
		g=2	1,27155E-07	(0,788 s)	1,36910E-07	(0,104 s)	1,36910E-07	(0,010 s)	1,36910E-07
	80	g=1	2,18260E-14		2,72759E-14		2,72759E-14		2,72759E-14
		g=2	2,76795E-14		3,45819E-14		3,45819E-14		3,45819E-14
	100	g=1	1,23521E-18		1,60278E-18		1,60278E-18		1,60278E-18
		g=2	6,47036E-19		8,39582E-19		8,39581E-19		8,39583E-19
16	0	g=1	7,49904E+00	7,49885E+00	7,49898E+00	7,49902E+00			
		g=2	4,99944E+00	4,99930E+00	4,99941E+00	4,99942E+00			
	20	g=1	3,51551E+00	3,51544E+00	3,51552E+00	3,51552E+00			
		g=2	2,55803E+00	2,55798E+00	2,55804E+00	2,55804E+00			
	56	g=1	1,74061E-07	420	1,87412E-07	24	1,87419E-07	24	1,87415E-07
		g=2	1,27274E-07	(3,015 s)	1,37037E-07	(0,204 s)	1,37041E-07	(0,023 s)	1,37038E-07
	80	g=1	2,18288E-14		2,72791E-14		2,72803E-14		2,72794E-14
		g=2	2,76795E-14		3,45816E-14		3,45832E-14		3,45821E-14
	100	g=1	1,23372E-18		1,60082E-18		1,60091E-18		1,60084E-18
		g=2	6,46600E-19		8,39008E-19		8,39056E-19		8,39018E-19
20	0	g=1	7,49904E+00	7,49898E+00	7,49898E+00	7,49902E+00			
		g=2	4,99944E+00	4,99940E+00	4,99941E+00	4,99942E+00			
	20	g=1	3,51551E+00	3,51553E+00	3,51554E+00	3,51554E+00			
		g=2	2,55803E+00	2,55798E+00	2,55800E+00	2,55799E+00			
	56	g=1	1,74061E-07	420	1,87408E-07	24	1,87416E-07	23	1,87409E-07
		g=2	1,27274E-07	(10,977 s)	1,37052E-07	(0,260 s)	1,37057E-07	(0,069 s)	1,37052E-07
	80	g=1	2,18288E-14		2,72790E-14		2,72807E-14		2,72792E-14
		g=2	2,76795E-14		3,45813E-14		3,45833E-14		3,45814E-14
	100	g=1	1,23372E-18		1,60056E-18		1,60069E-18		1,60057E-18
		g=2	6,46600E-19		8,38935E-19		8,39003E-19		8,38939E-19

¹ cm⁻²s⁻¹

* Tempo de CPU,

^a Método *DD* com 200 (40 × 72 × 48 × 40) nodos por região

^b Método *SGF* com 1 nodo por região

^c Método *MR* com 1 nodo por região

^d Método *MED* com 1 nodo por região

^e Leia-se 1,73820 × 10⁻⁷.

Fonte: O autor, 2017.

No segundo teste executado para este problema-modelo, foi variado o tamanho das malhas espaciais usadas em cada método, a ordem de quadratura de Gauss-Legendre utilizada foi S_4 .

Tabela 7 - Fluxos escalares¹ variando o tamanho da malha no experimento N°2

Grade espacial	Posição (cm)	Grupo	SGF		MR		MED	
					Número de Iterações		Número de Iterações	
64G ₂	0	g=1	7,49903E+00		7,49901E+00		7,49903E+00	
		g=2	4,99943E+00		4,99943E+00		4,99943E+00	
	20	g=1	3,51469E+00		3,51469E+00		3,51469E+00	
		g=2	2,55948E+00		2,55948E+00		2,55948E+00	
	56	g=1	1,87163E-07 ^a	105	1,87163E-07	105	1,87163E-07	1857
		g=2	1,36141E-07	(0,178 s)*	1,36141E-07	(0,408 s)	1,36141E-07	(16,043 s)
	80	g=1	2,69484E-14		2,69484E-14		2,69483E-14	
		g=2	3,40605E-14		3,40604E-14		3,40604E-14	
	100	g=1	1,58688E-18		1,58687E-18		1,58678E-18	
		g=2	8,30002E-19		8,30000E-19		8,29950E-19	
16G ₂	0	g=1	7,49903E+00		7,49901E+00		7,49903E+00	
		g=2	4,99943E+00		4,99943E+00		4,99943E+00	
	20	g=1	3,51469E+00		3,51469E+00		3,51469E+00	
		g=2	2,55948E+00		2,55948E+00		2,55948E+00	
	56	g=1	1,87163E-07	74	1,87163E-07	89	1,87163E-07	487
		g=2	1,36141E-07	(0,087 s)	1,36141E-07	(0,091 s)	1,36141E-07	(1,144 s)
	80	g=1	2,69484E-14		2,69484E-14		2,69484E-14	
		g=2	3,40605E-14		3,40604E-14		3,40604E-14	
	100	g=1	1,58688E-18		1,58687E-18		1,58686E-18	
		g=2	8,30002E-19		8,30001E-19		8,29991E-19	
G ₂ ^c	0	g=1	7,49903E+00		7,49901E+00		7,49903E+00	
		g=2	4,99943E+00		4,99943E+00		4,99943E+00	
	20	g=1	3,51470E+00		3,51469E+00		3,51469E+00	
		g=2	2,55948E+00		2,55948E+00		2,55948E+00	
	56	g=1	1,87163E-07	30	1,87163E-07	30	1,87163E-07	44
		g=2	1,36141E-07	(0,056 s)	1,36141E-07	(0,008 s)	1,36141E-07	(0,013 s)
	80	g=1	2,69484E-14		2,69484E-14		2,69484E-14	
		g=2	3,40605E-14		3,40604E-14		3,40604E-14	
	100	g=1	1,58688E-18		1,58688E-18		1,58688E-18	
		g=2	8,30004E-19		8,30002E-19		8,30003E-19	
G ₁ ^b	0	g=1	7,49903E+00		7,49901E+00		7,49902E+00	
		g=2	4,99943E+00		4,99942E+00		4,99943E+00	
	20	g=1	3,51470E+00		3,51469E+00		3,51469E+00	
		g=2	2,55949E+00		2,55948E+00		2,55948E+00	
	56	g=1	1,87163E-07	25	1,87163E-07	25	1,87163E-07	24
		g=2	1,36141E-07	(0,048 s)	1,36141E-07	(0,007 s)	1,36141E-07	(0,002 s)
	80	g=1	2,69484E-14		2,69484E-14		2,69484E-14	
		g=2	3,40605E-14		3,40604E-14		3,40604E-14	
	100	g=1	1,58688E-18		1,58688E-18		1,58688E-18	
		g=2	8,30005E-19		8,30002E-19		8,30004E-19	

¹ $cm^{-2}s^{-1}$,

* Tempo de CPU,

^a Leia-se: $1,87163 \times 10^{-7}$,

^b $G_1 = 1 \times 1 \times 1 \times 1$,

^c $G_2 = 5 \times 9 \times 6 \times 5$.

