



**UNIVERSIDADE ESTADUAL DE SANTA CRUZ
PRO-REITORIA DE PESQUISA E PÓS-GRADUAÇÃO**

**PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MODELAGEM COMPUTACIONAL
EM CIÊNCIA E TECNOLOGIA**

ROGÉRIO VINÍCIUS MATOS ROCHA

**MÉTODO ESPECTRO NODAL DE GRADES COMPOSTAS
NA FORMULAÇÃO DE ORDENADAS DISCRETAS PARA
PROBLEMAS DE AUTOVALOR EM GEOMETRIA X,Y E
APROXIMAÇÃO DE UMA VELOCIDADE**

**ILHÉUS-BA
2016**

ROGÉRIO VINÍCIUS MATOS ROCHA

**MÉTODO ESPECTRO NODAL DE GRADES COMPOSTAS
NA FORMULAÇÃO DE ORDENADAS DISCRETAS PARA
PROBLEMAS DE AUTOVALOR EM GEOMETRIA X,Y E
APROXIMAÇÃO DE UMA VELOCIDADE**

Dissertação apresentada ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia da Universidade Estadual de Santa Cruz, como parte das exigências para obtenção do título de Mestre em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia.

Orientador: Prof. Dr. Dany Sanchez Dominguez

ILHÉUS-BA
2016

R672 Rocha, Rogério Vinícius Matos.
 Método espectro nodal de grades compostas na
 formulação de ordenadas discretas para problemas
 de autovalor em geometria X, Y e aproximação de
 uma velocidade / Rogério Vinícius Matos Rocha. –
 Ilhéus, BA: UESC, 2016.
 127 f. : il.

 Orientador: Dany Sanchez Dominguez.
 Dissertação (Mestrado) – Universidade Estadual
 de Santa Cruz. Programa de Pós-Graduação em
 Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia.
 Inclui referências e apêndices.

 1. Teoria do transporte. 2. Teoria do transporte –
 Método das ordenadas discretas. 3. Teoria do trans-
 porte de nêutron. 4. Reatores nucleares. 5. Autova-
 lores. I. Título.

CDD 530.15

ROGÉRIO VINÍCIUS MATOS ROCHA

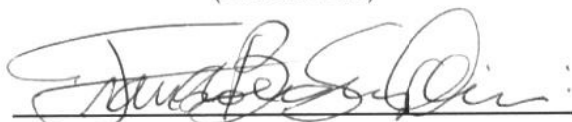
**MÉTODO ESPECTRO NODAL DE GRADES COMPOSTAS
NA FORMULAÇÃO DE ORDENADAS DISCRETAS PARA
PROBLEMAS DE AUTOVALOR EM GEOMETRIA X,Y E
APROXIMAÇÃO DE UMA VELOCIDADE**

Ilhéus-BA, 27/07/2016

Comissão Examinadora



Prof. Dr. Dany Sanchez Dominguez
UESC
(Orientador)



Prof. Dr. Francisco Bruno Souza Oliveira
UESC



Prof. Dr. Hermes Alves Filho
IPRJ/UERJ

Dedico este trabalho à minha família e amigos!

Agradecimentos

Inicio meus agradecimentos, agradecendo a todos que de alguma maneira sempre contribuíram para a minha formação profissional, social e moral.

Em especial quero agradecer a Deus, por ter me dado força e saúde para que pudesse alcançar mais uma etapa de minha carreira profissional.

Agradeço também à minha família por compreender a importância e o significado desta minha nova conquista, me dando suporte incondicional para que este sonho se tornasse realidade.

Quero agradecer ao Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia, seu corpo docente em especial ao coordenador Francisco Bruno, e à Universidade Estadual de Santa Cruz pela oportunidade e confiança. Agradeço ainda, às agências de fomento em pesquisas Capes e FAPESB, por terem dado suporte a esta pesquisa concedendo a bolsa de estudos.

Um agradecimento especial ao meu orientador Dany Sanchez Dominguez pela amizade e confiança, pelos valiosos ensinamentos e orientações recebidos, pelo exemplo de profissionalismo, e pelo apoio e incentivo incondicional.

Agradeço ainda, aos professores que tem ajudado em minha caminhada acadêmica desde a graduação, contribuindo com apoio e incentivo. Um agradecimento especial a Prof^a Susana Marrero Iglesias, pela amizade e incentivo. Quero agradecer também ao Prof. Marcelo Ossamu Honda que tem contribuído grandiosamente para minha formação com os diversos favores que tem prestado à minha pessoa, tais como disponibilizar um espaço de trabalho, entre outras contribuições.

Deixo aqui meus agradecimentos aos Profs. César Alberto Bravo, Jorge Lima e Aprígio Bezerra, e aos técnicos administrativos Eduardo (Duca), Carlos e Natália.

Agradeço ao Prof. Hermes Alves Filho, pelas valiosas contribuições feitas ao desenvolvimento deste trabalho.

Meus agradecimentos aos colegas de curso, pelos ótimos momentos de convívio profissional e pessoal, em especial a Alexandro Silva, Anderson Rodrigues, Gabriel Mello, João Gabriel Ganem, Léo Biscassi, Marlesson Santana, Rodrigo Mendonça, Tarcila Matos e Victor Neres.

“Que os vossos esforços desafiem as impossibilidades, lembrai-vos de que as grandes coisas do homem foram conquistadas do que parecia impossível.”

Charles Chaplin.

Resumo

Nesta dissertação, propomos o método espectro-nodal de grades múltiplas com aproximação constante (CSG-SD-CN, Composite Spatial Grid - Spectral Diamond - Constant Nodal) para resolver numericamente problemas de autovalor na formulação de ordenadas discretas e regime estacionário, com fonte de espalhamento isotrópica, e aproximação de uma velocidade em geometria X,Y. O objetivo desta pesquisa é utilizar métodos de grades compostas em cálculos de criticalidade com modelos de transporte, com aplicação no projeto e a exploração de reatores nucleares. O método CSG-SD-CN discretiza o domínio de cálculo em duas etapas. Na primeira utiliza-se uma grade espacial retangular grossa com uma célula por região material do domínio. Em seguida, integramos transversalmente as equações da formulação S_N , separadamente na direção X e na direção Y no interior de cada célula, e depois introduzimos aproximações constantes para os termos de fuga transversal em nível de região, desta forma obtemos dois problemas “unidimensionais”. Na segunda etapa de discretização, usamos uma grade espacial fina para discretizar cada problema unidimensional, que pode então ser resolvido separadamente. Como os problemas unidimensionais estão acoplados pelos termos de fuga transversal, utilizamos uma técnica iterativa de direções alternadas para convergir à solução numérica. Para ilustrar, a precisão e o desempenho computacional do método proposto, apresentamos resultados para problemas homogêneos e heterogêneos, mostrando a eficácia do método proposto no cálculo de grandezas integrais.

Palavras-chave: Equação de Transporte, Ordenadas Discretas, Problema de Autovalor, Grades Compostas.

Composite Spatial Grid Spectral Diamond Constant Nodal Method for the Solution of Eigenvalue Discrete Ordinates Problems in X-Y Cartesian Geometry and One-Speed Approximation

Abstract

We describe in this work a composite spatial grid method that uses a spectral-nodal method and a constant approximation for the transversal leakage terms to solve numerically the neutron transport equation for one-speed eigenvalue problems in X-Y Cartesian geometry in the discrete ordinates (S_N) formulation. In this formulation, we consider a stationary mathematical model with isotropic scattering source. The aims of this research is to use a composite spatial grid method in criticality calculations for nuclear reactor projects. The composite spatial grid method is characterized by discretize the domain in two steps. Firstly, we discretized the domain with a coarse mesh corresponding with material regions, where we integrated transversely each region cell in each axis x and y . Thus, we obtain two one-dimensional problems coupled by transversal leakage terms, that can solved separately. In second step, we discretized each cell with a finer mesh for each one-dimensional problem. To illustrate the accuracy and computational performance, we simulate homogeneous and heterogeneous problems (benchmarks) and compare the results with another methods available in the literature.

Keywords: The Transport Equation, Discrete Ordinates, Eigenvalue Problems, Composite Spatial Grid.

Lista de figuras

Figura 1 – Variáveis espaciais e angulares na caracterização do nêutron.	8
Figura 2 – Partículas em dV viajando no cone $d\hat{\Omega}$ sobre a direção $\hat{\Omega}$	9
Figura 3 – Vetor $\hat{n}$ normal à superfície dS	11
Figura 4 – Anisotropia na densidade angular próximo à fronteira do domínio ou de uma fonte de nêutrons.	12
Figura 5 – Densidades total e parcial da corrente de nêutrons.	14
Figura 6 – Um volume arbitrário V com área de superfície S	16
Figura 7 – Representação do domínio unidimensional.	24
Figura 8 – Representação do domínio bidimensional.	25
Figura 9 – Simetria das ordenadas discretas da quadratura <i>Gauss-Legendre</i> para o problema unidimensional.	27
Figura 10 – Representação das direções angulares da quadratura de simetria de níveis S_2 para o problema bidimensional.	30
Figura 11 – Representação das direções angulares da quadratura de simetria de níveis S_4 para o problema bidimensional.	30
Figura 12 – Domínio discretizado do problema unidimensional.	32
Figura 13 – Representação da distribuição de incógnitas em uma célula arbitrária Γ_i unidimensional.	34
Figura 14 – Representação do fluxo angular médio em uma célula arbitrária Γ_i unidimensional para o método SD.	35
Figura 15 – Representação das matrizes simétricas por blocos 2×2 dos parâmetros espectrais $\Theta_{m,n}$	37
Figura 16 – Algoritmo computacional do método SD.	39
Figura 17 – Domínio bidimensional retangular discretizado.	40
Figura 18 – Representação da distribuição de incógnitas em uma célula arbitrária $\Gamma_{i,j}$ bidimensional.	42
Figura 19 – Representação do fluxo angular médio em uma célula arbitrária $\Gamma_{i,j}$ bidimensional no eixo x para o método DD.	43
Figura 20 – Representação do fluxo angular médio em uma célula arbitrária $\Gamma_{i,j}$ bidimensional no eixo y para o método DD.	44
Figura 21 – Algoritmo computacional do método DD.	46
Figura 22 – Representação do fluxo angular médio em uma célula arbitrária $\Gamma_{i,j}$ bidimensional no eixo x para o método SD-SGF-CN.	51
Figura 23 – Representação do fluxo angular médio em uma célula arbitrária $\Gamma_{i,j}$ bidimensional no eixo y para o método SD-SGF-CN.	52

Figura 24 – Representação das matrizes simétricas por blocos 4×4 associadas aos parâmetros espectrais $\Theta_{m,n}^x$ e $\Theta_{m,n}^y$ das equações S_N bidimensionais.	54
Figura 25 – Algoritmo computacional do método SD-SGF-CN.	55
Figura 26 – Representação dos sentidos de varredura para o problema unidimensional.	57
Figura 27 – Representação dos sentidos de varredura para o problema bidimensional.	57
Figura 28 – Grade externa do método CSG-SD-CN sobre o domínio bidimensional retangular do problema.	62
Figura 29 – Representação das grandezas obtidas da integração transversal em y na região arbitrária $R_{i,j}$, equação dependente de x .	63
Figura 30 – Representação das grandezas obtidas da integração transversal em x na região arbitrária $R_{i,j}$, equação dependente de y .	64
Figura 31 – Representação das grandezas presentes na equação S_N integrada transversalmente dependente de x na região arbitrária $R_{i,j}$ com aproximação constante da fuga transversal.	65
Figura 32 – Representação das grandezas presentes na equação S_N integrada transversalmente dependente de y na região arbitrária $R_{i,j}$ com aproximação constante da fuga transversal.	65
Figura 33 – Representação das grades externas e internas utilizadas no domínio de interesse.	72
Figura 34 – Distribuição das incógnitas na grade espacial interna em x .	75
Figura 35 – Distribuição das incógnitas na grade espacial interna em y .	75
Figura 36 – Representação das grandezas envolvidas na equação auxiliar em uma célula arbitrária da grade interna Γ^x unidimensional para o método CSG-SD-CN.	76
Figura 37 – Representação das grandezas envolvidas na equação auxiliar em uma célula arbitrária da grade interna Γ^y unidimensional para o método CSG-SD-CN.	77
Figura 38 – Representação das matrizes simétricas por blocos 4×4 .	82
Figura 39 – Algoritmo computacional do método CSG-SD-CN.	90
Figura 40 – Geometria e condições de contorno do problema homogêneo A.	94
Figura 41 – Desvio relativo do coeficiente efetivo de multiplicação k_{eff} para o problema homogêneo A com múltiplas malhas.	96
Figura 42 – Número de operações aritméticas de ponto flutuante para o problema homogêneo A com múltiplas malhas.	97
Figura 43 – Geometria e condições de contorno do problema homogêneo B.	98
Figura 44 – Distribuição bidimensional do fluxo escalar de nêutrons no domínio do problema homogêneo B.	98

Figura 45 – Desvio relativo do coeficiente efetivo de multiplicação k_{eff} para o problema homogêneo B com múltiplas malhas.	100
Figura 46 – Número de operações aritméticas de ponto flutuante para o problema homogêneo B com múltiplas malhas.	102
Figura 47 – Geometria e condições de contorno do problema heterogêneo A. . .	103
Figura 48 – Desvio relativo do coeficiente efetivo de multiplicação k_{eff} para o problema heterogêneo A com múltiplas malhas.	105
Figura 49 – Desvio relativo da densidade de potência na região (d) para o problema heterogêneo A com múltiplas malhas.	107
Figura 50 – Número de operações aritméticas de ponto flutuante para o problema heterogêneo A com múltiplas malhas.	107
Figura 51 – Geometria e condições de contorno do problema heterogêneo B. . . .	108
Figura 52 – Distribuição bidimensional do fluxo escalar de nêutrons no domínio do problema heterogêneo B.	109
Figura 53 – Desvio relativo do coeficiente efetivo de multiplicação k_{eff} para o problema heterogêneo B com múltiplas malhas.	111
Figura 54 – Desvio relativo da densidade de potência na região (a) para o problema heterogêneo B com múltiplas malhas.	112
Figura 55 – Número de operações aritméticas de ponto flutuante para o problema heterogêneo B com múltiplas malhas.	113
Figura 56 – Representação das direções angulares para a quadratura S_2	124

Lista de tabelas

Tabela 1 – Valores das ordenadas discretas e seus respectivos pesos da quadratura de <i>Gauss-Legendre</i> para S_2 , S_4 e S_8	27
Tabela 2 – Valores das ordenadas discretas e seus respectivos pesos da quadratura de simetria de níveis para S_2 , S_4 e S_8	29
Tabela 3 – Principais características dos métodos SD-SGF-CN e CSG-SD-CN . .	60
Tabela 4 – Balanço de equações e incógnitas nos problemas unidimensionais . .	75
Tabela 5 – Propriedades físicas para os problemas homogêneos	93
Tabela 6 – Classificação das células espaciais da grade interna para os problemas homogêneos	93
Tabela 7 – Resultados do k_{eff} para o problema homogêneo A com diversas grades	95
Tabela 8 – Resultados da corrente neta de nêutrons na fronteira oeste do domínio para o problema homogêneo A com diversas grades	95
Tabela 9 – Resultados do k_{eff} para o problema homogêneo B com diversas grades	99
Tabela 10 – Resultados da corrente neta de nêutrons nas fronteiras norte e leste do domínio para o problema homogêneo B com diversas grades . . .	101
Tabela 11 – Propriedades físicas para problema heterogêneo A	104
Tabela 12 – Classificação das células espaciais da grade interna para o problema heterogêneo A	104
Tabela 13 – Resultados do k_{eff} para o problema heterogêneo A com diversas grades	105
Tabela 14 – Resultados da densidade de potência na região (d) para o problema heterogêneo A com diversas grades	106
Tabela 15 – Propriedades físicas para problema heterogêneo B	109
Tabela 16 – Classificação das células espaciais da grade interna para o problema heterogêneo B	109
Tabela 17 – Resultados do k_{eff} para o problema heterogêneo B com diversas grades	110
Tabela 18 – Resultados da densidade de potência na região (a) para o problema heterogêneo B com diversas grades	111