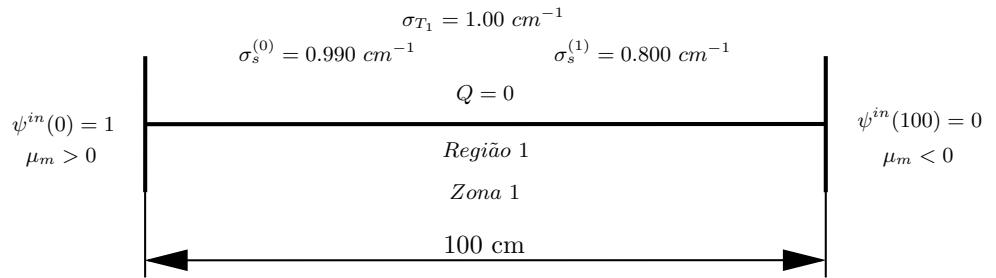
Fonte: O autor, 2017.

Na Tabela 7, os resultados do fluxo escalar gerados pelo método *MED*, para os diferentes tamanhos da malha espacial definida, não dependem do tamanho desta, assim como os resultados apresentados na Seção 5.1.1. Portanto, pode-se afirmar que o método *MED* apresenta resultados livres de erros de truncamento espacial.

5.1.3 Problema–Modelo N° 3 (BARROS; LARSEN, 1990)

O terceiro experimento consiste em um problema de transporte de partículas neutras sem fonte externa, com espalhamento linearmente anisotrópico com um grupo de energia. O domínio considerado é uma placa homogênea com espessura de 100 cm (BARROS; LARSEN, 1990), como ilustrado na Figura 22, onde também podem ser observados os parâmetros físico-materiais do problema.

Figura 22 - Problema Modelo N° 3 (BARROS; LARSEN, 1990)



Fonte: O autor, 2017.

As condições de contorno consideram, fluxo angular incidente unitário em $x = 0\text{ cm}$ e vácuo no contorno direito, $x = 100\text{ cm}$.

Neste problema–modelo são calculados os fluxos escalares nos pontos $x = 0$, $x = 50$ e $x = 100$, para um número variável de nodos espaciais utilizando os conjuntos de quadraturas de Gauss-Legendre, S_2 , S_4 e S_8 (BARROS; LARSEN, 1990).

Para comparar os resultados obtidos pelo método *MED*, são usados os resultados obtidos neste trabalho para o método *DD*; utilizado como referência em todos os exemplos, e os resultados reportados em Barros e Larsen (1990) para o método *SGF* utilizando o esquema iterativo *one-node block inversion (NBI)*.

Os fluxos escalares são apresentados nas Tabelas 8-10 para os métodos *DD*, *MED* e *SGF*. Em cada tabela, os números entre parênteses pertencem ao método *SGF*. Para cada caso, o número de iterações necessárias para alcançar o critério de parada, $\varepsilon = 10^{-7}$, também encontra-se listado nas tabelas.

Tabela 8 - Fluxo escalar para o problema–modelo N° 3, utilizando a quadratura angular S_2

Número de Nodos	$\phi^a(0)$	$\phi(50)$	$\phi(100)$	Número de Iterações
400	8,1726E-01 ^b	1,6991E-02	1,2918E-04	376
100	8,1726E-01 ^c (8,1726E-01) ^d	1,6991E-02 ^e (1,6991E-02)	1,2918E-04 (1,2918E-04)	376 (72)
50	8,1726E-01 (8,1726E-01)	1,6991E-02 (1,6991E-02)	1,2918E-04 (1,2918E-04)	198 (64)
20	8,1726E-01 (8,1726E-01)	1,6991E-02 (1,6991E-02)	1,2918E-04 (1,2918E-04)	85 (49)
10	8,1726E-01 (8,1726E-01)	1,6991E-02 (1,6991E-02)	1,2918E-04 (1,2918E-04)	47 (36)
4	8,1726E-01 (8,1726E-01)	1,6991E-02 (1,6991E-02)	1,2918E-04 (1,2918E-04)	25 (24)
2	8,1726E-01 (8,1726E-01)	1,6991E-02 (1,6991E-02)	1,2918E-04 (1,2918E-04)	19 (19)

^a Fluxo Escalar: $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$,^b Método *DD*,^c Método *MED*,^d Método *SGF* (BARROS; LARSEN, 1990),^e Leia-se: $1,6991 \times 10^{-2}$.

Fonte: O autor, 2017.

Tabela 9 - Fluxo escalar para o problema–modelo N° 3, utilizando a quadratura angular S_4

Número de Nodos	$\phi^a(0)$	$\phi(50)$	$\phi(100)$	Número de Iterações
400	8,2226E-01 ^b	1,6537E-02	1,2350E-04	376
100	8,2226E-01 ^c (8,2226E-01) ^d	1,6538E-02 ^e (1,6538E-02)	1,2353E-04 (1,2353E-04)	340 (83)
50	8,2226E-01 (8,2226E-01)	1,6538E-02 (1,6538E-02)	1,2353E-04 (1,2353E-04)	179 (65)
20	8,2226E-01 (8,2226E-01)	1,6538E-02 (1,6538E-02)	1,2353E-04 (1,2353E-04)	78 (45)
10	8,2226E-01 (8,2226E-01)	1,6538E-02 (1,6538E-02)	1,2353E-04 (1,2353E-04)	43 (34)
4	8,2226E-01 (8,2226E-01)	1,6538E-02 (1,6538E-02)	1,2353E-04 (1,2353E-04)	23 (23)
2	8,2226E-01 (8,2226E-01)	1,6538E-02 (1,6538E-02)	1,2353E-04 (1,2353E-04)	18 (18)

^a Fluxo Escalar: $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$,^b Método *DD*,^c Método *MED*,^d Método *SGF* (BARROS; LARSEN, 1990),^e Leia-se: $1,6538 \times 10^{-2}$.

Fonte: O autor, 2017

Tabela 10 - Fluxo escalar para o problema-modelo N° 3, utilizando a quadratura angular S_8

Número de Nodos	$\phi^a(0)$	$\phi(50)$	$\phi(100)$	Número de Iterações
400	8,2284E-01 ^b	1,6470E-02	1,2250E-04	376
100	8,2284E-01 ^c (8,2284E-01) ^d	1,6470E-02 ^e (1,6470E-02)	1,2250E-04 (1,2250E-04)	329 (77)
50	8,2284E-01 (8,2284E-01)	1,6470E-02 (1,6470E-02)	1,2250E-04 (1,2250E-04)	173 (61)
20	8,2284E-01 (8,2284E-01)	1,6470E-02 (1,6470E-02)	1,2250E-04 (1,2250E-04)	75 (43)
10	8,2284E-01 (8,2284E-01)	1,6470E-02 (1,6470E-02)	1,2250E-04 (1,2250E-04)	42 (32)
4	8,2284E-01 (8,2284E-01)	1,6470E-02 (1,6470E-02)	1,2250E-04 (1,2250E-04)	23 (22)
2	8,2284E-01 (8,2284E-01)	1,6470E-02 (1,6470E-02)	1,2250E-04 (1,2250E-04)	17 (17)

^a Fluxo Escalar: $\text{cm}^{-2} \text{s}^{-1}$,^b Método *DD*,^c Método *MED*,^d Método *SGF* (BARROS; LARSEN, 1990),^e Leia-se: $1,6470 \times 10^{-2}$.

Fonte: O autor, 2017

Nos resultados numéricos apresentados nas Tabelas 8-10, pode-se observar que à medida que as grades espaciais tornam-se mais grossas, a solução numérica correspondente aos pontos em $x = 0$, $x = 50$, e $x = 100$ permanecem invariáveis e o número de iterações necessárias para atingir o critério de convergência $\varepsilon = 10^{-7}$ torna-se menor para os métodos *MED* e *SGF*.

5.1.4 Problema-Modelo N° 4 (GARCIA; SIEWERT, 1983)

O problema-modelo tratado nesta seção é resolvido considerando um domínio heterogêneo com 5 regiões com propriedades materiais diferentes, 20 grupos de energia, espalhamento anisotrópico ($L = 10$) e sem fonte interior de energia (GARCIA; SIEWERT, 1983). O domínio de 20 cm de espessura, apresenta uma distribuição unitária de radiação incidente apenas no grupo mais rápido ($g = 1$) no contorno esquerdo ($x = 0$) e considera vácuo no contorno direito, isto é,

$$\psi_{m,g} = \begin{cases} \psi_{m,g}(0) = \delta_{g,1} & , \quad \mu_m > 0, \quad g = 1 : 20, \\ \psi_{m,g}(H) = 0 & , \quad \mu_m < 0, \quad g = 1 : 20. \end{cases} \quad (66)$$

A espessura de cada região é determinada por $h_j = (j+1)$, $j = 1 : 5$. É usado um conjunto fictício de seções de choque macroscópicas para facilitar a definição dos dados. Definindo $\delta_{a,b}$ como *delta de Kronecker*, as seções de choque macroscópicas totais para cada grupo são definidas como

$$\sigma_{T_g}^j = \left(\frac{j+20}{21} \right)^5 \left[\frac{g}{10} - 0,15\delta_{g,5} - 0,15\delta_{g,10} \right], \quad g = 1 : 20 \quad (67)$$

e as seções de choque macroscópicas de espalhamento são geradas por

$$\sigma_{s_{g'} \rightarrow g}^{(\ell)j} = \left(\frac{j+20}{21} \right) \left[\frac{g'}{100(g-g'+1)} \right] (h_{gg'})^\ell, \quad g' = 1 : g, \quad g = 1 : 20, \quad \ell = 0 : 10, \quad (68)$$

onde

$$h_{gg'} = 0,7 - \frac{g+g'}{200}. \quad (69)$$

Neste problema foram calculados os albedos (A^*) e os fatores de transmissão (B^*) nos contornos, que são definidos em (GARCIA; SIEWERT, 1983) respectivamente, na forma

$$A_g^* = 2 \sum_{\mu_n < 0} |\mu_n| \omega_n \psi_{n,g}^{out}(0), \quad g = 1 : G, \quad (70)$$

onde $\psi_{n,g}^{out}(0)$ representa os fluxos emergentes pelo contorno esquerdo em $x = 0 \text{ cm}$, e

$$B_g^* = 2 \sum_{\mu_n > 0} |\mu_n| \omega_n \psi_{n,g}^{out}(H), \quad g = 1 : G, \quad (71)$$

onde $\psi_{n,g}^{out}(H)$ representa os fluxos emergentes pelo contorno direito em $x = 20 \text{ cm}$.

Na Tabela 11 são apresentados os resultados do método *MED*, para os albedos, A_g^* e os fatores de transmissão em cada grupo de energia, para o conjunto de quadraturas Gauss-Legendre de ordem S_{128} , juntamente com os resultados de referência mostrados em Garcia e Siewert (1983) usando o método F_N . O critério de parada prescrito é estabelecido em 10^{-10} (GARCIA; SIEWERT, 1983).

Tabela 11 - Albedos A^* e Factores de Transmissão B^* para os grupos de energia^a

Grupo	Método F_N (GARCIA; SIEWERT, 1983)		Método MED	
	A_g^*	B_g^*	A_g^*	B_g^*
1	5,8809E-03 ^b	1,0453E-02	5,8853E-03	1,0453E-02
2	2,2791E-03	1,9993E-04	2,2805E-03	1,9993E-04
3	1,2939E-03	6,9012E-05	1,2947E-03	6,9016E-05
4	8,6280E-04	3,5393E-05	8,6338E-04	3,5398E-05
5	8,5170E-04	3,5350E-05	8,5213E-04	3,5355E-05
6	4,9662E-04	1,4899E-05	4,9698E-04	1,4904E-05
7	3,9706E-04	1,0716E-05	3,9737E-04	1,0721E-05
8	3,2763E-04	8,0863E-06	3,2789E-04	8,0907E-06
9	2,7671E-04	6,3202E-06	2,7694E-04	6,3246E-06
10	2,7956E-04	6,1271E-06	2,7977E-04	6,1320E-06
11	2,0989E-04	4,1837E-06	2,1008E-04	4,1881E-06
12	1,8491E-04	3,4892E-06	1,8508E-04	3,4935E-06
13	1,6476E-04	2,9545E-06	1,6492E-04	2,9587E-06
14	1,4814E-04	2,5332E-06	1,4829E-04	2,5374E-06
15	1,3423E-04	2,1953E-06	1,3436E-04	2,1994E-06
16	1,2242E-04	1,9200E-06	1,2254E-04	1,9240E-06
17	1,1229E-04	1,6927E-06	1,1241E-04	1,6967E-06
18	1,0352E-04	1,5029E-06	1,0363E-04	1,5068E-06
19	9,5859E-05	1,3428E-06	9,5965E-05	1,3467E-06
20	8,9125E-05	1,2064E-06	8,9225E-05	1,2103E-06

^a cm⁻² s⁻¹,^b Leia-se: 5,8809 x 10⁻³.