Lista de algoritmos

Algoritmo 1 – CSG-SD-CN - VARREDURA SI MODIFICADA NA DIREÇÃO x . . .	88
Algoritmo 2 – CSG-SD-CN - VARREDURA SI MODIFICADA NA DIREÇÃO y . . .	89

Sumário

1 – Introdução	1
2 – Fundamentação Teórica	7
2.1 Equação de transporte de nêutrons	7
2.1.1 Definições e grandezas físicas	8
2.1.2 Obtenção da equação de transporte	14
2.2 Formulação de ordenadas discretas	25
2.2.1 Equações S_N geometria unidimensional	26
2.2.2 Equações S_N geometria bidimensional	27
3 – Métodos Numéricos	31
3.1 Problema unidimensional	31
3.1.1 Método <i>Spectral Diamond</i>	35
3.2 Problema bidimensional	38
3.2.1 Método <i>Diamond Difference</i>	43
3.2.2 Método <i>Spectral Diamond - Spectral Green's Function - Constant Nodal</i>	47
3.3 Esquemas iterativos de solução numérica	56
4 – Método Espectro Nodal de Grades Compostas	60
4.1 Primeira etapa de discretização	61
4.2 Análise espectral	66
4.3 Segunda etapa de discretização	71
4.4 Equações auxiliares	76
4.5 Equações de varredura	83
4.6 Algoritmo computacional	86
5 – Resultados e Discussão	92
5.1 Problemas homogêneos	92
5.1.1 Problema modelo A	93
5.1.2 Problema modelo B	97
5.2 Problemas heterogêneos	102
5.2.1 Problema modelo A	103
5.2.2 Problema modelo B	108
6 – Conclusões e Trabalhos Futuros	114

Referências	116
Apêndices	120
APÊNDICE A – Cálculo de autovalores pela relação de dispersão	121
APÊNDICE B – Complemento do espectro das equações S_N	123
APÊNDICE C – Cálculo da densidade de potência	125
APÊNDICE D – Cálculo do livre caminho médio do nêutron	127

1 Introdução

Um dos maiores problemas enfrentados pela humanidade hoje é a iminência das mudanças climáticas provocadas pelo efeito estufa devido à liberação de grandes quantidades de dióxido de carbono na atmosfera. Por outro lado à demanda energética dos setores industriais, comerciais e residenciais cresce continuamente, este crescimento é indispensável para garantir a melhoria da qualidade de vida nos países em desenvolvimento. Neste contexto, garantir a geração de energia, preservando o meio ambiente, constitui um dos grandes desafios técnicos e éticos para os cientistas ([NEA-OCDE, 2014](#)).

Especificamente no Brasil enfrentamos um período de baixo crescimento econômico, motivado, entre outros fatores, pelos altos custos da energia. A prolongada estiagem e o baixo nível dos reservatórios nos últimos anos é uma situação gravíssima que preocupa as autoridades e instituições do setor de planejamento energético ([Empresa de Pesquisa Energética - EPE, 2007](#)). Para alavancar o crescimento econômico, e a manutenção do mesmo no longo prazo devemos contar com um suprimento energético confiável e eficiente. Entre as principais alternativas para atender a demanda por suprimento energético no Brasil está a energia nuclear. Uma fonte de alta potência, com baixo impacto ambiental e que não está sujeita a condições ambientais e eventos sazonais como os períodos de sol ou chuvas.

Estes argumentos motivaram reconhecidos ambientalistas, estadistas e público em geral a reavaliar seu posicionamento em relação à utilização de energia nuclear ou técnicas nucleares em geral. Nos últimos anos países com forte postura antinuclear revitalizaram seus programas nucleares. Este processo de renascimento da indústria nuclear teve um grande percalço no acidente de Fukushima em março de 2011, entretanto uma análise rigorosa do acidente mostra que o acidente não ocorreria nas usinas atualmente em construção ou em projeto ([FURLAN et al., 2016](#); [MING et al., 2016](#)). Na mesma linha o governo brasileiro retomou o programa nuclear reiniciando a construção de Angra III e incentivando o programa nuclear brasileiro por meio de diversas ações ([Empresa de Pesquisa Energética - EPE, 2007](#)). Em particular, planeja-se a construção de uma usina nuclear na região Nordeste envolvendo os estados de Bahia, Sergipe e Pernambuco.

Neste contexto é um dever da comunidade científica brasileira, impulsionar o uso pacífico da energia nuclear dando suporte as iniciativas governamentais, seja através da formação de recursos humanos ou desenvolvendo novas metodologias, técnicas, ferramentas ou processos, que auxiliam o desenvolvimento da indústria nuclear.

Por outro lado, o desenvolvimento dos novos projetos de reatores nucleares

devem oferecer soluções para os entraves atuais ao desenvolvimento da energia nuclear, eles são: (i) aprimorar a segurança operacional e a confiabilidade das instalações, (ii) diminuir os custos de construção e operacionais dos reatores nucleares, (iii) desenvolver e implantar tecnologias eficazes para o tratamento de rejeitos em médio e longo prazo, e (iv) garantir a não-proliferação de armas nucleares ([GIF-OCDE, 2014](#)). Dentre, estes desafios, desperta especial interesse o desenvolvimento de novas ferramentas que possam contribuir ao aumento da segurança em reatores nucleares.

A operação do reator nuclear deve garantir que a população de nêutrons migre dentro do núcleo do reator em condições controladas, ou seja, que não teremos fuga de radiação ao meio ambiente e que a integridade do reator seja preservada. Para este fim são realizados os cálculos de criticalidade onde os parâmetros multiplicativos do núcleo são avaliados para diferentes configurações geométricas, diversos tipos de combustível nuclear e inúmeras condições operacionais. A modelagem computacional é uma poderosa ferramenta para garantir a operação segura e confiável do reator, permitindo avaliar diversas condições operacionais com baixo custo.

A modelagem física do fenômeno de transporte de nêutrons descreve a migração de nêutrons no interior de um meio material considerando as probabilidades de interação com os núcleos do meio ([LEWIS, 2008](#)). Identificados os diferentes tipos de interação, estas probabilidades são obtidas mediante um árduo trabalho experimental. A seguinte etapa é conceber uma modelagem computacional do problema para podermos obter via simulação computacional a distribuição de nêutrons e os parâmetros multiplicativos no domínio de interesse. A modelagem de problemas de transporte de nêutrons pode ser feita usando duas abordagens: abordagem determinística ou abordagem probabilista. A abordagem determinística visa resolver de forma exata um modelo aproximado do problema; nela encontram-se a formulação de ordenadas discretas ([LEWIS; MILLER, 1984](#)), a aproximação de difusão ([DUDERSTADT, 1976](#)), e os aplicáveis métodos numéricos de diferenças finitas ([HOFFMAN; FRANKEL, 2001](#)), métodos de elementos finitos ([ZIENKIEWICZ et al., 2013](#)) e os métodos nodais ([BADRUZZAMAN, 1990](#)). Por outro lado, a abordagem probabilista visa obter uma solução aproximada do problema exato, e nela aparecem os métodos probabilísticos ou método de Monte Carlo ([HAGHIGHAT, 2014](#)).

A modelagem computacional considerando a escola determinística utiliza a equação de transporte de nêutrons ([OSBORN; YIP, 1966](#)), frequentemente denominada equação linearizada de *Boltzmann* devido à sua similaridade com a expressão obtida por *Ludwig Boltzmann* em conexão com a teoria da cinética dos gases ([BOLTZMANN, 1872](#)). A equação de transporte de nêutrons representa um balanço entre os fenômenos de produção e perda de partículas, sua formulação geral consiste em uma equação integro-diferencial parcial linear dependente de sete variáveis independentes: três espaciais x ,

y, z), duas angulares (μ, η), uma energética (E) e uma variável temporal (t), sendo a variável dependente o fluxo angular de nêutrons (φ). Pela complexidade intrínseca da equação de transporte de nêutrons, a solução analítica pode ser obtida para geometrias e situações físicas muito simples, geralmente carentes de valor prático. Na maioria dos casos técnicas de solução numérica devem ser utilizadas. Os métodos de solução numérica se aplicados à formulação geral, são também, muito complexos e, em geral de alto custo computacional.

Para gerarmos métodos de solução numérica eficientes, formulações simplificadas da equação de transporte de nêutrons devem ser utilizadas, estas formulações discretizam em etapas sucessivas as variáveis independentes, transformando a equação integro-diferencial em um sistema de equações lineares e algébricas; em seguida, utilizam diferentes técnicas de varredura para resolver os sistemas de equações obtidos. A dependência energética (E) é tratada utilizando a aproximação multigrupo (LEWIS; MILLER, 1984). As variáveis angulares (μ, η) podem ser discretizadas usando diferentes abordagens: a aproximação de difusão (BELL; GLASSTONE, 1970), a expansão em harmônicos esféricos, e a formulação de ordenadas discretas (CARLSON; LATHROP, 1968). As variáveis espaciais (x, y, z), podem ser discretizadas utilizando métodos de malha fina, como o método *Diamond Difference* (DD) (LEWIS; MILLER, 1984); métodos de malha média, como os métodos de elementos finitos, e métodos de malha grossa como os métodos nodais (LAWRENCE, 1986). A variável temporal (t) também pode ser discretizada por métodos de malha fina, média e grossa. Entretanto, neste trabalho nos concentraremos apenas em problemas estacionários, ou seja, independentes do tempo.

Nesta dissertação de mestrado utilizamos como modelo matemático para o problema de transporte de nêutrons a formulação S_N ou formulação de ordenadas discretas da equação de transporte de nêutrons, onde as direções de migração dos nêutrons são restringidas a um conjunto de M direções discretas, e fórmulas de quadraturas angulares são utilizadas para aproximar os termos integrais presentes no termo de fonte de espalhamento (AZMY; SARTORI, 2010). Em relação à discretização espacial é desejável por motivos de eficiência computacional a utilização de métodos de malha grossa, onde se incluem os métodos nodais. Os métodos nodais são baseados no procedimento de integração transversal, e em seguida os termos de fonte e de fuga transversal são aproximados por polinômios de baixa ordem. Os primeiros métodos nodais, utilizavam polinômios de ordem zero e de primeira ordem em suas aproximações (LAWRENCE; DORNING, 1980; WALTERS; O'DELL, 1980). O primeiro destes métodos foi o método nodal constante (CCN – *Constant Constant Nodal*) onde os termos de fonte de espalhamento e de fuga transversal são aproximados por constantes. Outro método nodal convencional amplamente utilizado foi o método nodal linear (LLN – *Linear Nodal*) onde polinômios de primeiro grau são utilizados para aproximar os termos de fonte de espalhamento e de fuga transversal (LAWRENCE, 1986; AZMY, 1988).

Uma evolução dos métodos nodais convencionais foram os métodos espectro-nodais (SGF – *Spectral Green's Function*), onde apenas os termos de fuga transversal são aproximados, os termos de fonte de espalhamento são tratados de forma exata. A gênese desta família de métodos remonta-se ao trabalho (LARSEN, 1986), onde primeiramente define-se um “espectro” para um esquema em diferenças dando lugar ao método *Diamond Difference Extended* (DDE). O primeiro método espectro-nodal foi proposto em (BARROS; LARSEN, 1991) e permitia resolver problemas unidimensionais de fonte fixa na formulação S_N gerando soluções completamente livres de erro de truncamento espacial.

O primeiro método desta família para cálculos multidimensionais na formulação de ordenadas discretas foi proposto por (BARROS; LARSEN, 1992) e chamado método espectro-nodal constante (SGF-CN) por utilizar uma aproximação constante para os termos de fuga transversal. A partir de então ocorreram diversos avanços nos métodos espectro-nodais para problemas de fonte fixa, com destaque, para o método espectro-nodal exponencial (SGF-ExpN – *Spectral Green's Function Exponential Nodal*) proposto por (MELLO; BARROS, 2002) que utiliza uma aproximação exponencial para os termos de fuga; e para o método espectro-nodal linear (SGF-LN – *Spectral Green's Function Linear Nodal*) que utiliza um polinômio de primeira ordem na aproximação das fugas (DOMINGUEZ; BARROS, 2007).

Em paralelo, diversas abordagens de métodos espectro-nodais foram desenvolvidas para resolver problemas de transporte de nêutrons em meios multiplicativos. A primeira delas, desenvolvida por (ABREU et al., 1996) deu origem ao método *Spectral Diamond* (SD) que gera soluções livres de erro de truncamento espacial para problemas de autovalor na formulação de ordenadas discretas e geometria unidimensional cartesiana. A seguir, em (FILHO et al., 2002; BARROS et al., 1999) foi proposto o método *Spectral Diamond - Spectral Green's Function - Constant Nodal* (SD-SGF-CN) para problemas bidimensionais de autovalor com aproximação constante para os termos de fuga transversal. Adicionalmente, em (BARROS et al., 2004) e (BARROS et al., 2003) foram propostas métodos espectro-nodais baseados na aproximação de difusão. Os métodos espectro-nodais oferecem resultados precisos para problemas de fonte fixa e autovalor em cálculos de malha grossa; entretanto, devido à presença da análise espectral e a necessidade de utilizar varreduras do tipo inversão nodal (NBI – *Nodal Block Inversion*), o custo algébrico e a complexidade dos algoritmos computacionais envolvidos nas tarefas de modelagem com esta família de métodos é elevado.

Uma alternativa para aliviar os pontos negativos dos métodos espectro-nodais são os métodos espectro-nodais de grades compostas (CSG-SGF, *Composite Spatial Grid - Spectral Green's Function*). Os métodos de grades compostas utilizam uma discretização em duas etapas para transformar o problema multidimensional em problemas “uni-

dimensionais” acoplados pelos termos de fuga. Visando obter a precisão das técnicas espectro-nodais em formulações unidimensionais mais simples de resolver, do ponto de vista numérico e computacional. O primeiro método de grades compostas foi proposto em (DOMINGUEZ et al., 2010), sendo denominado método espectro-nodal de grades compostas com aproximação constante (CSG-SGF-CN, *Composite Spatial Grid Spectral Green’s Function Constant Nodal*). O método CSG-SGF-CN utiliza uma aproximação constante para os termos de fuga em nível de região e foi utilizado para resolver problemas de fonte fixa na formulação de ordenadas discretas e geometria X, Y. Outro passo nesta família foi o método espectro-nodal de difusão com grades compostas para problemas de autovalor em geometria X, Y e aproximação constante (NASCIMENTO, 2012) com aplicação em cálculos de criticalidade de reatores nucleares. O mais recente avanço entre os métodos de grades compostas foi o método CSG-SGF-Exp (*Composite Spatial Grid Spectral Green’s Function Exponential*), que utiliza uma aproximação exponencial para os termos de fuga transversal e resolve problemas de fonte fixa em geometria bidimensional Cartesiana (AGUIAR, 2014). Destacamos, que nos métodos de grades compostas, a aproximação da fuga transversal ocorre em nível de região, isto é, em uma malha muito grossa, esta aproximação é mais grosseira que a aproximação em nível de nodo que temos nos métodos espectro-nodais; entretanto, os métodos de grades compostas têm-se mostrado úteis e precisos no cálculo de grandezas integrais como fugas ou taxas de reação.

No presente trabalho propomos um novo avanço na família dos métodos espectro-nodais de grades compostas. Temos como objetivo desenvolver um método de grades compostas para resolver problemas de autovalor na formulação de ordenadas discretas visando aproveitar as potencialidades dos métodos Spectral Diamond (SD) (ABREU et al., 1996) e (FILHO et al., 2002). Este novo método, chamado CSG-SD-CN (*Composite Spatial Grid - Spectral Diamond - Constant Nodal*) utiliza uma aproximação constante para os termos de fuga transversal na região, e resolve problemas S_N de autovalor em aproximação de uma velocidade, com fonte de espalhamento isotrópica em geometria X, Y. Destacamos, que não existem antecedentes na literatura científica de uso de métodos de grades compostas para problemas de autovalor em formulações de transporte.