Fonte: O autor, 2017.

A Tabela 12 mostra a porcentagem calculada dos desvios relativos nos resultados de método *MED* calculados por

$$\epsilon = \left(\frac{V_r - V}{V_r} \right) \times 100\%, \quad (72)$$

onde V_r representa o valor de referência do método F_N (GARCIA; SIEWERT, 1983) e V é o valor gerado pelo método *MED* para S_{128} de ordem de quadratura de Gauss–Legendre.

Tabela 12 - Desvio relativo percentual

Grupo	ϵ^a	
	A_g^*	B_g^*
1	-7,5478E-02 ^b	-3,1570E-03
2	-6,0445E-02	-7,9528E-04
3	-6,3629E-02	-6,1569E-03
4	-6,7349E-02	-1,3299E-02
5	-5,0053E-02	-1,4122E-02
6	-7,3146E-02	-3,2009E-02
7	-7,7492E-02	-4,3421E-02
8	-7,9443E-02	-5,4989E-02
9	-8,3011E-02	-6,9522E-02
10	-7,4692E-02	-7,9591E-02
11	-8,9666E-02	-1,0540E-01
12	-9,2391E-02	-1,2405E-01
13	-9,5515E-02	-1,4203E-01
14	-1,0130E-01	-1,6421E-01
15	-9,7892E-02	-1,8460E-01
16	-1,0023E-01	-2,0882E-01
17	-1,0248E-01	-2,3591E-01
18	-1,0417E-01	-2,6266E-01
19	-1,1013E-01	-2,8872E-01
20	-1,1181E-01	-3,2326E-01

^a Desvio relativo percentual,

^b Leia-se: $-7,5478 \times 10^{-2}$.

Fonte: O autor, 2017.

Como pode ser observado na Tabela 12, os desvios relativos percentuais dos resultados do método MED são muito pequenos, $|\epsilon| \ll 1\%$, em relação aos resultados de referência de (GARCIA; SIEWERT, 1983).

5.2 Resultados numéricos para problemas bidimensionais.

5.2.1 Problema absorvedor puro 1 nodo, em geometria bidimensional

Nesta seção é apresentado um experimento numérico com um problema-modelo simples de uma célula espacial num meio puramente absorvedor. O problema absorvedor puro é caracterizado pela ausência das interações de espalhamento, são consideradas somente as interações de absorção, o qual nos permite simplificar o problema físico de transporte de nêutrons em meios materiais.

Apesar de terem pouco valor prático, os problemas de meios puramente absorve-

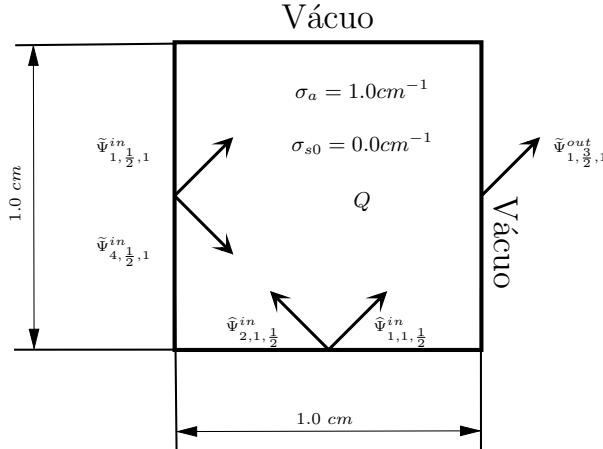
dores são apropriados para testarem novos métodos numéricos desenvolvidos (DOMÍNGUEZ, 2006). A equação S_N para uma célula espacial arbitrária Γ , Equação (25), num meio puramente absorvedor, i.e., $\sigma_a = 1,0 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_s^{(0)} = 0,0 \text{ cm}^{-1}$, pode ser escrita na forma

$$\frac{\mu_m}{\sigma_a} \frac{\partial}{\partial x} \psi_m(x, y) + \frac{\eta_m}{\sigma_a} \frac{\partial}{\partial y} \psi_m(x, y) + \psi_m(x, y) = \frac{Q}{\sigma_a} \quad (73)$$

Esta equação representa um sistema linear em derivadas parciais de primeira ordem com coeficientes constantes e pode ser resolvida analiticamente realizando uma análise espectral similar ao implementado na Seção 2.2.

Nesta seção serão resolvidos dois problemas de absorvedor puro, considerando uma quadratura angular S_2 onde o domínio de cálculo é formado por uma única célula espacial, Figura 23. As propriedades físico-materiais e a geometria dos problemas, são mostradas também na Figura 23 (DOMÍNGUEZ, 2006). O primeiro problema apresenta

Figura 23 - Problema Modelo N° 1 (DOMÍNGUEZ, 2006)



Fonte: Adaptado de DOMÍNGUEZ, 2006.

condições de contorno de vácuo nas fronteiras esquerda e inferior, onde ($\tilde{\psi}_{1,\frac{1}{2},1}^{in} = \tilde{\psi}_{4,\frac{1}{2},1}^{in} = \tilde{\psi}_{1,1,\frac{1}{2}}^{in} = \tilde{\psi}_{2,1,\frac{1}{2}}^{in} = 0$), com fonte $Q = 1.0$.

Na Tabela 13 são mostrados os resultados numéricos e os desvios relativos percentuais $\delta(\%)$ utilizando como referência a solução analítica derivada em Domínguez (2006). Para o cálculo dos desvios relativos percentuais $\delta(\%)$, em ambos problemas, foi usada a Equação (74)

$$\delta(\%) = \left| \frac{S_a - S_n}{S_a} \right| \times 100\%, \quad (74)$$

onde S_a , é o valor da solução analítica (DOMÍNGUEZ, 2006) usada como referência, e S_n

representa ao valor gerado por cada um dos métodos numéricos utilizados neste trabalho para calcular o fluxo angular $\tilde{\psi}_{1,\frac{3}{2},1}^{out}$.

Tabela 13 - Resultados numéricos gerados pelos métodos no primeiro caso analisado

Métodos	$\tilde{\psi}_{1,\frac{3}{2},1}^{out^a}$	$\delta(\%)$
SA ^b	5,247E-01 ^c	-
DD ^d	5,248E-01	1,857E-02
SGF-CN	5,579E-01	6,327E+00
MED-CN	5,579E-01	6,327E+00

^a Fluxo Angular : $cm^{-2}s^{-1}$,

^b Solução Analítica,

^c Leia-se: $5,247 \times 10^{-1}$

^d 50 x 50 nodos.

Fonte: O autor, 2017.

Para o segundo caso analisado, com o problema de absorvedor puro, são consideradas condições de contorno prescrita nas fronteiras esquerda e inferior ($\tilde{\psi}_{1,\frac{1}{2},1}^{in} = \tilde{\psi}_{4,\frac{1}{2},1}^{in} = \hat{\psi}_{1,1,\frac{1}{2}}^{in} = \hat{\psi}_{2,1,\frac{1}{2}}^{in} = 1.0$) e fonte $Q = 0$. Os resultados numéricos são apresentados na Tabela 14.

Tabela 14 - Resultados numéricos gerados pelos métodos no segundo caso analisado

Métodos	$\tilde{\psi}_{1,\frac{3}{2},1}^{out^a}$	$\delta(\%)$
SA ^b	4,752E-01 ^c	-
DD ^d	4,752E-01	8,796E-04
SGF-CN	4,421E-01	6,965E+00
MED-CN	4,421E-01	6,965E+00

^a Fluxo Angular : $cm^{-2}s^{-1}$,

^b Solução Analítica,

^c Leia-se: $4,752 \times 10^{-1}$

^d 50 x 50 nodos.

Fonte: O autor, 2017.

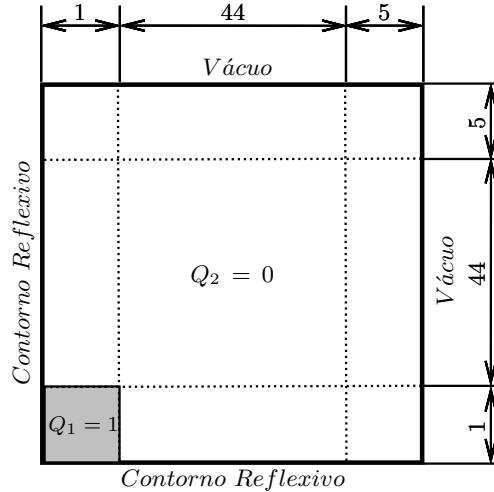
Analizando os resultados apresentados nas Tabelas 14 e 15, pode-se observar que os métodos numéricos apresentados resolvem o problema do absorvedor puro. O método de malha fina *DD* com o refinamento da malha de 50 x 50 nodos por região, aproxima os resultados numéricos da solução analítica (DOMÍNGUEZ, 2006). Os métodos nodais,

testados com uma com uma malha de 1×1 nodos por região apresentam resultados com desvios relativos menores que 7%. O cálculo dos termos de fuga transversal, nestes métodos, são aproximados por constantes. Esses desvios relativos podem ser atenuados se fizer uma melhor aproximação para os termos de fuga transversal.

5.2.2 Problema–Modelo N° 2 em geometria bidimensional

O problema-modelo N° 2 considera um domínio heterogêneo com dimensões de $100\text{ cm} \times 100\text{ cm}$, tendo uma fonte unitária isotrópica de nêutrons, $Q_1 = 1$, no centro rodeada por um material de blindagem, $Q_2 = 0$ considerando espalhamento linearmente anisotrópico (BARROS; LARSEN, 1992). A Figura 24 (não desenhada em escala), apresenta um quarto desta configuração com as condições de contorno consideradas para realizar a modelagem.

Figura 24 - Configuração do Problema Modelo N° 2 (BARROS; LARSEN, 1992)



Fonte: Adaptado de BARROS; LARSEN, 1992.

A Tabela 15 lista os valores dos parâmetros físico-materiais em cada zona material. Este experimento consiste em determinar as fugas dos nêutrons através dos contornos direito e superior do domínio da Fig. 24. O critério de convgência requer que o desvio relativo entre duas estimativas consecutivas para o fluxo escalar nos grupos de energia nas faces dos nodos do domínio, não seja maior que 10^{-7} .

Na Tabela 16 são mostrados os resultados numéricos dos cálculos das fugas pelos contornos direito e superior junto aos desvios relativos percentuais $\delta_S(\%)(\delta_D(\%))$ para os métodos *SGF – CN* e *SDM – CN*, utilizando como referência o valor obtido com o método *DD* usando uma malha de $20 \times 880 \times 100$ nodos na direção de x e y . Para o

Tabela 15 - Parâmetros físico-materiais do
Problema–Modelo 2

Zona material	$\sigma_T(cm^{-1})$	$\sigma_S^{(0)}(cm^{-1})$	$\sigma_S^{(1)}(cm^{-1})$
1	0,80	0,40	0,20
2	1,00	0,95	0,50

Fonte: O autor, 2018.

cálculo dos desvios relativos percentuais $\delta(\%)$, em ambos casos, foi usada a Equação (75)

$$\delta(\%) = \left| \frac{S_{DD} - S_m}{S_{DD}} \right| \times 100, \quad (75)$$

onde S_{DD} , é o valor da fuga de nêutrons obtido com o método DD , usado como referência, e S_m representa o valor da fuga de nêutrons gerado por cada um dos métodos usados para calcular tais fugas nos contornos especificados.

Tabela 16 - Fugas dos nêutrons^a pelos contornos da configuração representada na Fig. 24

Grade espacial $\Omega_x \times \Omega_y$	Método	Fugas pelo Contorno superior	$\delta_S(\%)^b$	Fugas pelo Contorno direito	$\delta_D(\%)$
20x880x100	DD	4,99400E-06 ^c	–	4,99400E-06	–
1x17x2	SGF-CN	4,88894E-06	2,1039	4,88894E-06	2,1039
	MED-CN	5,13538E-06	2,8310	5,13538E-06	2,8310
1x26x3	SGF-CN	4,94060E-06	1,0693	4,94060E-06	1,0693
	MED-CN	5,05927E-06	1,3070	5,05927E-06	1,3070
1x44x5	SGF-CN	4,97479E-06	0,3847	4,97479E-06	0,3847
	MED-CN	4,97479E-06	0,3847	4,97479E-06	0,3847
2x70x8	SGF-CN	4,98534E-06	0,1735	4,98534E-06	0,1735
	MED-CN	5,03252E-06	0,7714	5,03252E-06	0,7714
2x88x10	SGF-CN	4,98905E-06	0,0991	4,98905E-06	0,0991
	MED-CN	4,98905E-06	0,0991	4,98905E-06	0,0991

^a Fugas dos nêutrons : $cm^{-2} s^{-1}$,

^b Desvio relativo percentual,

^c Leia-se: $4,99400 \times 10^{-6}$.

Fonte: O autor, 2018.