Para obtermos o método CSG-SD-CN partimos da formulação de ordenadas discretas e discretizamos o domínio de cálculo utilizando uma grade grossa, onde cada célula espacial corresponde com uma região material. Em seguida, aplicamos o procedimento de integração transversal e obtemos dois problemas unidimensionais acoplados pelos termos de fuga transversal. Os fluxos angulares nas arestas das regiões são aproximados por constantes o que nos permite avaliar explicitamente os termos de fuga, e via análise espectral obter as soluções analíticas gerais de cada problema unidimensional. Então os problemas unidimensionais são discretizados usando uma malha fina e resolvidos utilizando o método SD para problemas unidimensionais (ABREU et

al., 1996). A resolução do problema envolve um esquema iterativo de direções alternadas, onde a cada iteração, os termos de fuga da direção transversal são atualizados. Esperamos, que este novo método gere resultados precisos para grandezas integrais como o coeficiente efetivo de multiplicação e a distribuição de potencia em *assemblies*, com menor custo computacional que os métodos espectro nodais convencionais.

No capítulo 2 apresentamos os fundamentos da equação de transporte de *Boltzmann* e os detalhes da formulação de ordenadas discretas (S_N) em geometria X, Y. No capítulo 3, oferecemos um breve histórico dos métodos numéricos utilizados neste trabalho para construir e validar o método CSG-SD-CN. O capítulo 4 detalha o método CGS-SD-CN, principal objetivo deste trabalho, enfatizando o procedimento para obter as equações discretizadas de varredura, as aproximações consideradas e o algoritmo computacional proposto. Resultados numéricos para problemas homogêneos e heterogêneos aparecem no capítulo 5. A análise destes resultados ilustra a precisão e o desempenho computacional do método. Por último, no capítulo 6 oferecemos as conclusões da pesquisa e sugerimos algumas linhas de trabalhos futuros para os métodos de grades compostas.

2 Fundamentação Teórica

Neste capítulo, abordamos os fundamentos da equação de transporte de *Boltzmann*, definições e grandezas físicas utilizadas no modelo matemático, tais como, a densidade angular de nêutrons, o fluxo angular de nêutrons, a densidade angular de corrente, bem como as grandezas escalares utilizadas na modelagem. Ainda neste capítulo, discutiremos o método de discretização angular, conhecido como ordenadas discretas e apresentaremos as equações de transporte de nêutrons na formulação de ordenadas discretas utilizadas neste trabalho.

Na seção 2.1 apresentamos os conceitos que envolvem a equação de transporte de nêutrons, definições e grandezas físicas. Já na seção 2.2 apresentaremos os conceitos relacionados à formulação de ordenadas discretas S_N .

2.1 Equação de transporte de nêutrons

O problema principal ligado a transporte de nêutrons consiste em determinar a distribuição do fluxo de nêutrons em um meio material. A distribuição da população de nêutrons determina a taxa de reação para os múltiplos processos (reações nucleares) que podem ocorrer.

O processo de transporte de nêutrons compreende o movimento dos nêutrons e da corrente de nêutrons no meio, durante este movimento ocorrem interações os nêutrons e os núcleos atômicos do meio. Estas interações podem ser de espalhamento ou absorção, e eventualmente após algumas interações de espalhamento o nêutron poderá escapar pelas fronteiras do meio (fugas).

O fenômeno físico de transporte de nêutrons é caracterizado pelas seções de choque macroscópicas, que determinam a probabilidade de ocorrência de um tipo de interação nuclear, e as distâncias médias percorridas pelos nêutrons.

Neste processo as distâncias percorridas pelos nêutrons são relativamente grandes se comparada as dimensões nucleares ou as mudanças no meio material, (geralmente o livre caminho médio é da ordem de poucos centímetros, e o tamanho do diâmetro de um elemento combustível no reator nuclear é de 1 cm). Por este motivo existe uma analogia entre o transporte de nêutrons e a teoria cinética dos gases rarefeitos. A equação fundamental que descreve o movimento molecular em um gás diluído, foi proposta pelo físico austríaco *Ludwig Boltzmann* (1844-1906), sendo conhecida como a Equação de *Boltzmann*, para a teoria cinética dos gases ([BOLTZMANN, 1872](#)).

Por este motivo, o modelo matemático utilizado no estudo da migração de uma

população de nêutrons em determinado meio material é conhecido como equação de transporte de *Boltzmann*, ou equação de transporte de nêutrons. A modelagem matemática que vamos adotar para o problema físico de transporte de nêutrons levará em conta a população média de nêutrons, mas não o comportamento individual de cada nêutron. A população de nêutrons será tratada como uma entidade estatística, considerando os caminhos pelos quais as partículas podem nascer, migrar ou morrer.

2.1.1 Definições e grandezas físicas

A densidade angular de nêutrons $n(\vec{r}, \vec{v}, t)$ é definida com o número “esperado” de partículas que estão presentes num volume unitário localizado no ponto do espaço $\vec{r}$, e no instante de tempo t , e que estão migrando com velocidade $\vec{v}$, (DUDERSTADT, 1976).

A palavra (esperado) foi colocada nesta definição para ressaltar a natureza estatística desta teoria na qual somente valores médios ou esperados serão determinados.

Observamos que existem sete variáveis independentes em nosso espaço de fase, ou seja, existem sete variáveis que caracterizam o estado individual do nêutron. Três variáveis espaciais: $(\vec{r} \Rightarrow x, y, z)$, três relacionadas com a velocidade $(\vec{v} \Rightarrow E, \hat{\Omega} \Rightarrow E, \theta, \varphi)$ e uma temporal t , vide Figura 1. Lembramos que a velocidade vetorial carrega informação sobre a direção de migração e a energia do nêutron.

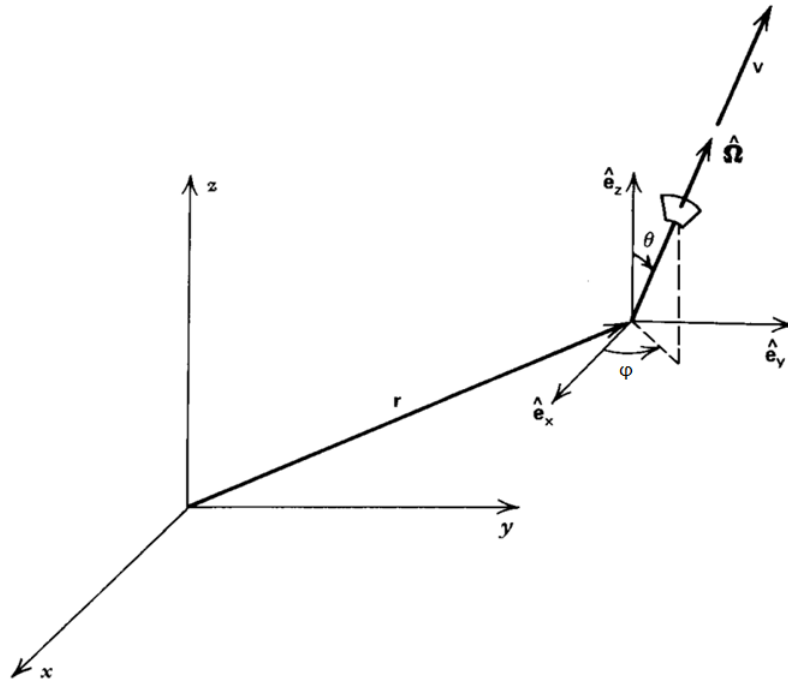


Figura 1 – Variáveis espaciais e angulares na caracterização do nêutron.

Nêutrons que estejam localizados num mesmo volume unitário na posição $\vec{r}$ tem densidades angulares diferentes se migrarem com velocidades $\vec{v}$ diferentes (em módulo e/ou direção) no mesmo instante de tempo t .

Por motivos práticos a variável independente velocidade é colocada frequentemente como uma dependência energética (E), e dá direção de migração unitária ($\hat{\Omega}$), nesse caso: $n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)$ representa o número “esperado” de nêutrons num volume unitário localizado em $\vec{r}$, com energias E e migrando na direção $\hat{\Omega}$ no instante de tempo t , (LEWIS; MILLER, 1984).

Então, $n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)dVdEd\Omega$ é o número esperado de nêutrons no volume dV , localizado na posição $\vec{r}$, com energias entre E e $E + dE$, migrando no diferencial de ângulo sólido $d\Omega$ em $\hat{\Omega}$, no instante de tempo t , como ilustra a Figura 2.

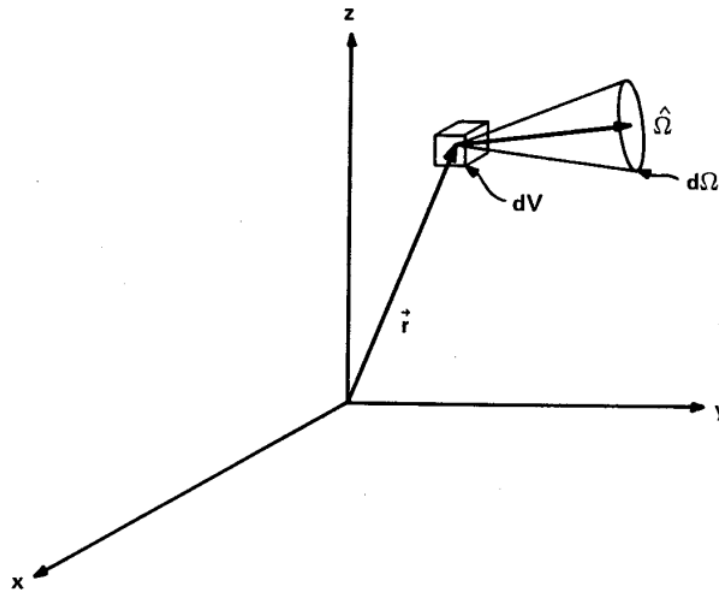


Figura 2 – Partículas em dV viajando no cone $d\hat{\Omega}$ sobre a direção $\hat{\Omega}$.

Em problemas de transporte desejamos caracterizar a taxa de reação em determinado volume do domínio e as distâncias percorridas pelos nêutrons. A distância percorrida por um nêutron durante o intervalo de tempo dt , pode ser caracterizada como vdt , portanto a distância percorrida por todas as partículas no volume incremental do espaço de fase $dVdEd\Omega$, no intervalo de tempo dt , aparece na forma

$$vn(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)dVdEd\Omega dt. \quad (1)$$

Define-se a seção macroscópica total Σ_t , como a probabilidade de interação por unidade de recorrido do nêutron, se multiplicarmos Σ_t pela distância percorrida por

unidade de tempo em $dV dE d\Omega$. Definimos a taxa de interação angular $f(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)$, na forma

$$f(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) = v \Sigma_t(\vec{r}, E) n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t). \quad (2)$$

O produto da velocidade (v) pela densidade angular de nêutron, aparece frequentemente em transporte de partículas, Eqs. (1) e (2), por esse motivo, define-se o fluxo angular de nêutrons $\psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)$, como

$$\psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) = v n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t). \quad (3)$$

Utilizando a equação (3) em (1) podemos escrever a distância percorrida pelo total de nêutrons de incremento diferencial do espaço de fase como

$$v n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) dV dE d\Omega dt = \psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) dV dE d\Omega dt \quad (4)$$

e utilizando a Eq. (3) em (2), podemos escrever a taxa de interação angular como

$$f(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) = \Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t). \quad (5)$$

A fraseologia convencional de chamar “fluxo” a grandeza definida na Eq. (3) leva a um grande engano. O fluxo angular de nêutrons, não é semelhante às grandezas de fluxo encontradas em outros fenômenos físicos como a condução de calor (fluxo de calor) ou a teoria eletromagnética (fluxo elétrico). A principal diferença consiste em que os fluxos elétricos e magnéticos são magnitudes vetoriais, enquanto o fluxo de nêutrons é uma magnitude escalar. Por esse motivo, ressaltamos que o fluxo de nêutrons é simplesmente uma variável matemática conveniente utilizada para calcular grandezas importantes em problemas de transporte de partículas.

Outra grandeza angular relevante é a densidade angular de corrente, $\vec{j}(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)$, definida como:

$$\vec{j}(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) \equiv \hat{\Omega} \psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) \equiv \hat{\Omega} v n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) \quad (6)$$

sendo $\hat{\Omega}$ um vetor unitário, o fluxo angular corresponde com a magnitude da densidade angular de corrente.

A densidade angular de corrente têm uma interpretação física útil, considere um diferencial de área superficial dS , com o vetor $\hat{n}$ normal a superfície, conforme mostra a Figura 3, podemos determinar o número de nêutrons que atravessam a superfície dS por unidade de tempo, na direção $\hat{\Omega}$ com energias E em dE no instante t como, (LEWIS; MILLER, 1984),

$$\hat{n} \cdot \vec{j}(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) dS dE \quad (7)$$

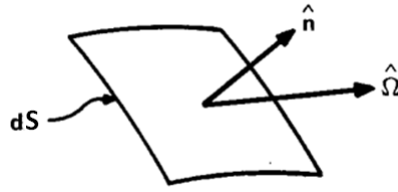


Figura 3 – Vetor $\hat{n}$ normal à superfície dS .

Até o momento temos definido um conjunto de grandezas angulares:

- a) densidade angular de nêutrons;
- b) fluxo angular de nêutrons;
- c) taxa de interação angular, taxa de reação angular ou densidade angular de colisão;
- d) densidade angular de corrente de nêutrons.

Cada uma dessas grandezas pode ser integrada em todas as direções angulares possíveis gerando grandezas físicas que independem da direção de voo do nêutron.

Se integrarmos a densidade angular de nêutrons para todas as direções possíveis, obtemos a densidade escalar ou densidade total de nêutrons $N(\vec{r}, E, t)$

$$N(\vec{r}, E, t) = \int_{4\pi} n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} \quad (8)$$

$N(\vec{r}, E, t)$ - representa o número esperado de nêutrons num volume unitário localizado em $\vec{r}$, com energias E , no instante de tempo t , migrando em qualquer direção.

Analogamente, se integrarmos o fluxo angular de nêutrons, Eq. (3), em todas as direções angulares possíveis, obtemos o fluxo escalar de nêutrons

$$\phi(\vec{r}, E, t) = \int_{4\pi} \psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega}. \quad (9)$$

Em condições isotrópicas, onde a densidade angular de nêutrons é independente de $\hat{\Omega}$, as Eqs (8) e (9) aparecem na forma

$$n(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t) = \frac{1}{4\pi} N(\vec{r}, E, t), \quad (10)$$

$$\psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) = \frac{1}{4\pi} \phi(\vec{r}, E, t). \quad (11)$$

A simplificação de meio isotrópico não pode ser feita em diversas condições físicas como nas regiões próximas a um contorno do domínio, ou nas proximidades de uma fonte de nêutrons, (DUDERSTADT, 1976), vide Figura 4.

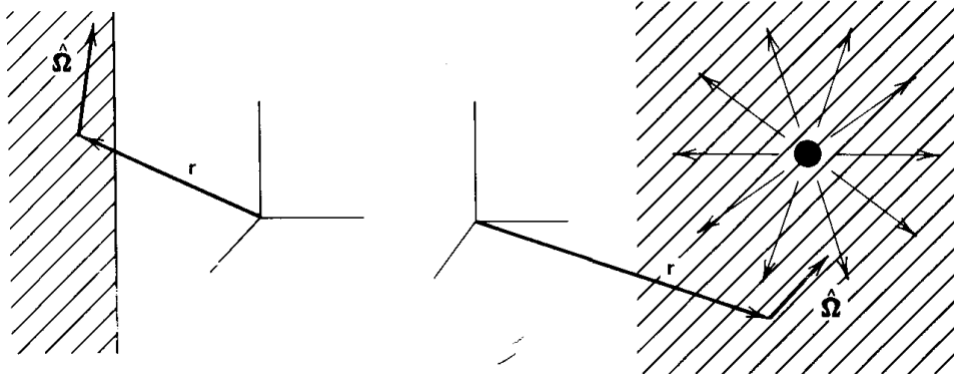


Figura 4 – Anisotropia na densidade angular próximo à fronteira do domínio ou de uma fonte de nêutrons.