Como pode ser observado, na Tabela 16 os resultados obtidos para as fugas em ambos contornos são simétricos e à medida que a grade espacial torna-se mais fina, os resultados gerados por ambos métodos de malha grossa, convergem para o mesmo resultado. Os valores para os desvios relativos percentuais dos métodos $SGF - CN$ e $SDM - CN$

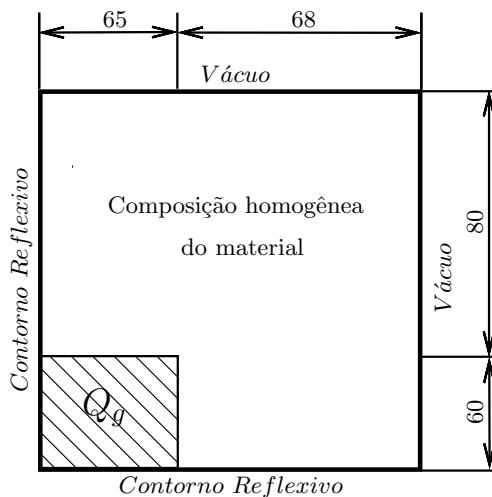
ao compará-los com o método *DD* são valores menores que o 3%.

5.2.3 Problema–Modelo N° 3 em geometria bidimensional

O terceiro problema–modelo, é um experimento de fonte fixa, meio absorvedor, que foi sugerido pelo Comitê de Problemas Padrão da Argonne Code Center e modela uma situação realística de blindagem (MENEZES, 2012). Este problema foi designado para proporcionar rigorosos testes aos códigos de transporte de nêutrons em geometria bidimensional com dois grupos de energia (DIAS, 1980).

A geometria do problema é ilustrada na Figura 25. As seções de choque macroscópicas para o material homogêneo do sistema e a densidade da fonte aparecem listadas na Tabela 17.

Figura 25 - Configuração do Problema Modelo N° 3 (OTTO, 1983)



Fonte: Adaptado de OTTO, 1983.

Para modelar este problema utilizando o método *MED-CN*, foi utilizada uma grade de discretização espacial definida como segue na direção de *x*, onde a região com a fonte espacial uniforme ($0 \leq x \leq 65$) foi dividida em 13 nodos e a região sem fonte ($65 \leq x \leq 133$) em 14 nodos. Da mesma forma, na direção da variável espacial *y*, foi dividida em 12 nodos na região com fonte ($0 \leq y \leq 60$) e 16 nodos na região sem fonte ($60 \leq y \leq 140$).

Para comparar os resultados obtidos pelo método *MED-CN*, são utilizados os resultados informados para este problema por Dias (1980) usando os códigos *DOT-II* e *TWOTRAN*, junto aos resultados do método *SGF-CN* reportados por Menezes (2012). A Tabela 18 mostra os resultados numéricos obtidos para a fuga total para ambos grupos

Tabela 17 - Componentes das seções de choque
macroscópicas (cm^{-1}) e densidade da
fonte($neutrons/cm^3$) para o Problema-
Modelo N° 3 em geometria bidimensional

	$g = 1$	$g = 2$
σ_{T_g}	0,092104	0,100877
Q_g	0,006546	0,017701
$\sigma_{s'_{g \rightarrow g}}^{(0)} (cm^{-1})$		
$g' = 1$	0,006947	0,023434
$g' = 2$	0,000000	0,004850

Fonte: Adaptado de OTTO, 1983.

de energia, $J_+^{T_g}$, à direita do sistema representado na Figura 25. Os resultados listados em Dias (1980) para o código *TWOTRAN* considerando uma grade de discretização espacial de 6804 nodos, $(39 \times 42) \times (36 \times 48)$, foram usados como referência para o cálculo do desvio relativo percentual dos métodos abordados neste experimento usando uma grade de discretização espacial de 756 nodos, $(13 \times 14) \times (12 \times 16)$. Foram considerados os conjuntos de quadraturas angulares de simetria de nível de ordens S_8 e S_{12} . Como pode ser observado

Tabela 18 - Fuga dos nêutrons^a pelo contorno direito

		$J_+^{T_g}$				
S_N	g	Referencia de malha fina	<i>TWOTRAN</i>	<i>DOT-II</i>	<i>SGF-CN</i>	<i>MED-CN</i>
8	1	5,7400E-04 ^b	5,0000E-04 (12,8920 %) ^c	4,9900E-04 (13,0662 %)	5,4744E-04 (4,6272 %)	5,4744E-04 (4,6279 %)
	2	9,2100E-04	8,0000E-04 (13,1379 %)	7,7500E-04 (15,8523 %)	8,7832E-04 (4,6341 %)	8,7832E-04 (4,6346 %)
12	1	5,5700E-04	4,9600E-04 (10,9515 %)	4,9900E-04 (10,4129 %)	5,4833E-04 (1,5566 %)	5,5360E-04 (0,6110 %)
	2	8,9100E-04	7,7600E-04 (12,9068 %)	7,7500E-04 (13,0191 %)	8,7868E-04 (1,3827 %)	8,9028E-04 (0,0806 %)

^a Fugas dos nêutrons : $cm^{-2} s^{-1}$,

^b Leia-se: $5,7400 \times 10^{-4}$,

^c Desvio relativo percentual .

Fonte: O autor, 2018.

na Tabela 18, os desvios relativos percentuais dos resultados gerados pelo método *MED-CN* para a fuga pelo contorno direito, foram sempre menores que os desvios relativos gerados pelos códigos *DOT-II* e *TWOTRAN* similar ao comportamento do método *SGF*. Pode ser observado também que os desvios relativos percentuais dos resultados do método *MED-CN* diminuíram com o aumento da quadratura da simetria de nível.

CONCLUSÕES E PERSPECTIVAS

Neste trabalho de tese foi descrita, desenvolvida e testada uma nova metodologia de malha grossa da classe dos métodos espectronodais na formulação S_N , para problemas de transporte de nêutrons em geometria cartesiana. Para tal, foram desenvolvidos o *Método Espectral Determinístico (MED)* para os problemas unidimensionais e o *Método Espectral Determinístico - Constant Nodal (MED-CN)* para a geometria bidimensional.

O método *MED* foi aplicado a problemas unidimensionais, multigrupo de energia, considerando espalhamento com grau arbitrário de anisotropia, L , como pode ser observado na Seção 5.1. Foram considerados problemas de fonte fixa, observando que em todos os testes realizados, apenas foram obtidos autovalores e autovetores reais na análise espectral das soluções das equações de transporte de nêutrons na formulação das ordenadas discretas S_N . Esta nova metodologia gerou também soluções numéricas, para os problemas modelos considerados em geometria unidimensional, completamente livres de erros de truncamento espacial, independentemente da grade de discretização espacial utilizada, coincidindo estes com os valores apresentados por (BARROS, 1990), (BARROS; LARSEN, 1990) e (BARROS; LARSEN, 1991). Os resultados numéricos do método *MED*, coincidem com os obtidos a partir da solução analítica do problema, desconsiderando os erros de arredondamento da aritmética finita computacional. Da mesma forma, gerou os mesmos resultados que os métodos espectronodais *SGF* e *MR*, para uma grade de discretização espacial constituída de um nodo por região.