Novamente obtemos a taxa de interação total $F(\vec{r}, E, t)$ se integrarmos a Eq. (5) em todas as direções angulares.

$$F(\vec{r}, E, t) = \int_{4\pi} f(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} \quad (12)$$

Avaliando a integral na Eq. (12) e utilizando a definição de fluxo escalar, Eq. (9) obtemos,

$$\begin{aligned} F(\vec{r}, E, t) &= \int_{4\pi} \Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} \\ &= \Sigma_t(\vec{r}, E) \int_{4\pi} \psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} \\ &= \Sigma_t(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E, t). \end{aligned} \quad (13)$$

A taxa de interação total, definida na Eq. (13) pode ser interpretada como o número de colisões de qualquer natureza (espalhamento e absorção) que ocorrem num diferencial unitário de volume localizado no ponto $\vec{r}$, com nêutrons de energia E , no instante t . Se integrarmos a Eq. (13) para todo o intervalo de energias obtemos $F(\vec{r}, t)$ como a taxa de interação para nêutrons de qualquer energia. O resultado aparece na forma

$$F(\vec{r}, t) = \int_0^\infty \Sigma_t(\vec{r}, E) \phi(\vec{r}, E, t) dE. \quad (14)$$

A taxa de interação total $F(\vec{r}, E, t)$, também pode ser definida para cada tipo de interação nuclear, como taxa de interação de espalhamento e taxa de interação de absorção, utilizando as respectivas seções macroscópicas de cada tipo de interação nuclear.

Por último, podemos definir o vetor corrente neutrônica $\vec{J}(\vec{r}, E, t)$, como a integral em todas as direções possíveis da densidade angular de corrente.

$$\vec{J}(\vec{r}, E, t) = \int_{4\pi} \vec{j}(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega}. \quad (15)$$

Considerando a interpretação física da densidade angular de corrente dada na Eq. (7) e Figura 3, podemos definir a corrente neta de nêutrons $J_n(\vec{r}, E, t)$ como o produto escalar entre o vetor $\hat{n}$ normal à superfície dS e o vetor corrente neutrônica, na forma

$$\begin{aligned} J_n(\vec{r}, E, t) &= \hat{n} \cdot \vec{J}(\vec{r}, E, t) = \int_{4\pi} \hat{n} \cdot \vec{j}(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} \\ &= \int_{4\pi} \hat{n} \cdot \hat{\Omega} \psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega} \end{aligned} \quad (16)$$

A corrente neta $J_n(\vec{r}, E, t)$ representa o número neto de nêutrons que atravessam uma área de superfície unitária por unidade de energia, e por unidade de tempo na direção normal $\hat{n}$ positiva. Em diversas situações físicas é desejável dividir a corrente neta nas correntes parciais de partículas que atravessam a superfície nas direções positivas e negativas, ou seja,

$$J_n(\vec{r}, E, t) = J_n^+(\vec{r}, E, t) - J_n^-(\vec{r}, E, t) \quad (17)$$

onde as correntes parciais na direção positiva e negativa são definidas na forma:

$$J_n^+(\vec{r}, E, t) = \int_{\hat{\Omega} \cdot \hat{n} > 0} \hat{n} \cdot \vec{j}(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega}, \quad (18)$$

$$J_n^-(\vec{r}, E, t) = \int_{\hat{\Omega} \cdot \hat{n} < 0} \hat{n} \cdot \vec{j}(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) d\hat{\Omega}. \quad (19)$$

A Figura 5 mostra a interpretação das grandezas corrente neta e correntes parciais.

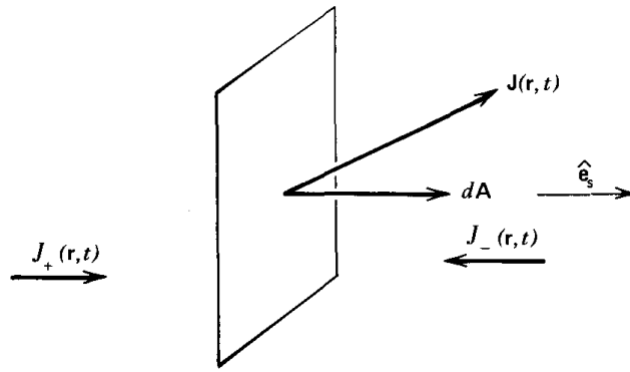


Figura 5 – Densidades total e parcial da corrente de nêutrons.

As unidades para as grandezas $\vec{J}(\vec{r}, E, t)$ e $\phi(\vec{r}, E, t)$ são idênticas $[cm^{-2}s^{-1}]$. Entretanto, $\vec{J}(\vec{r}, E, t)$ é uma grandeza vetorial que caracteriza o número de nêutrons que atravessam uma superfície orientada em uma determinada direção, por outro lado, $\phi(\vec{r}, E, t)$ caracteriza o número total de nêutrons que atravessam uma unidade de área independentemente de qualquer orientação (DUDERSTADT, 1976). Esta interpretação sugere que a corrente é uma grandeza apropriada para descrever a fuga de nêutrons (por exemplo, pela superfície que delimita o contorno do domínio de cálculo). Enquanto o fluxo é apropriado para caracterizar taxas de interação de nêutrons, por exemplo, o número total de interações em uma determinada região do domínio.

2.1.2 Obtenção da equação de transporte

Neste ponto, temos definido nossas variáveis independentes e todas as grandezas necessárias para obtermos a equação de transporte de nêutrons.

A equação de transporte de *Boltzmann* constituirá o modelo matemático que descreve o comportamento médio de toda a população de nêutrons, e não de cada nêutron individualmente. Antes de passarmos à construção da equação, listamos um conjunto de hipóteses físicas que consideramos como verdadeiras para a modelagem matemática do problema físico de transporte de nêutrons:

- a) Partículas são consideradas corpos pontuais. Isto significa que o comportamento ondulatório da partícula é desprezado, ou seja, apenas partículas com longitudes de ondas menores que o diâmetro atômico são consideradas. Nêutrons percorrem em média muitas distâncias inter-atômicas entre colisões, por tal motivo, partículas com longitude de onda pequena podem ser descritas apropriadamente em função de sua localização e velocidade. Partículas de energia muito baixa, são excluídas da análise. Por este motivo, a energia de vibração dos átomos e moléculas do material pode ser desconsiderada (núcleos em repouso).
- b) Os nêutrons viajam em linha reta entre os pontos de colisão. Com exceção dos campos nucleares, normalmente os campos de força que agem sobre o nêutron são nulos. Forças gravitacionais são muito fracas para influenciar o movimento dos nêutrons. Campos elétricos e magnéticos não exercem nenhuma influência sobre o movimento do nêutron, pois este, não tem carga elétrica. Como os campos nucleares são fenomenologicamente incorporados nos termos de espalhamento e absorção, podemos afirmar que o nêutron viaja em linha reta e com velocidade constante entre colisões.
- c) Interações nêutron-nêutron (partícula-partícula) são desprezadas. Esta é uma aproximação fisicamente justificável, visto que a densidade de nêutrons é muito pequena quando comparada com a densidade dos núcleos-alvo em sistemas reais (reatores nucleares, blindagem de radiação, dentre outras aplicações). A exclusão das interações nêutron-nêutron é a razão pela qual a equação de *Boltzmann* aplicada a nêutrons é linear.
- d) Colisões são consideradas instantâneas. O tempo de colisão dos nêutrons com os núcleos é considerado nulo. Esta é uma aproximação consistente, pois os núcleos compostos que se formam nas interações nêutron-núcleo vivem menos que 10^{-14} segundos. Para as aplicações práticas as partículas emergentes são emitidas imediatamente no próprio ponto de colisão. A única exceção são os nêutrons atrasados emitidos pelos fragmentos de fissão, entretanto, o alcance dos fragmentos de fissão é extremamente pequeno em qualquer sólido ou líquido, pelo qual podemos considerar que nêutrons atrasados originam-se no ponto de colisão. Por outro lado, os nêutrons atrasados precisam ser considerados como um termo de fonte adicional na equação de transporte dependente do tempo.
- e) As propriedades materiais são isotrópicas. Os efeitos que dependem da orientação do nêutron com relação aos átomos do meio não são consideradas na equação de *Boltzmann*. Esta aproximação é válida para a maioria das aplicações práticas, onde a orientação dos átomos do meio é aleatória.

- f) As propriedades nucleares e a composição material do meio é conhecida e independente do tempo. Os efeitos de alargamento Doppler provocadas pelas vibrações do meio material, e outros efeitos que afetam as seções microscópicas de interação são desconsideradas. As mudanças na composição isotrópica do combustível provocadas pelas interações nêutron-núcleo também são desprezadas. O acoplamento dos cálculos neutrônicos com a queima do combustível, fenômenos termo-hidráulicos e outros efeitos de retroalimentação são incorporados por métodos específicos, principalmente baseados em métodos iterativos, e estão fora do escopo desta dissertação.
- g) Apenas o valor esperado ou valor médio da distribuição da densidade de nêutrons é considerado. Os elementos do espaço de fase (espaço-energia-ângulo) são considerados suficientemente grandes de tal forma que flutuações estatísticas no interior destes elementos são desprezíveis. As flutuações estatísticas não podem ser tratadas pela equação de *Boltzmann*.

Agora derivamos a equação exata para a densidade angular de nêutrons em um domínio, sistema ou meio material. Esta derivação é baseada no balanço dos diversos mecanismos mediante os quais nêutrons podem surgir ou desaparecer em um determinado volume V do domínio, (DUDERSTADT, 1976). Este volume está envolvido por uma superfície S e sua representação aparece na Figura 6.

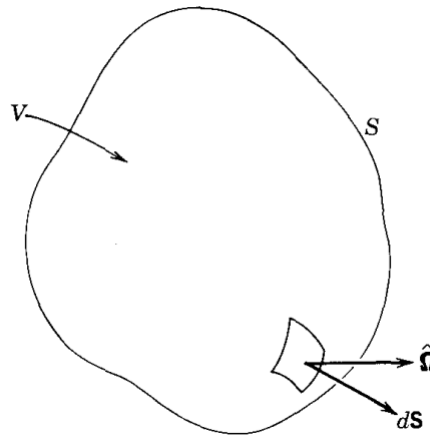


Figura 6 – Um volume arbitrário V com área de superfície S .

Consideramos então os mecanismos que modificam o número de nêutrons com energia E e com direção $\hat{\Omega}$ no interior do volume arbitrário V .

O número de nêutrons em V com energias E em dE deslocando-se na direção $\hat{\Omega}$ em $d\hat{\Omega}$ pode ser calculado pela integral

$$\left[\int_V n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) dV \right] dE d\hat{\Omega}, \quad (20)$$

a mudança temporal do número de nêutrons no interior do volume V pode ser calculado pela seguinte equação de balanço

$$\left[\int_V \frac{d}{dt} n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) dV \right] dE d\hat{\Omega} = G(n) - P(n), \quad (21)$$

onde consideramos que o volume V é invariante no tempo, $G(n)$ representa o ganho de nêutrons em V e $P(n)$ representa a perda de nêutrons em V .

Neste ponto, identificamos os diversos fenômenos que provocam ganhos e perdas de nêutrons no interior do volume V , e encontramos uma expressão matemática para um desses mecanismos em termos da densidade angular de nêutrons.

- Mecanismos de ganhos (produção de nêutrons) no volume V :
 - Qualquer fonte de nêutrons em V (inclui isótopos emissores de nêutrons e as fontes de fissão);
 - A corrente de nêutrons ao interior de V através da superfície S ;
 - Nêutrons de diferentes energias e direção, E' e $\hat{\Omega}'$, que sofrem colisões de espalhamento em V , tendo como energia e direção emergentes os valores de interesse, E e $\hat{\Omega}$.
- Mecanismos de perda de nêutrons no volume V :
 - Nêutrons que escapam do volume V através da superfície S ;
 - Nêutrons em V que sofrem alguma colisão. É evidente que as colisões de absorção removem o nêutron do volume V , adicionalmente, as colisões de espalhamento modificam a energia e direção de nêutrons com valores de interesse, E e $\hat{\Omega}$, por esse motivo colisões de espalhamento também são consideradas perdas de nêutrons.

A seguir escrevemos as expressões matemáticas para os mecanismos anteriormente identificados. Por conveniência, escrevemos primeiramente os termos mais simples até chegarmos aos mais complexos:

- No termo de fonte, a taxa de aparição de nêutrons da fonte, ou o número esperado de nêutrons emitidos pela fonte em um diferencial unitário de volume, localizado

em $\vec{r}$, com energias E e direção $\hat{\Omega}$ no instante de tempo t aparece como

$$S(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) dV dE d\hat{\Omega}, \quad (22)$$

se integrarmos Eq. (22) em todo o volume V , obtemos o termo de fonte na forma

$$\left[\int_V S(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) dV \right] dE d\hat{\Omega}. \quad (23)$$

- Nas perdas por colisões em V , a taxa de interação ou taxa de colisões no ponto $\vec{r}$ para nêutrons com energia E e direção $\hat{\Omega}$, é definida pela Eq. (2), se integrarmos no volume V obtemos

$$\left[\int_V v \Sigma_t(\vec{r}, E) n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) dV \right] dE d\hat{\Omega} \quad (24)$$

- Ganho de nêutrons espalhados para E em dE e $\hat{\Omega}$ em $d\hat{\Omega}$ desde as energias E' e direções $\hat{\Omega}'$. Para expressarmos este termo, fazemos uso da seção de choque diferencial de espalhamento definida em (LEWIS; MILLER, 1984). Então, o número de nêutrons no volume V espalhados da energia E' e direção $\hat{\Omega}'$ para a energia e direção de interesse E e $\hat{\Omega}$, aparece na forma

$$\left[\int_V v' \Sigma_s(E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) n(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) dV \right] dE d\hat{\Omega}. \quad (25)$$

A Eq. 25 considera apenas a contribuição da energia E' e a direção $\hat{\Omega}'$, para considerarmos as contribuições de todas as energias todas as direções, devemos integrar em todo o intervalo de energias e de ângulo sólido, então

$$\left[\int_V dV \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' v' \Sigma_s(E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) n(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) \right] dE d\hat{\Omega}. \quad (26)$$

A Eq. (26) caracteriza o espalhamento de nêutrons desde todas as energias e direções para $dE d\hat{\Omega}$.

- A corrente de nêutrons, ao interior do volume (ganho de nêutrons), e ao exterior do volume (perda de nêutrons). O tratamento dos termos de ganho e perda de nêutrons são feitos em conjunto e consiste em calcular a corrente neta de nêutrons através da superfície S , para isto, nos reportamos ao conceito de densidade de corrente angular Eq. (6), onde podemos determinar o número de nêutrons que atravessam um diferencial de superfície dS por unidade de tempo na direção $\hat{\Omega}$ com energias E na forma

$$\vec{j}(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) \cdot \hat{n} dS = \hat{\Omega} v n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) \cdot \hat{n} dS. \quad (27)$$

onde $\hat{n}$ é um vetor normal à superfície dS . Para considerarmos a contribuição da corrente de nêutrons em toda a superfície que contorna o volume V , integramos a Eq. (27) por toda a superfície e obtemos

$$\int_S \hat{n} dS \cdot \hat{\Omega} v n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t). \quad (28)$$

Aplicando o teorema de Gauss-Ostrogradski, uma integral de superfície pode ser convertida em uma integral de volume, dessa forma, Eq. (28) pode ser reescrita como

$$\left[\int_V \hat{\Omega} v \cdot \vec{\nabla} n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) dV \right] dE d\hat{\Omega}, \quad (29)$$

onde $\vec{\nabla}$ é o operador gradiente. A Eq. (29) representa a corrente neta de nêutrons que atravessam a fronteira do volume V com energia E em dE e direção $\hat{\Omega}$ em $d\hat{\Omega}$.

Neste ponto, podemos combinar as expressões matemáticas obtidas Eqs. (23), (24), (26) e (29), para cada um dos fenômenos, na equação de balanço (21), onde obtemos

$$\begin{aligned} & \left[\int_V \frac{d}{dt} n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) dV \right] dE d\hat{\Omega} = \left[\int_V S(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) dV \right] dE d\hat{\Omega} \\ & - \left[\int_V \hat{\Omega} v \cdot \vec{\nabla} n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) dV \right] dE d\hat{\Omega} - \left[\int_V v \Sigma_t(\vec{r}, E) n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) dV \right] dE d\hat{\Omega} \\ & + \left[\int_V dV \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' v' \Sigma_s(E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) n(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) \right] dE d\hat{\Omega}. \end{aligned} \quad (30)$$

Agrupando as integrais de volume e considerando que a Eq. (30) representa uma equação de balanço em um volume arbitrário V , a integral nesse volume será nula apenas se o integrando for identicamente nulo, dessa forma, obtemos

$$\begin{aligned} & \frac{d}{dt} n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) + \hat{\Omega} v \cdot \vec{\nabla} n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) + v \Sigma_t(\vec{r}, E) n(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) = \\ & \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' v' \Sigma_s(E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) n(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) + S(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t). \end{aligned} \quad (31)$$

Por conveniência substituímos a definição de fluxo angular, Eq. (3), na Eq. (31) e obtemos

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v} \frac{d}{dt} \psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) + \hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) = \\ & \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) \psi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) + S(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t). \end{aligned} \quad (32)$$

A Eq. (32) é uma equação de balanço integro-diferencial, conhecida como equação de transporte de nêutrons ou equação linearizada de *Boltzmann*, onde no lado

esquerdo da equação aparecem a variação temporal do fluxo de nêutrons e os termos de perda de nêutrons, já no lado direito da equação aparecem os termos de fonte ou de produção de nêutrons. Destacamos que Eq. (32) é uma equação linear, tendo como incógnita o fluxo de nêutrons ψ , com sete variáveis independentes ($\vec{r} = x, y, z; E; \hat{\Omega} = \theta, \varphi; t$). Ademais, encontramos derivadas no tempo e no espaço nos dois primeiros termos do lado esquerdo, e encontramos integrais sobre o ângulo e a energia no primeiro termo do lado direito, por esta razão temos uma equação integro-diferencial. Por estes motivos, não é possível obter soluções analíticas da equação de transporte de nêutrons para a maioria dos problemas com valor prático, apenas em geometria muito simples em meios homogêneos. Para resolvermos a equação de transporte (32) devemos utilizar técnicas de aproximação que diminuam a complexidade do modelo matemático. A presença da derivada temporal na Eq. (32) impõe a necessidade de uma condição inicial para resolver o problema, porém neste trabalho, consideramos apenas problemas estáticos, ou seja, problemas independentes do tempo, dessa forma, consideramos a equação de transporte de nêutrons na seguinte forma

$$\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) + \Sigma_t(\vec{r}, E) \psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) = \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) \psi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}') + S(\vec{r}, E, \hat{\Omega}). \quad (33)$$

O primeiro termo de Eq. (33) é conhecido como termo de corrente e representa o deslocamento dos nêutrons das regiões de alta densidade de nêutrons para as regiões com baixa densidade no interior do domínio. O segundo termo é conhecido como termo de interação e representa a perda de nêutrons provocadas por interações como o meio (absorção ou espalhamento). O terceiro termo é conhecido como fonte de espalhamento e representa os nêutrons que são espalhados de todas as energias e direções para a energia E e direção $\hat{\Omega}$ de interesse. O quarto e último termo é conhecido como termo de fonte, e representa a fonte de nêutrons que pode ser uma fonte externa em meios não-multiplicativos (problemas de fonte fixa) ou as fontes de fissão em meios multiplicativos (problemas de autovalor).

A presença de derivadas espaciais em Eq. (33) impõe a necessidade de condições de contorno, que deverão especificar a distribuição de fluxo angular que ingressa no volume V através da S , representada por

$$\psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) = \psi_S(\vec{r}, E, \hat{\Omega}), \quad \hat{\Omega} \cdot \hat{n} < 0, \quad \vec{r} \in S, \quad (34)$$

onde em cada ponto da superfície S ($\vec{r} \in S$) devemos conhecer o fluxo de nêutrons incidente ($\hat{\Omega} \cdot \hat{n} < 0$) no volume V .

Uma situação que aparece em diversos problemas é quando o fluxo incidente através da superfície S é nulo, neste caso a condição de contorno aparece na forma

$$\psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) = 0, \quad \hat{\Omega} \cdot \hat{n} < 0, \quad \vec{r} \in S, \quad (35)$$

sendo conhecida como condição de contorno do tipo vácuo ou condição de contorno do tipo livre. Esta condição de contorno é conhecida como condição de contorno explícita ou prescrita, onde o fluxo angular na superfície é explicitamente conhecido.

As condições de contorno implícitas, onde o fluxo angular incidente não é conhecido de forma explícita, são usadas frequentemente em cálculos de transporte para considerar condições de simetria impostas pelo problema físico ou propriedades de reflexão de uma interface. Essas condições de contorno constituem relações entre os fluxos incidentes e emergentes na superfície S . As condições de contorno do tipo *Albedo* são condições implícitas, onde o fluxo incidente no volume V pelo contorno é proporcional ao fluxo emergente do volume V , a condição de contorno do tipo *Albedo* aparece na forma

$$\psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) = \alpha(E)\psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}'), \quad \hat{\Omega} \cdot \hat{n} < 0, \quad \vec{r} \in S, \quad (36)$$

onde $\alpha(E)$ é a constante de proporcionalidade de *Albedo* e $\hat{\Omega}'$ é o ângulo de reflexão correspondente à direção angular emergente $\hat{\Omega}'$. Na condição de contorno de *Albedo* $\hat{\Omega} \cdot \hat{n} = -\hat{n} \cdot \hat{\Omega}$.

Um caso particular da condição de contorno de *Albedo* ocorre quando $\alpha(E) = 1$, neste caso temos

$$\psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}) = \psi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}'), \quad \hat{\Omega} \cdot \hat{n} < 0, \quad \vec{r} \in S, \quad (37)$$

esta condição de contorno é chamada de condição de contorno reflexiva, onde todos os nêutrons emergentes através da superfície S são refletidas de volta ao interior do volume V .

Para tornarmos a equação de transporte de nêutrons mais fácil de ser resolvida numericamente ou analiticamente, primeiramente, discretizamos a variável energética utilizando a teoria multigrupo de energia. Na teoria multigrupo, o intervalo de energia $[0, \infty]$ é discretizado em G grupos, ou seja, o grupo arbitrário g , $g = 1 : G$, compreende todos os nêutrons com energias entre E_g e E_{g+1} , ademais, consideramos que todos os nêutrons do grupo g migram com a energia média do grupo g . A equação de transporte de nêutrons estacionária (33) integrada sobre G grupos de energia aparece na forma

$$\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi_g(\vec{r}, \hat{\Omega}) + \sigma_{t,g}(\vec{r}) \psi_g(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \sum_{g'=1}^G \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \sigma_{s,g',g}(\vec{r}, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) \psi_{g'}(\vec{r}, \hat{\Omega}') + S_g(\vec{r}, \hat{\Omega}), \quad (38)$$

onde mudamos o símbolo Σ para σ para representar as seções de choque macroscópicas a fim de evitar interpretações equivocadas com o símbolo de somatório $\sum$ que aparecem frequentemente nos desenvolvimentos matemáticos destes problemas.

Uma discretização com muitos grupos de energia reproduz o fenômeno de transporte, entretanto, por motivos de eficiência computacional, o tratamento energético com um número elevado de grupos aparece apenas em aplicações específicas. Na maioria das aplicações poucos grupos de energia são utilizados, geralmente $G = 1, 2$ ou 4 . A aproximação de um grupo de energia, conhecida também como aproximação monoenergética ou aproximação de uma velocidade, é utilizada com frequência em diversos problemas, nestes casos, assumimos que podemos caracterizar a população de nêutrons com um única energia ou velocidade. Na aproximação de uma velocidade considera-se que a energia do nêutrons não é modificada nas colisões de espalhamento. Neste trabalho consideramos a aproximação de uma velocidade na variável energética, dessa forma, a dependência energética pode ser desprezada, por este motivo reescrevemos Eq. (38) como

$$\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}) + \sigma_t(\vec{r}) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \sigma_s(\vec{r}, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}) \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}') + S(\vec{r}, \hat{\Omega}). \quad (39)$$

Neste momento, passamos a expandir o termo de fonte da equação de transporte (39), $(S(\vec{r}, \hat{\Omega}))$. As fontes de nêutrons no volume de interesse, podem ser fontes externas ou fonte de fissão. As fontes externas podem aparecer em meios não-multiplicativos, ou seja, em meios onde não existem elementos físeis. Por outro lado, fontes de fissão aparecem em meios multiplicativos, onde existem elementos físeis. Problemas em meios não-multiplicativos, aparecem principalmente em aplicações de cálculo de blindagem, e são conhecidos como problemas de fonte fixa ou de penetração profunda. Problemas em meios multiplicativos, estão associados a cálculos de criticidade de reatores nucleares e são chamados problemas de autovalor. O termo de fonte $(S(\vec{r}, \hat{\Omega}))$ pode ser escrito como

$$S(\vec{r}, \hat{\Omega}) = S_{ext}(\vec{r}, \hat{\Omega}) + S_f(\vec{r}, \hat{\Omega}), \quad (40)$$

onde $S_{ext}(\vec{r}, \hat{\Omega})$ representa a fonte externa, o número de nêutrons emitidos em um diferencial unitário de volume localizado no ponto $\vec{r}$, migrando com direção $\hat{\Omega}$ em

$d\hat{\Omega}$, com unidades $n/(cm^3 \cdot s)$. O termo $S_f(\vec{r}, \hat{\Omega})$ representa a fonte de fissão, que em aproximação monoenergética aparece como

$$S_f(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \frac{\nu \sigma_f(\vec{r})}{k_{eff}} \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}') \quad (41)$$

Nesta dissertação, trabalhamos apenas com problemas de autovalor, dessa forma, consideramos em Eq. (39) apenas o termo de fonte de fissão $S_f(\vec{r}, \hat{\Omega})$.

O termo de fonte de espalhamento da equação de transporte de nêutrons monoenergética (39) pode ser simplificado introduzindo, inicialmente, uma aproximação para a seção de choque diferencial de espalhamento em função da expansão da dependência angular em polinômios de *Legendre*. Na maioria das aplicações práticas a expansão em polinômios de *Legendre* da dependência angular no termo de espalhamento é limitada a um termo (fonte de espalhamento isotrópica), ou a dois termos (fonte de espalhamento linearmente anisotrópica). Nesta dissertação trabalhamos apenas com fonte de espalhamento isotrópica. A integral presente no termo de fonte de espalhamento em Eq. (39) pode ser simplificada utilizando o teorema de adição de *Legendre*, que inclui os conceitos de harmônicos esféricos. Maiores detalhes sobre a simplificação do termo de fonte de espalhamento pode ser encontrados em (LEWIS; MILLER, 1984).

Este trabalho está focado na resolução de problemas em geometria cartesiana, por esse motivo expressamos o termo de corrente na equação de transporte (39) em coordenadas cartesianas na seguinte forma:

$$\hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \psi(\vec{r}, \hat{\Omega}) = \mu \frac{\partial \psi(x, y, z, \mu, \eta, \xi)}{\partial x} + \eta \frac{\partial \psi(x, y, z, \mu, \eta, \xi)}{\partial y} + \xi \frac{\partial \psi(x, y, z, \mu, \eta, \xi)}{\partial z} \quad (42)$$

onde μ, η e ξ , representam os cossenos diretores da direção $\hat{\Omega}$ na forma: $\mu = \hat{\Omega} \cdot e_x$, $\eta = \hat{\Omega} \cdot e_y$ e $\xi = \hat{\Omega} \cdot e_z$, (LEWIS; MILLER, 1984). Estes cossenos diretores podem ser expressos em função dos ângulos polar (θ) e azimutal (φ) dos sistema de coordenadas esféricas, vide Figura 1, na forma: $\mu = \cos(\theta)$, $\eta = \sqrt{1 - \mu^2} \cdot \cos(\varphi)$ e $\xi = \sqrt{1 - \mu^2} \cdot \sin(\varphi)$.

Após as simplificações e tratamentos dos termos de fonte, fonte de espalhamento e corrente, a equação estacionária de transporte de nêutrons monoenergética (39) em geometria cartesiana unidimensional com fonte de espalhamento isotrópica, para o domínio D_{1D} representado na Figura 7, tal que $D_{1D} = \{x \in \mathbf{R} | 0 \leq x \leq L\}$, aparece na forma

$$\mu \frac{d}{dx} \psi(x, \mu) + \sigma_t(x) \psi(x, \mu) = \frac{1}{2} \sigma_{s,0}(x) \int_{-1}^1 \psi(x, \mu') d\mu' + S_f(x, \mu), \quad (43)$$



Figura 7 – Representação do domínio unidimensional.

com condições de contorno:

- Prescritas:

- $\psi(0, \mu) = f(\mu), \quad \mu > 0;$
- $\psi(L, \mu) = g(\mu), \quad \mu < 0.$

- Reflexivas:

- $\psi(0, \mu) = \psi(0, -\mu), \quad \mu > 0;$
- $\psi(L, \mu) = \psi(L, -\mu), \quad \mu < 0,$

onde definimos

$$\phi(x) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \psi(x, \mu') d\mu', \quad (44)$$

como o fluxo escalar de nêutrons. Por outro lado, em geometria cartesiana bidimensional com fonte de espalhamento isotrópica, para o domínio retangular D_{2D} ilustrado na Figura 8, tal que $D_{2D} = \{(x, y) \in \mathbf{R}^2 | 0 \leq x \leq X; 0 \leq y \leq Y\}$, a equação de transporte de nêutrons escreve-se na forma

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, y, \mu, \eta) + \eta \frac{\partial}{\partial y} \psi(x, y, \mu, \eta) + \sigma_t(x, y) \psi(x, y, \mu, \eta) = \\ \frac{1}{4} \sigma_{s,0}(x, y) \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \psi(x, y, \mu', \eta') d\mu' d\eta' + S_f(x, y, \mu, \eta), \end{aligned} \quad (45)$$

com condições de contorno:

- Prescritas:

- $\psi(0, y, \mu, \eta) = f(y, \mu, \eta), \quad \mu > 0;$
- $\psi(X, y, \mu, \eta) = g(y, \mu, \eta), \quad \mu < 0;$
- $\psi(x, 0, \mu, \eta) = u(x, \mu, \eta), \quad \eta > 0;$

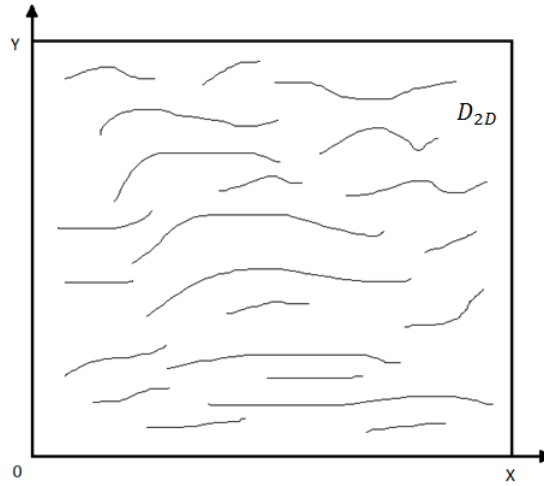


Figura 8 – Representação do domínio bidimensional.

$$- \psi(x, Y, \mu, \eta) = v(x, \mu, \eta), \quad \eta < 0.$$

• Reflexivas:

$$\begin{aligned} - \psi(0, y, \mu, \eta) &= \psi(0, y, -\mu, \eta), & \mu > 0; \\ - \psi(X, y, -\mu, \eta) &= \psi(X, y, \mu, \eta), & \mu < 0; \\ - \psi(x, 0, \mu, \eta) &= \psi(x, 0, \mu, -\eta), & \eta > 0; \\ - \psi(x, Y, \mu, -\eta) &= \psi(x, Y, \mu, \eta), & \eta < 0. \end{aligned}$$

onde definimos o fluxo escalar de nêutrons como

$$\phi(x, y) = \frac{1}{4} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \psi(x, y, \mu', \eta') d\mu' d\eta'. \quad (46)$$

Na próxima seção, discutimos e apresentamos o métodos de ordenadas discretas S_N , e aplicamos este método nas equações de transporte de nêutrons unidimensional e bidimensional.