Uma das diferenças entre o método *MED* e o método *SGF*, é a simplicidade na implementação do primeiro. Começando com o desenvolvimento algébrico das equações que constituem o método, onde não é preciso utilizar as equações auxiliares que são usadas pelo *SGF*, resultando num menor esforço algébrico na implementação do código computacional. Esta simplificação do algoritmo de solução para os problemas S_N faz com que o conceito das varreduras ou iterações do método *MED* sejam substancialmente diferentes das varreduras de transporte empregadas pelos outros métodos de transporte de nêutrons citados nesse trabalho de tese. No entanto, para as simulações que utilizam a malha grossa, o tempo de execução para os métodos nodais são praticamente os mesmos. O método *MED* possui a mesma precisão, estabilidade e consistência apresentada pelos outros métodos de malha grossa *SGF* e *MR*, para os casos de estudo analisados. Aqui foram apresentadas algumas simulações fixando a ordem par de algumas quadraturas, mas está implementado no aplicativo computacional um gerador de quadraturas com ordem arbitrária, para gerar os nodos e pesos para quadratura de Gauss-Legendre.

O método *MED* não pode ser aplicado de forma direta a problemas S_N multidimensionais de tal modo a gerar soluções numéricas livres de erros de truncamento espacial. Portanto, nesta tese foi aplicado o método *MED* para resolver numericamente as

equações S_N nodais integradas transversalmente. Desta forma, foi arquitetado o método denominado *MED–CN* para problemas S_N em geometria bidimensional rectangular, considerando espalhamento linearmente anisotrópico. Neste método, a única aproximação realizada é nos termos correspondentes às fugas transversais das equações S_N integradas transversalmente, os quais são considerados constantes.

Como pode ser observado na Seção 5.2 para a solução do método *MED–CN* foram considerados problemas de fonte fixa, observando que nos problemas resolvidos, apenas foram obtidos autovalores e autovetores reais na análise espectral das equações S_N integradas transversalmente nas direções coordenadas x e y em um nodo de discretização espacial. Estes autovalores calculados são numéricamente os mesmos nas direções x e y . Os resultados gerados pelo método *MED–CN* apresentaram menor sensibilidade à grade de discretização espacial; conforme aos experimentos numéricos apresentados na Seção 5.2.

Analizando os resultados apresentados para os problemas em geometria bidimensional, pode-se observar que, os métodos nodais, *MED–CN* e *SGF–CN*, testados com uma malha grossa de 1 x 1 nodo por região, para o problema de absorvedor puro, apresentam resultados para os fluxos angulares, com desvios relativos menores que 7%, utilizando como referência a solução analítica do problema. No problema de cálculo das fugas dos nêutrons através dos contornos direito e superior, considerando-se um domínio heterogêneo, o método *MED–CN* apresenta resultados para os desvios relativos percentuais, menores que 3%, igual que o método *SGF–CN*, quando comparados às fugas obtidas pelo método *DD*. Os resultados para as fugas pelo contorno direito utilizando o método *MED–CN* no problema modelo em geometria bidimensional com fonte fixa num meio absorvedor foram sempre menores que os desvios relativos gerados pelos códigos usados como referências para fazer as comparações.

No cálculo dos termos de fuga transversal, no método *MED–CN*, estes são aproximados por constantes. Esses desvios relativos podem ser atenuados se for feita uma melhor aproximação para os termos de fuga transversal.

Foi verificado, através da resolução de problemas–modelo unidimensionais e bidimensionais, que uma das principais vantagens da utilização dos métodos *MED* e *MED–CN*, respectivamente, é dada pela simplicidade no desenvolvimento algébrico das equações que constituem os métodos o que facilita a implementação no código computacional.

Buscando uma maior eficiência e ganho de tempo computacional utilizando os métodos espetronodais aqui desenvolvidos, propõe–se considerar o desenvolvimento de um código paralelizado. Como continuação deste trabalho, sugere–se também, realizar uma investigação, simulando problemas multidimensionais em geometria cartesiana, multigrupos de energia, com grau de anisotropia arbitrários, aproximando os termos de fuga transversal por funções que aumentem a precisão dos resultados numéricos, ou seja, aproximações lineares ou exponenciais, podendo–se analisar o uso de outras quadraturas

numéricas além da quadratura de simetria de nível (LQ_n) (BARROS, 1990) (DOMÍNGUEZ, 2006) (LEWIS; MILLER, 1993). Para trabalhos futuros também é considerado o desenvolvimento de uma metodologia com aplicação em problemas de autovalor para cálculos globais de reatores nucleares.

REFERÊNCIAS

- ABREU, M. P. de. *Métodos Determinísticos Livres de Aproximações Espaciais para a Solução Numérica Dominante de Problemas de Autovalor Multiplicativo na Formulação de Ordenadas Discretas da Teoria do Transporte de Nêutrons*. Tese (Doutorado) — COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil., 1996.
- BADRUZZAMAN, A. Nodal methods in transport theory. In: *Advances in nuclear science and technology*. New York, USA: Plenum Press, 1990. v. 21, cap. 3.
- BARICELLO, L. B.; SIEWERT, C. E. A discrete-ordinates solution for a non-grey model with complete frequency redistribution. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, v. 62, n. 2, p. 665–675, 1999.
- BARROS, R.; LARSEN, E. A numerical method for one-group slab-geometry discrete ordinates problems with no spatial truncation error. *Nuclear Science and Engineering*, n. 104, p. 199—208, 1990.
- BARROS, R.; LARSEN, E. A numerical method for multigroup slab-geometry discrete ordinates problems with no spatial truncation error. *Transport Theory and Statistical Physics*, v. 20, n. 5&6, p. 441–462, 1991.
- BARROS, R. C. *A Spectral Nodal Method for the Solution of Discrete Ordinates Problems in one and two Dimensional Cartesian Geometry*. Tese (Doutorado) — The University of Michigan, Ann Arbor, Michigan, United States., 1990.
- BARROS, R. C.; LARSEN, E. W. A spectral nodal method for one-group X, Y -geometry discrete ordinates problems. *Nuclear Science and Engineering*, v. 111, n. 1, p. 34–45, 1992.
- BARTELS, M. D. Aumenta consumo mundial de combustíveis fósseis. *Deutsche Welle, Brasil* — Ciência e Saúde, 03 2013. Disponível em: <http://www.dw.com/pt-br/aumenta-consumo-mundial-de-combustiveis-fosseis/a-16654031>.
- BRIESMEISTER, J. F. (Ed.). *MCNPTM—A General Monte Carlo N-Particle Transport Code*. Version 4c. Los Alamos National Laboratory, 2000.
- BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. *Numerical Analysis*. 9th. ed. Boston, MA, USA: Brooks/Cole, Cengage Learning, 2010.
- CACUCI, D. G. e. (Ed.). *Handbook of Nuclear Engineering*. New York, USA: Springer Science+Business Media, 2010.
- CARLSON, B. G.; LATHROP, K. D. *Transport Theory - the method of discrete ordinates*. New York, USA: John Wiley & Sons, Inc, 1968.
- CASE, K. M.; ZWEIFEL, P. F. *Linear transport theory*. USA: Reading, Mass., Addison-Wesley Pub. Co, 1967. (Addison-Wesley series in nuclear engineering).
- CHANDRASEKHAR, S. *Radiative Transfer*. NY,USA: Dover Publications., 1960.