2.2 Formulação de ordenadas discretas

O método de ordenadas discretas ou formulação S_N foi desenvolvido por (CARLSON; LATHROP, 1968) e (CHANDRASEKHAR, 1960). Este método é utilizado para discretizar as variáveis angulares, sendo os nêutrons permitidos de viajar somente sobre um número finito de direções angulares. A ideia principal da formulação S_N é a substituição do domínio contínuo das variáveis angulares (μ, η) por um conjunto de valores discretos (μ_m, η_m) , denominados ordenadas discretas, aproximando as integrais angulares dos termos de fonte por fórmulas de quadratura.

Para ilustrarmos a utilização do método de ordenadas discretas S_N , apresentamos a seguir as equações de transporte de nêutrons unidimensional e bidimensional com suas variáveis angulares discretizadas.

2.2.1 Equações S_N geometria unidimensional

Para obtermos as equações S_N para o problema unidimensional, considere inicialmente a equação estacionária de transporte de nêutrons monoenergética em geometria cartesiana unidimensional com fonte de espalhamento isotrópica, Eq. (43), e suas respectivas condições de contorno.

A ideia básica por trás do método S_N é selecionar um conjunto finito de direções ou ordenadas discretas $\{\mu_m\}$ e um correspondente conjunto de pesos $\{\omega_m\}$, $m = 1..N$, tais que o fluxo escalar de nêutrons representado pela Eq. (44) pode ser aproximado por

$$\phi(x) \approx \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N \psi(x, \mu_n) \omega_n, \quad (47)$$

Em geral, a quadratura utilizada na aproximação da integral em Eq. (44) é a quadratura de *Gauss-Legendre*, onde o conjunto de ordenadas discretas $\{\mu_m\}$ são os zeros do polinômio de *Legendre* de grau N , e o conjunto de pesos da quadratura $\{\omega_m\}$ são determinados de forma a atender uma condição de normalização que envolve as integrais dos polinômios de *Legendre* de graus $0..N - 1$, esta condição produz um sistema de equações lineares e algébricas, que tem como solução os pesos da quadratura. Os polinômios de *Legendre* apresentam a importante característica de serem simétricos em relação ao eixo das ordenadas do plano cartesiano. A condição de simetria sobre os valores de $\{\mu_m\}$, $m = 1..N$ considera que os fluxos angulares de nêutrons dos lados direito e esquerdo do eixo x em relação ao eixo y tenham o mesmo grau de importância, vide Figura 9, isto é, o mesmo peso ω_m .

A escolha particular dos conjuntos $\{\mu_m\}$ e $\{\omega_m\}$, $m = 1..N$ determina a precisão que terá a aproximação da integral em Eq. (44) pela quadratura de *Gauss-Legendre*. A Tabela 1 mostra os valores das ordenadas discretas e seus respectivos pesos para $N = 2, 4$ e 8 .

A equação estacionária de transporte de nêutrons monoenergética em geometria cartesiana unidimensional com fonte de espalhamento isotrópica para problemas de autovalor (43) e suas respectivas condições de contorno, aparecem na formulação de ordenadas discretas como

$$\begin{aligned} \mu_m \frac{d}{dx} \psi_m(x) + \sigma_t(x) \psi_m(x) &= \frac{1}{2} \sigma_{s0}(x) \sum_{n=1}^N \psi_n(x) \omega_n \\ &+ \frac{1}{2} \frac{\nu \sigma_f(x)}{k_{eff}} \sum_{n=1}^N \psi_n(x) \omega_n, \quad m = 1 : N. \end{aligned} \quad (48)$$

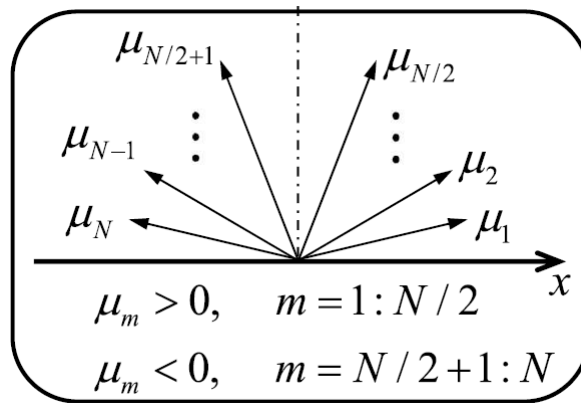


Figura 9 – Simetria das ordenadas discretas da quadratura *Gauss-Legendre* para o problema unidimensional.

Tabela 1 – Valores das ordenadas discretas e seus respectivos pesos da quadratura de *Gauss-Legendre* para S_2 , S_4 e S_8

S_N	m	Ordenada (μ_m)	Pesos ω_m
S_2	1	0.5773502691	1.0000000000
S_4	1	0.8611363115	0.3399810435
	2	0.3478548451	0.6521451549
S_8	1	0.9602898564	0.5255324099
	2	0.1012285363	0.3137066459
	3	0.7966664774	0.1834346424
	4	0.2223810344	0.3626837834

com condições de contorno:

- Prescritas:

- $\psi_m(0) = f_m, \quad \mu_m > 0;$
- $\psi_m(L) = g_m, \quad \mu_m < 0.$

- Reflexivas:

- $\psi_m(0) = \psi_{m'}(0), \quad \mu_m = -\mu_{m'}, \quad \mu_m > 0;$
- $\psi_m(L) = \psi_{m'}(L), \quad \mu_m = -\mu_{m'}, \quad \mu_m < 0.$

2.2.2 Equações S_N geometria bidimensional

As equações S_N obtidas a partir da aplicação do método de ordenadas discretas sobre a equação estacionária de transporte de nêutrons monoenergética em geometria

cartesiana bidimensional com fonte de espalhamento isotrópica para problemas de autovalor (45) e suas respectivas condições de contorno, aparecem na forma

$$\begin{aligned} \mu_m \frac{\partial}{\partial x} \psi_m(x, y) + \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \psi_m(x, y) + \sigma_t(x, y) \psi_m(x, y) = \\ \frac{1}{4} \sigma_{s0}(x, y) \sum_{n=1}^M \psi_n(x, y) \omega_n + \frac{1}{4} \frac{\nu \sigma_f(x, y)}{k_{eff}} \sum_{n=1}^M \psi_n(x, y) \omega_n \end{aligned} \quad (49)$$

com condições de contorno:

- Prescritas:

- $\psi_m(0, y) = f_m(y), \quad \mu_m > 0;$
- $\psi_m(X, y) = g_m(y), \quad \mu_m < 0;$
- $\psi_m(x, 0) = u_m(x), \quad \eta_m > 0;$
- $\psi_m(x, Y) = v_m(x), \quad \eta_m < 0.$

- Reflexivas:

- $\psi_m(0, y) = \psi_{m'}(0, y), \quad \mu_m = -\mu_{m'}, \quad \mu_m > 0;$
- $\psi_m(X, y) = \psi_{m'}(X, y), \quad \mu_m = -\mu_{m'}, \quad \mu_m < 0;$
- $\psi_m(x, 0) = \psi_{m'}(x, 0), \quad \eta_m = -\eta_{m'}, \quad \eta_m > 0;$
- $\psi_m(x, Y) = \psi_{m'}(x, Y), \quad \eta_m = -\eta_{m'}, \quad \eta_m < 0.$

Na Eq. (49), ω_n é o peso da quadratura angular na direção n ; m representa uma direção ou ordenada discreta, $m = 1..M$; a quantidade de ordenadas discretas M para uma quadratura angular de ordem N segundo (LEWIS; MILLER, 1984) calcula-se como $M = N(N + 2)/2$. Portanto, utilizando o método de ordenadas discretas, convertamos a Eq. (45) em um sistema de M equações diferenciais parciais de primeira ordem (49) acopladas pelo termo de espalhamento. O fluxo escalar de nêutrons (46) é aproximado por

$$\phi(x, y) \approx \frac{1}{4} \sum_{n=1}^M \psi_n(x, y) \omega_n. \quad (50)$$

A quadratura utilizada na aproximação da integral em Eq. (46) é a quadratura de simetria de níveis (*Level Symmetric Quadrature*), (LEWIS; MILLER, 1984), onde definimos $\{\mu_m, \eta_m\}$ e $\{\omega_m\}$, $m = 1..M$ como o conjunto de ordenadas discretas e o conjunto de pesos da quadratura, respectivamente, enfatizamos que a direção m e o par ordenado (μ_m, η_m) representa uma direção discreta. Detalhes sobre a quadratura de simetria de níveis podem ser encontrados em (LEWIS; MILLER, 1984). A Tabela 2 mostra os valores dos parâmetros da quadratura para $N = 2, 4$ e 8 .

Tabela 2 – Valores das ordenadas discretas e seus respectivos pesos da quadratura de simetria de níveis para S_2 , S_4 e S_8

S_N	m	Ordenada (μ_m, η_m)	Pesos ω_m	M
S_2	1	0.5773502	1.0000000	4
S_4	1	0.3500212	0.3333333	12
	2	0.8688903	0.3333333	
S_8	1	0.2182179	0.1209877	40
	2	0.5773503	0.0907407	
	3	0.7867958	0.0907407	
	4	0.9511897	0.1209877	

A representação das direções angulares para $N = 2$ e 4 são mostrada nas Figuras 10 e 11, respectivamente.

Uma vez obtidas as formulações S_N para os problemas unidimensional e bidimensional, com suas respectivas condições de contorno, através do método de ordenadas discretas S_N , a solução das equações de transporte de nêutrons (43) e (45) junto às respectivas condições de contorno se resume à resolução de um sistema de equações diferenciais ordinárias, problema unidimensional, e parciais, problema bidimensional. Os sistemas de equações representados por (48) e (49) são resolvidos numericamente utilizando métodos de discretização espacial, que consistem em discretizar as variáveis espaciais. No próximo capítulo discutimos alguns métodos de discretização espacial convencionais utilizados na resolução das equações S_N dos problema unidimensionais e bidimensionais. No capítulo 4 apresentamos o método de discretização espacial de grades compostas proposto nesta dissertação.

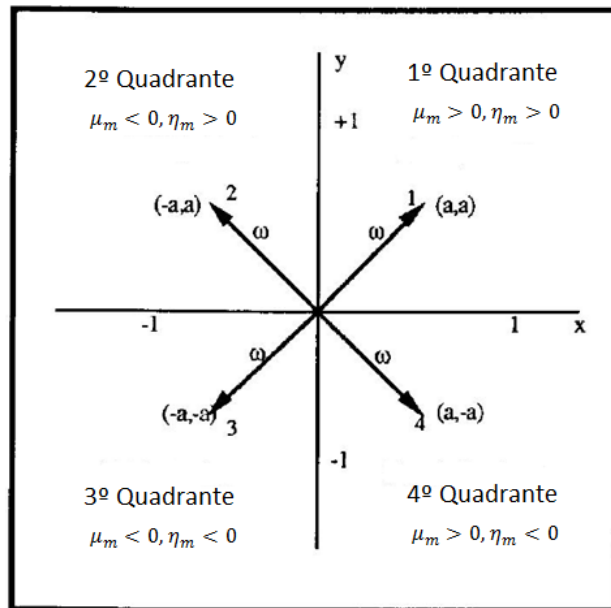


Figura 10 – Representação das direções angulares da quadratura de simetria de níveis S_2 para o problema bidimensional.

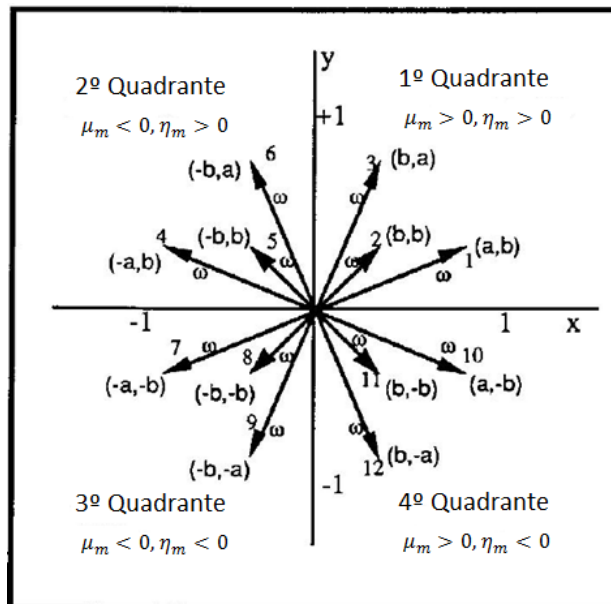


Figura 11 – Representação das direções angulares da quadratura de simetria de níveis S_4 para o problema bidimensional.

3 Métodos Numéricos

No presente capítulo, apresentamos de forma sucinta os métodos numéricos convencionais de discretização espacial utilizados neste trabalho para resolver problemas unidimensionais e bidimensionais de transporte de nêutrons modelados pela equação de transporte (48) e (49), bem como, apresentamos os esquemas numéricos iterativos para solucionar as equações constitutivas dos métodos de discretização espacial.

A aplicação generalizada de métodos analíticos para resolver problemas modelados por equações diferenciais com diferentes geometrias e condições de contorno em meios heterogêneos, torna complexa ou até mesmo impossível a obtenção de uma solução exata do problema, dessa forma, utilizamos métodos numéricos de discretização espacial, a fim de mitigar a complexidade na solução de problemas de equações diferenciais. O processo de discretização das variáveis espaciais consiste em transformar o domínio contínuo de um problema em um conjunto de valores discretos, onde as incógnitas a serem obtidas são aproximadas por funções que definem o método de discretização espacial utilizado. Na seção 3.1 detalhamos o processo de obtenção das equações de balanço espacial e discutimos o método de discretização espacial espectral nodal SD (*Spectral Diamond*) para resolver problemas unidimensionais de transporte de nêutrons, que é um dos pontos de partida do método de grades compostas proposto nesta dissertação. Na seção 3.2 deste capítulo, mostramos o procedimento para obtermos as equações de balanço espacial e apresentamos os métodos de discretização espacial DD (*Diamond Difference*) e SD-SGF-CN (*Spectral Diamond - Spectral Green's Function - Constant Nodal*) para resolver problemas bidimensionais de transporte de nêutrons, os quais utilizamos em nosso trabalho no intuito de produzir resultados para validação do método proposto. Por último na seção 3.3, oferecemos uma breve discussão dos esquemas iterativos de solução numérica das equações que compõem os métodos de discretização espacial.

3.1 Problema unidimensional

A primeira etapa do processo de discretização das variáveis espaciais consiste em obter as equações de balanço espacial de ordem l . Para isto, inicialmente, consideramos um domínio unidimensional de comprimento L , onde definimos uma malha espacial uniforme Γ composta por I células espaciais Γ_i com propriedades físicas consideradas constantes no interior de cada célula espacial, cujo comprimento h_i equivale à diferença entre os pontos $x_{i+1/2}$ e $x_{i-1/2}$ do domínio, conforme ilustra a Figura 12.

A formulação de ordenadas discretas S_N da equação de transporte de nêutrons

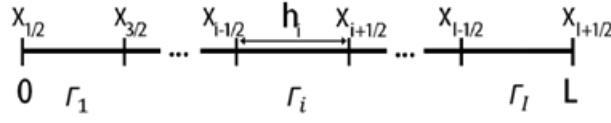


Figura 12 – Domínio discretizado do problema unidimensional.

unidimensional, Eq.(48), aparece em cada célula espacial Γ_i como

$$\mu_m \frac{d}{dx} \psi_m(x) + \sigma_{t_i} \psi_m(x) = \frac{\sigma_{s0_i}}{2} \sum_{n=1}^N \psi_n(x) \omega_n + \frac{\nu \sigma_{f_i}}{2k_{eff}} \sum_{n=1}^N \psi_n(x) \omega_n, \quad (51)$$

com condições de contorno:

- Prescritas:

- $\psi_{m,1/2} = f_m, \quad m = 1 : N/2;$
- $\psi_{m,I+1/2} = g_m, \quad m = (N/2) + 1 : N.$

- Reflexivas:

- $\psi_{m,1/2} = \psi_{m',1/2}, \quad \mu_m = -\mu_{m'}, \quad m = 1 : N/2;$
- $\psi_{m,I+1/2} = \psi_{m',I+1/2}, \quad \mu_m = -\mu_{m'}, \quad m = (N/2) + 1 : N,$

onde, $x \in [x_{i-1/2}, x_{i+1/2}]$ com $i = 1 : I$ e $m = 1 : N$.

Neste momento, para obtermos as equações S_N de balanço espacial de ordem l , aplicamos o operador integral,

$$\frac{2l+1}{h_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} P_l \left[\frac{2(x-x_i)}{h_i} \right] \bullet dx, \quad (52)$$

nas equações S_N (51), onde $x_i = \frac{x_{i-1/2} + x_{i+1/2}}{2}$ representa o ponto médio no interior das células espaciais Γ_i e P_l representa o polinômio de Legendre de grau l .

Os métodos numéricos de discretização espacial utilizados neste trabalho envolvem apenas momentos espaciais de ordem zero, dessa forma, obtemos apenas equações S_N de balanço espacial de ordem zero, onde utilizamos no operador integral (52) o polinômio de Legendre de grau zero, i. e., $l = 0$. As equações S_N de balanço espacial de ordem zero aparecem na forma,

$$\frac{\psi_{m,i+1/2} - \psi_{m,i-1/2}}{\alpha_{m,i}} + \psi_{m,i} = S_{SC_i} + S_{F_i} \quad (53)$$

onde definimos: $\psi_{m,i\pm 1/2}$ como os fluxos angulares de nêutrons que se deslocam nas direções angulares discretas μ_m definidos nas arestas da célula espacial Γ_i ;

$$\alpha_{m,i} = \frac{h_i \sigma_{t_i}}{\mu_m}, \quad (54)$$

como uma constante utilizada para simplificar a equação (53), que envolve a seção de choque macroscópica total e o comprimento da célula espacial Γ_i , e os valores das direções angulares μ_m da quadratura de Gauss-Legendre;

$$\psi_{m,i} = \frac{1}{h_i} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \psi_m(x) dx, \quad (55)$$

como o fluxo angular médio na célula espacial Γ_i ;

$$S_{SC_i} = \frac{\sigma_{s0_i}}{2\sigma_{t_i}} \sum_{n=1}^N \psi_{n,i} \omega_n, \quad (56)$$

como o termo de fonte de espalhamento; e

$$S_{F_i} = \frac{\nu \sigma_{f_i}}{2k_{eff} \sigma_{t_i}} \sum_{n=1}^N \psi_{n,i} \omega_n, \quad (57)$$

como o termo de fonte de fissão.

Para cada célula espacial Γ_i , as N equações (53) constituem o sistema de equações S_N de balanço espacial de ordem zero com $2N$ incógnitas, que correspondem aos N fluxos angulares $\psi_{m,i}$ mediados na célula espacial Γ_i adicionados aos N fluxos angulares emergentes $\psi_{m,i\pm 1/2}$ definidos nos pontos de contorno $x_{i\pm 1/2}$ da célula Γ_i para $\mu_m \gtrless 0$, respectivamente, uma vez que os fluxos incidentes advêm das condições de contorno ou das condições de interface das células espaciais adjacentes à célula Γ_i , conforme mostra a Figura 13.

Portanto, as equações S_N de balanço espacial de ordem zero fornecem um sistema de equações lineares e algébricas, solúvel e indeterminado, dessa forma, para garantirmos solução única para este sistema, devemos introduzir N equações auxiliares

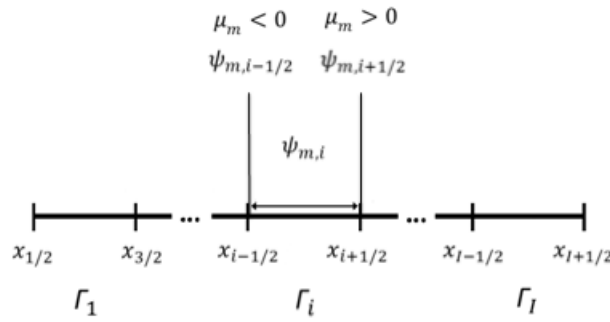


Figura 13 – Representação da distribuição de incógnitas em uma célula arbitrária Γ_i unidimensional.

que envolvem grandezas médias na célula espacial e grandezas localizadas nas arestas da célula Γ_i .

Dando continuidade ao processo de construção do sistema de equações discretizadas, devemos introduzir equações auxiliares adicionais às equações S_N de balanço espacial de ordem zero. Existem diversos métodos numéricos de solução que introduzem funções auxiliares para solucionar as equações S_N de balanço espacial de ordem zero (53), dentre os quais podemos destacar: o método de malha fina DD, apresentado à comunidade científica por (CARLSON; LATHROP, 1968), que aproxima as grandezas médias na célula espacial por funções constantes; o método de malha média LD (*Linear Discontinuous*), descrito por (REED, 1973) e (COURTOT, 1981), que aproxima as grandezas médias na célula espacial por funções lineares; e os métodos de malha grossa, métodos nodais, que aproximam as grandezas médias na célula espacial por funções de ponderação que envolvem os fluxos incidentes e emergentes da célula espacial Γ_i , estas funções apresentam parâmetros que preservam a solução analítica do problema unidimensional. Os métodos nodais podem ser divididos em duas classes: os métodos nodais polinomiais, tais como CN (*Constant Nodal*) e LN (*Linear Nodal*) desenvolvidos por (WALTERS; O'DELL, 1980), (BADRUZZAMAN, 1990) e (WALTERS, 1986), respectivamente, introduzem uma expansão polinomial de baixa ordem para o termo de fonte de espalhamento; já os métodos espectro-nodais, tais como o SGF, para problemas de fonte fixa, e SD, para problemas de autovalor, desenvolvidos por (BARROS; LARSEN, 1991) e (ABREU, 1996) respectivamente, tratam os termos de fonte de espalhamento de forma analítica.

A seguir, discutimos o método SD para resolver as equações S_N de balanço espacial de ordem zero (53) utilizado como base do método de grades compostas proposto neste trabalho para resolver os problemas unidimensionais acoplados pelos termos de fuga transversal.

3.1.1 Método *Spectral Diamond*

O método espectro nodal SD foi desenvolvido por (ABREU, 1996) no intuito de obter uma solução numérica dominante para problemas unidimensionais de autovalor multiplicativo na formulação de ordenadas discreta S_N a um grupo de energia. O desenvolvimento deste método utilizou como base alguns aspectos relevantes das equações auxiliares do método espectro-nodal SGF para problemas estacionários unidimensionais de fonte fixa. Adicionalmente à proposta do método SGF, que aproxima as grandezas médias na célula espacial por uma ponderação dos fluxos incidentes na célula espacial Γ_i através de parâmetros espectrais que preservam as relações obtidas da solução geral local do problema S_N unidimensional, o método SD adota também a ponderação dos fluxos emergentes definidos nos pontos de contorno $x_{i\pm 1/2}$ da célula espacial Γ_i para expressar a contribuição da fonte de fissão nesta célula, conforme ilustra a Figura 14.

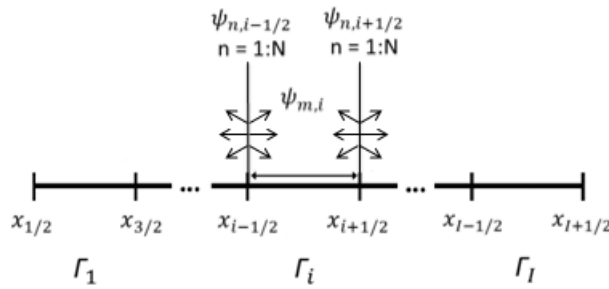


Figura 14 – Representação do fluxo angular médio em uma célula arbitrária Γ_i unidimensional para o método SD.

As equações auxiliares, que descrevem a proposta do método SD, aparecem na forma genérica

$$\psi_{m,i} = \sum_{n=1}^N \Theta_{m,n} (\psi_{n,i-1/2} + \psi_{n,i+1/2}), \quad (58)$$

onde, $\psi_{m,i}$ denota o fluxo angular mediado em uma célula espacial arbitrária Γ_i , $\psi_{i\pm 1/2}$ expressam os fluxos angulares localizados nos pontos de contorno $x_{i\pm 1/2}$ da célula espacial Γ_i e $\Theta_{m,n}$ são os pesos que ponderam a contribuição dos fluxos angulares incidentes e emergentes. Através dos pesos $\Theta_{m,n}$, denominados também parâmetros espectrais, preservamos a solução analítica geral local, a qual é obtida aplicando o método de “separação de variáveis” na Eq. (51), análogo ao utilizado por (CASE; ZWEIFEL, 1967). Este procedimento é conhecido como análise espectral das equações S_N .

As soluções analíticas gerais das equações S_N de balanço espacial de ordem zero (53) aparecem como

$$\psi_m(x) = \sum_{k=1}^N \beta_k a_m(\vartheta_k) e^{\frac{\sigma_t x}{\vartheta_k}}, m = 1 : N, \quad (59)$$

onde $\beta_k \in \mathbb{R}$, $k = 1 : N$ são constantes arbitrárias, $a_m(\vartheta_k)$ são componentes do autovetor associado ao autovalor ϑ_k .

Para obtermos expressões que calculam os parâmetros espectrais $\Theta_{m,n}$ de forma a preservarem incondicionalmente a solução analítica geral das equações S_N de balanço espacial de ordem zero (53) no interior das células espaciais Γ_i , utilizamos a solução analítica geral (59) para calcular as grandezas $\psi_{m,i}$, $\psi_{m,i\pm 1/2}$ da célula espacial arbitrária Γ_i e substituímos as expressões resultantes na equação auxiliar (58), onde obtemos a expressão

$$\frac{a_m(\vartheta_k) \vartheta_k}{h_i \sigma_{t_i}} \tanh \left[\frac{h_i \sigma_{t_i}}{2 \vartheta_k} \right] = \sum_{n=1}^N \Theta_{m,n} a_n(\vartheta_k) \quad m = 1 : N. \quad (60)$$

para o cálculo dos parâmetros espectrais $\Theta_{m,n}$. Em problemas de autovalor, a depender dos valores das seções de choque do domínio e da estimativa do coeficiente efetivo de multiplicação, os autovalores ϑ_k obtidos a partir da análise espectral podem assumir valores reais ou imaginários puros, i. e, $\vartheta_k = \pm i \gamma_k$. Dessa forma, a expressão (60) deve ser utilizada para calcular apenas os parâmetros espectrais associados aos autovalores ϑ_k reais. As expressões para calcular os parâmetros espectrais associados aos autovalores imaginários puro pode ser obtida após uma análise complexa da expressão (60) e a identificação das partes real e imaginária resultantes dessa análise. Após esta análise complexa, as expressões que permitem obter os parâmetros espectrais associados aos autovalores imaginários puro ϑ_k assumem a seguinte forma

$$\frac{\gamma_k \mu_m}{h_i \sigma_{t_i} (\mu_m^2 + \gamma_k^2)} \tan \left[\frac{h_i \sigma_{t_i}}{2 \gamma_k} \right] = \sum_{n=1}^N \Theta_{m,n} \frac{\mu_n}{(\mu_n^2 + \gamma_k^2)} \quad m = 1 : N. \quad (61)$$

$$\frac{\gamma_k}{h_i \sigma_{t_i} (\mu_m^2 + \gamma_k^2)} \tan \left[\frac{h_i \sigma_{t_i}}{2 \gamma_k} \right] = \sum_{n=1}^N \Theta_{m,n} \frac{1}{(\mu_n^2 + \gamma_k^2)} \quad m = 1 : N. \quad (62)$$

As expressões (60) ou (61) e (62) formam N sistemas lineares com N equações que nos permite obter os valores dos N^2 parâmetros espectrais $\Theta_{m,n}$. Devido à quadratura

de Gauss-Legendre utilizada na discretização das variáveis angulares da equação de transporte de nêutrons (43) para problemas unidimensionais, os valores dos parâmetros espectrais $\Theta_{m,n}$ formam uma matriz com dimensões $N \times N$ considerada simétrica por blocos 2×2 . A Figura 15 ilustra a simetria desta matriz.

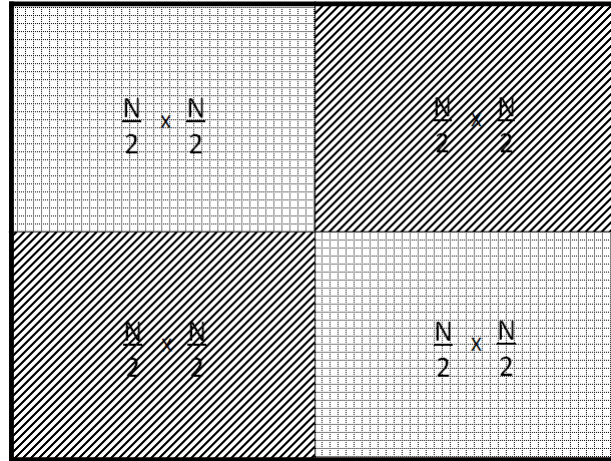


Figura 15 – Representação das matrizes simétricas por blocos 2×2 dos parâmetros espectrais $\Theta_{m,n}$.

Uma vez que as equações auxiliares (58) constituem uma extensão das equações auxiliares tradicionais, as quais são adequadas ao emprego do esquema numérico iterativo SI (*Source Iteration*) discutido na seção 3.3, (ABREU, 1996) propôs um esquema numérico iterativo similar ao tradicional esquema iterativo SI. Essa similaridade é limitada pelo acoplamento angular expresso nas equações auxiliares (58) e se refere exclusivamente ao tratamento explícito e à invariância na iteração corrente das fontes angulares de espalhamento mediadas nas correspondentes células espaciais. Pela similaridade do esquema iterativo proposto por (ABREU, 1996) ao esquema iterativo SI, adotou-se a denominação esquema iterativo SI modificado, o qual é detalhado na seção 4.5 do capítulo 4.

As equações de varredura do esquema numérico iterativo SI modificado para solucionar as equações constitutivas do método SD podem ser obtidas substituindo Eq. (58) na Eq. (53) e explicitando o fluxo emergente na direção m , os resultados desta substituição aparecem na forma:

- Para $\mu_m > 0$, explicitamos os fluxos angulares em Eq. (53) que emergem da célula espacial arbitrária Γ_i através da aresta no ponto $x_{i+1/2}$, conforme Figura 14, e

obtemos

$$\psi_{m,i+1/2} = \left(\frac{1 - \alpha_{m,i}\Theta_{m,m}}{1 + \alpha_{m,i}\Theta_{m,m}} \right) \psi_{m,i-1/2} + \frac{\alpha_{m,i}}{1 + \alpha_{m,i}\Theta_{m,m}} [S_{SC_i} + S_{F_i} - \sum_{n=1|n \neq m}^N \Theta_{m,n} (\psi_{n,i-1/2} + \psi_{n,i+1/2})] ; \quad (63)$$

- Para $\mu_m < 0$, explicitamos os fluxos angulares em Eq. (53) que emergem da célula espacial arbitrária Γ_i através da aresta no ponto $x_{i-1/2}$, conforme Figura 14, e obtemos

$$\psi_{m,i-1/2} = \left(\frac{1 + \alpha_{m,i}\Theta_{m,m}}{1 - \alpha_{m,i}\Theta_{m,m}} \right) \psi_{m,i+1/2} - \frac{\alpha_{m,i}}{1 - \alpha_{m,i}\Theta_{m,m}} [S_{SC_i} + S_{F_i} - \sum_{n=1|n \neq m}^N \Theta_{m,n} (\psi_{n,i-1/2} + \psi_{n,i+1/2})] . \quad (64)$$

A Figura 16 mostra os principais passos do algoritmo computacional do método SD, o qual combina o método iterativo de potência (BURDEN; FAIRES, 2010), para obter uma estimativa para o autovalor dominante k_{eff} da formulação de ordenadas discretas S_N do problema unidimensional, ao esquema numérico iterativo SI modificado que resolve iterativamente os sistemas de equações lineares e algébricas formado pelas equações constitutivas do método SD para o problema S_N unidimensional.