DIAS, A. F. *Estudo e aplicação dos códigos ANISN e DOT-II em problemas de física de reatores*. Dissertação (Mestrado) — Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, Brasil., 1980.

DOMÍNGUEZ, D. S. *Método Espectronodal Linear para Problemas de Transporte de Nêutrons na Formulação das Ordenadas Discretas em Geometria Bidimensional Cartesiana*. Tese (Doutorado) — IPRJ/UERJ, Nova Friburgo, RJ, Brasil., 2006.

DOMÍNGUEZ, D. S.; BARROS, R. C. The spectral green's function linear-nodal method for one-speed x, y-geometry discrete ordinates deep penetration problems. *Annals of Nuclear Energy*, v. 34, n. 12, p. 958—966, 2007.

DUDERSTADT, J. J.; HAMILTON, L. *Nuclear Reactor Analysis*. USA: John Wiley & Sons, Inc., 1976.

DUDERSTADT, J. J.; MARTIN, W. R. *Transport Theory*. New York, USA: Wiley-Interscience, 1979.

FIGUEIRA, S. R. F. Crescimento da demanda e oferta de combustíveis automotivos (gasolina e etanol) no brasil e seu impacto na emissão de gases do efeito estufa entre 1995 e 2014. *Fórum Ambiental da Alta Paulista*, v. 11, n. 2, p. 95–111, 2015.

GARCIA, R. D. M.; SIEWERT, C. E. . Multislab multigroup transport theory with 1 th order anisotropic scattering. *Journal of Computational Physics.*, v. 50, p. 181–192, 1983.

GUIDA, M. R. *Método numérico de Matriz Resposta acoplado a um esquema de reconstrução espacial analítica para cálculos unidimensionais de transporte de nêutrons na formulação de ordenadas discretas multigrupo de energia com fonte fixa*. Dissertação (Mestrado) — IPRJ/UERJ, Nova Friburgo, RJ, Brasil., 2011.

HAMMERSLEY, J. M.; HANDSCOMB, D. C. *Monte Carlo Methods*. Vii + 178 s, preis: 25 s. London, UK: Methuen & Co, 1964.

LAURENCE, R. D. Progress in nodal methods for the neutron diffusion and transport equations. *Progress in Nuclear Energy*, v. 17, p. 271–301, 1986.

LEWIS, E. E.; MILLER, W. F. *Computational methods of neutron transport*. Illinois, USA: American Nuclear Society, 1993.

MENEZES, W. A. *Métodos espectronodais para cálculos de partículas neutras com fonte fixa na formulação de ordenadas discretas e multigrupo de energia*. Tese (Doutorado) — IPRJ/UERJ, Nova Friburgo, RJ, Brasil., 2012.

MOHAMAD, A. A. Local analytical discrete ordinate method for the solution of the radiative transfer equation. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, v. 39, n. 9, p. 1859–1864, 1996.

OLIVA, A.; ALVES FILHO, H.; SILVA, D. J.; GARCÍA, C. R. Computer Deterministic Modelling of Nuclear Problems using Nodal Methods. In: *Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematicsl-CNMAC 2016*: Congresso nacional de matemática aplicada e computacional. Gramado, RS, Brazil: Sociedade de Matemática Aplicada e Computacional(SBMAC), 2016. (ISSN: 2359-0793).

OLIVA, A.; ALVES FILHO, H.; SILVA, D. J.; GARCÍA, C. R. Spectral nodal methodology for multigroup slab-geometry discrete ordinates neutron transport problems with linearly anisotropic scattering. In: *International Nuclear Atlantic Conference-INAC 2017*. Belo Horizonte, MG, Brazil: Associação Brasileira de Energia Nuclear (ABEN), 2017. (ISBN: 978-85-99141-07-6).

OLIVA, A.; ALVES FILHO, H.; SILVA, D. J.; GARCÍA, C. R. The spectral nodal method applied to multigroup S_N neutron transport problems in one-dimensional geometry with fixed-source. *Progress in Nuclear Energy*, v. 105, p. 106–113, 2018.

OTTO, A. C. *Estudo e aplicação dos códigos ANISN e DOT 3.5 a problemas de blindagem de radiações nucleares*. Dissertação (Mestrado) — Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares, Universidade de São Paulo, Brasil., 1983.

Power Reactor Information System(PRIS)/IAEA. *Overview*. 2017. Access date: 15 de novembro 2017. Disponível em: <<http://https://www.iaea.org/pris/>>.

SECRETARÍA DE MEDIO AMBIENTE Y RECURSOS NATURALES. *Cambio climático. Ciencia, evidencia y acciones*. México D.F, México: SEMARNAT, 2009. 93 p.

SIEWERT, C. E. The F_N method for solving radiative transfer problems in plane geometry. *Astrophysics and Space Science*, v. 58, n. 2, p. 131–137, 1978.

SILVA, D.; LYDIA, E.; GUIDA, M.; ZANI, J.; FILHO, H.; BARROS, R. Analytical methods for computational modeling of fixed-source slab-geometry discrete ordinates transport problems: Response matrix and hybrid S_N . *Progress in Nuclear Energy*, v. 69, p. 77–84, 2013.

SILVA, D. J. *Um método espectral para problemas de autovalor na teoria de transporte de nêutrons segundo a formulação de ordenadas discretas e multigrupo de energia*. Tese (Doutorado) — IPRJ/UERJ, Nova Friburgo, RJ, Brasil., 2016.

STACEY, W. *Nuclear Reactor Physics*. NY, USA: John Wiley & Sons, Inc, 2001.

WALTERS, W. F. The relation between finite element methods and nodal methods in transport theory. *Progress in Nuclear Energy*, v. 18, n. 1/2, p. 21–26, 1986.

YAVUZ, M. A One-D simplified Discrete-Ordinates Method with No Spatial Truncation Error. *Annals of Nuclear Energy*, v. 22, n. 3/4, p. 203–214, 1995.