3.2 Problema bidimensional

Para obtermos as equações S_N de balanço espacial para o problema bidimensional através do processo de discretização das variáveis espaciais, primeiramente consideramos um domínio de cálculo bidimensional retangular em $\mathbb{R}^2$ com dimensões (X, Y) , discretizado em $I \times J$ células retangulares $\Gamma_{i,j}$ de comprimento $h_{i,j}^x$ e altura $h_{i,j}^y$, onde as propriedades físicas são constantes. A Figura 17 ilustra este domínio.

As equações S_N da formulação de ordenadas discretas da equação de transporte de nêutrons para problemas bidimensionais, Eq. (49), aparece em cada célula espacial arbitrária $\Gamma_{i,j}$ como

$$\mu_m \frac{\partial}{\partial x} \psi_m(x, y) + \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \psi_m(x, y) + \sigma_{t_{i,j}} \psi_m(x, y) = \frac{\sigma_{s0_{i,j}}}{4} \sum_{n=1}^M \psi_n(x, y) \omega_n + \frac{\nu \sigma_{f_{i,j}}}{4k_{eff}} \sum_{n=1}^M \psi_n(x, y) \omega_n \quad (65)$$

com condições de contorno:

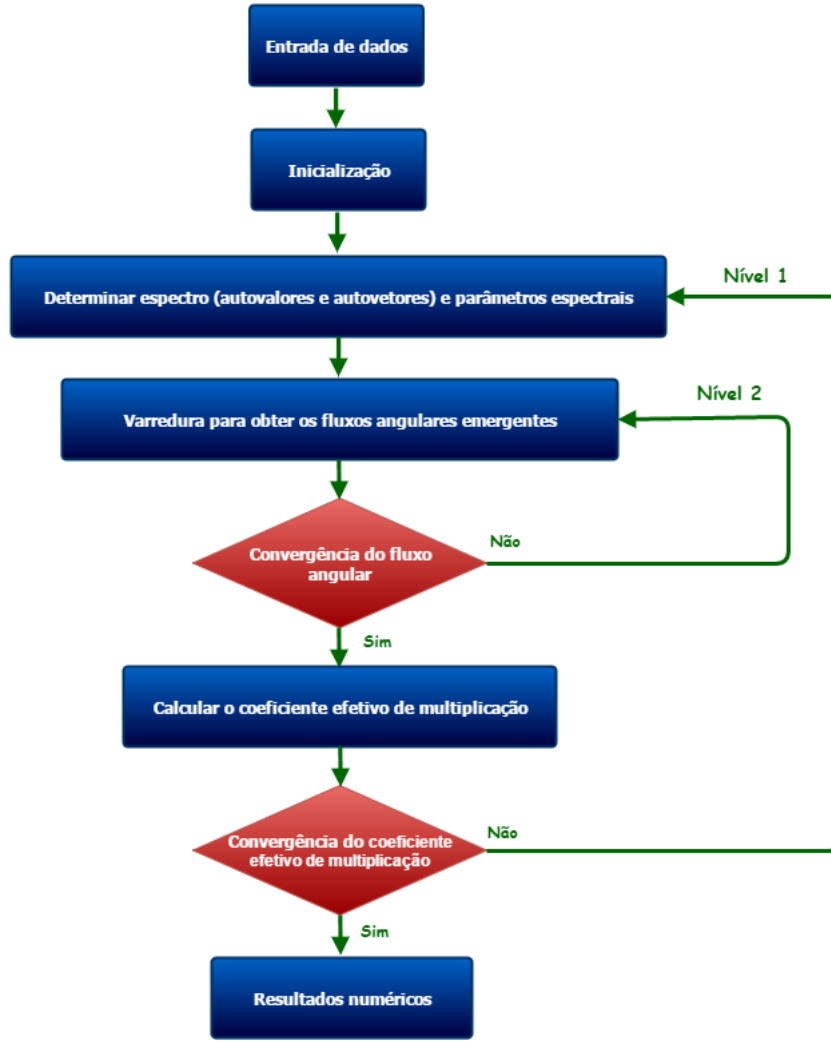


Figura 16 – Algoritmo computacional do método SD.

• Prescrita:

- $\psi_{m,1/2,j} = f_{m,j}, \quad j = 1 : J, \quad m = 1 : M/4; m = (3M/4) + 1 : M;$
- $\psi_{m,I+1/2,j} = g_{m,j}, \quad j = 1 : J, \quad m = (M/4) + 1 : M/2; m = (M/2) + 1 : 3M/4;$
- $\psi_{m,i,1/2} = u_{m,i}, \quad i = 1 : I, \quad m = 1 : M/2;$
- $\psi_{m,i,J+1/2} = v_{m,i}, \quad i = 1 : I, \quad m = (M/2) + 1 : M.$

• Reflexiva:

- $\psi_{m,1/2,j} = \psi_{m',1/2,j}, \quad j = 1 : J, \quad \mu_m = -\mu_{m'}, \quad m = 1 : M/4; m = (3M/4) + 1 : M;$
- $\psi_{m,I+1/2,j} = \psi_{m',I+1/2,j}, \quad j = 1 : J, \quad \mu_m = -\mu_{m'}, \quad m = (M/4) + 1 : M/2; m = (M/2) + 1 : 3M/4;$
- $\psi_{m,i,1/2} = \psi_{m',i,1/2}, \quad i = 1 : I, \quad \eta_m = -\eta_{m'}, \quad m = 1 : M/2;$

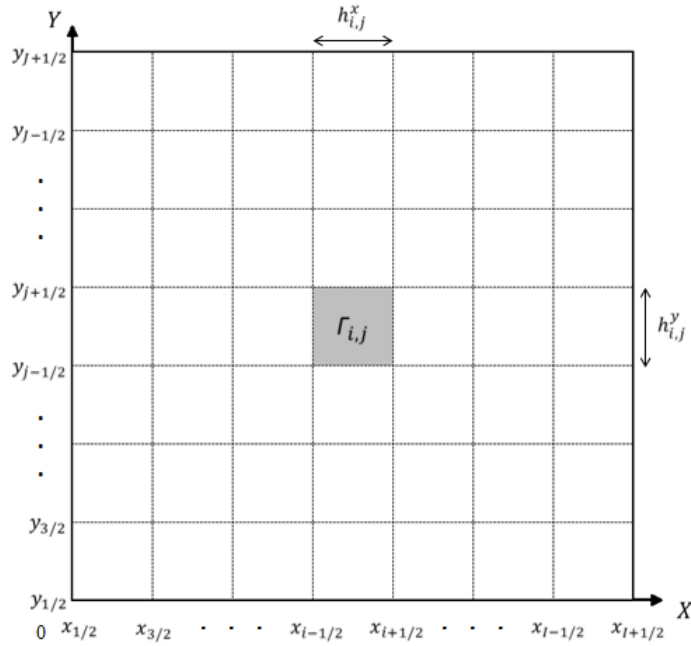


Figura 17 – Domínio bidimensional retangular discretizado.

$$- \psi_{m,i,J+1/2} = \psi_{m',i,J+1/2}, \quad i = 1 : I, \quad \eta_m = -\eta_{m'}, \quad m = (M/2) + 1 : M,$$

onde, $(x, y) \in \mathbb{R}^2$ com $i = 1 : I$, $j = 1 : J$ e $m = 1 : M$.

As equações discretizadas de balanço espacial são obtidas aplicando o operador

$$\frac{(2l+1)(2r+1)}{h_{i,j}^x h_{i,j}^y} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} P_l \left[\frac{2(x-x_i)}{h_{i,j}^x} \right] P_r \left[\frac{2(y-y_j)}{h_{i,j}^y} \right] \bullet dx dy \quad (66)$$

em cada termo da Eq. (65), onde $x_i = \frac{x_{i-1/2} + x_{i+1/2}}{2}$ representa o ponto médio no interior da célula espacial $\Gamma_{i,j}$ no eixo x , $y_j = \frac{y_{j-1/2} + y_{j+1/2}}{2}$ representa o ponto médio no interior da célula espacial $\Gamma_{i,j}$ no eixo y , P_l e P_r representam os polinômios de Legendre de grau l e r , respectivamente.

Como mencionado anteriormente na seção 3.1 deste capítulo, os métodos numéricos de discretização espacial utilizados neste trabalho envolvem apenas os momentos espaciais de ordem zero, dessa forma, fazemos $l = r = 0$ na Eq. (66), e obtemos as seguintes equações S_N de balanço espacial de ordem zero para o problema bidimensional

$$\frac{\tilde{\psi}_{m,i+1/2,j} - \tilde{\psi}_{m,i-1/2,j}}{\alpha_{m,i,j}^x} + \frac{\hat{\psi}_{m,i,j+1/2} - \hat{\psi}_{m,i,j-1/2}}{\alpha_{m,i,j}^y} + \bar{\psi}_{m,i,j} = S_{SC_{i,j}} + S_{F_{i,j}}, \quad m = 1 : M, \quad (67)$$

onde definimos: $\tilde{\psi}_{m,i\pm 1/2,j}$ como os fluxos angulares de nêutrons que se deslocam nas direções angulares discretas (μ_m, η_m) definidos nas arestas da direção espacial $x, x_{i\pm 1/2}$, e mediados em y_j ; $\hat{\psi}_{m,i,j\pm 1/2}$ como os fluxos angulares de nêutrons que se deslocam nas direções angulares discretas (μ_m, η_m) definidos nas arestas da direção espacial $y, y_{j\pm 1/2}$, e mediados em x_i ;

$$\alpha_{m,i,j}^x = \frac{h_{i,j}^x \sigma_{t_{i,j}}}{\mu_m} \quad (68)$$

e

$$\alpha_{m,i,j}^y = \frac{h_{i,j}^y \sigma_{t_{i,j}}}{\eta_m}, \quad (69)$$

como constantes utilizadas para simplificar a equação (67), que envolvem as dimensões da célula espacial $\Gamma_{i,j}$, a seção de choque macroscópica total desta célula e os valores das componentes que formam os pares ordenados para representar as direções angulares da quadratura de simetria de níveis μ_m e η_m , respectivamente;

$$\bar{\psi}_{m,i,j} = \frac{1}{h_{i,j}^x h_{i,j}^y} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \psi_m(x, y) dx dy, \quad (70)$$

como o fluxo angular médio em $\Gamma_{i,j}$;

$$S_{SC_{i,j}} = \frac{\sigma_{s0_{i,j}}}{4\sigma_{t_{i,j}}} \sum_{n=1}^M \bar{\psi}_{n,i,j} \omega_n, \quad (71)$$

como o termo de fonte de espalhamento; e

$$S_{F_{i,j}} = \frac{\nu \sigma_{f_{i,j}}}{4k_{eff} \sigma_{t_{i,j}}} \sum_{n=1}^M \bar{\psi}_{n,i,j} \omega_n, \quad (72)$$

como o termo de fonte de fissão.

Em cada célula espacial $\Gamma_{i,j}$, as equações S_N de balanço espacial de ordem zero (67) fornecem um sistema de M equações lineares e algébricas com $3M$ incógnitas: os fluxos angulares emergentes $\tilde{\psi}_{m,i\pm 1/2,j}$ e $\hat{\psi}_{m,i,j\pm 1/2}$ mediados nas arestas da célula $\Gamma_{i,j}$ nas direções de varredura, e os fluxos angulares mediados na célula espacial $\Gamma_{i,j}$, conforme mostra a Figura 18, lembrando que os fluxos incidentes advém das condições de contorno ou das condições de interface das células espaciais adjacentes à célula $\Gamma_{i,j}$.

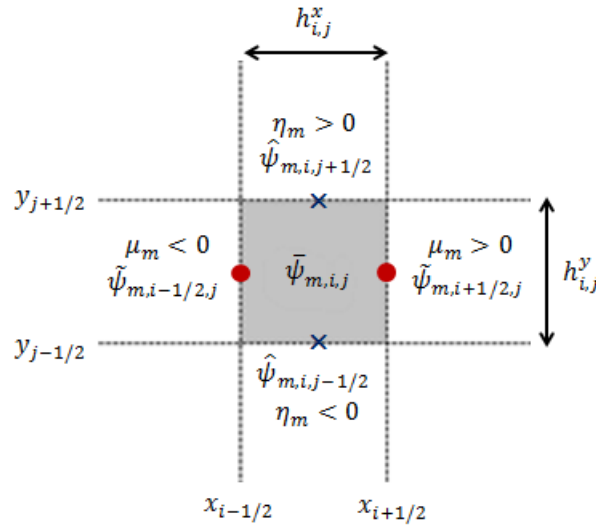


Figura 18 – Representação da distribuição de incógnitas em uma célula arbitrária $\Gamma_{i,j}$ bidimensional.

O sistema composto por M equações lineares e algébricas com $3M$ incógnitas fornecido pelas equações S_N de balanço espacial de ordem zero (67) é possível porém indeterminado, dessa forma, devem ser incluídas $2M$ equações auxiliares para garantir a solução única deste sistema. Estas equações auxiliares aproximam os fluxos angulares mediados na célula espacial $\Gamma_{i,j}$ em função de fluxos angulares incidentes ou emergentes mediados nas arestas desta célula.

Para inserirmos as equações auxiliares nos sistemas formados pelas equações S_N de balanço espacial de ordem zero (67), recorreremos aos diversos métodos numéricos de discretização espacial que possuem funções de aproximação de grandezas médias que definem suas características. Dentre estes métodos temos: os métodos de malha fina como o DD (LEWIS; MILLER, 1984); os métodos de malha média, como os métodos de elementos finitos LD (REED, 1973) e (COURTOT, 1981); os métodos nodais de malha grossa, que utilizam o procedimento de integração transversal, e podem ser divididos em métodos nodais polinomiais e espectro nodais: os métodos nodais polinomiais aproximam os termos de fonte e de fugas transversal por polinômios de baixa ordem como os métodos CCN (*Constant Constant Nodal*) (WALTERS; O'DELL, 1980) e LN (BADRUZZAMAN, 1990); os métodos espectro nodais aproximam o termo de fuga transversal e tratam o termo de fonte analiticamente, por exemplo SGF-CN (BARROS; LARSEN, 1992), SD-SGF-CN (FILHO, 1999) e SGF-LN (DOMINGUEZ; BARROS, 2007).

Na seguinte subseção, apresentamos o método de discretização espacial DD, que utilizamos em nosso trabalho a fim de avaliar a precisão e o desempenho computacional do método de grades compostas proposto nesta dissertação.

3.2.1 Método *Diamond Difference*

Nesta subseção discutimos o método de malha fina convencional *Diamond Difference* apresentado à comunidade científica por (CARLSON; LATHROP, 1968). Este método é frequentemente denominado método de diferenças finitas, sendo um dos primeiros e mais simples métodos de discretização espacial desenvolvidos com o objetivo de resolver numericamente as equações S_N . O DD é classificado como um método de malha fina devido a aproximar as grandezas médias das células espaciais por uma constante, no caso do DD, as equações auxiliares aproximam os fluxos angulares médios no interior da célula espacial pela média aritmética dos valores dos fluxos angulares mediados nas arestas da célula nos eixos x e y , conforme mostram as Figuras 19 e 20, respectivamente. De forma geral, os métodos de malha fina apresentam dificuldades em resolver problemas com fortes gradientes no fluxo angular de nêutrons se as células da malha utilizada não forem suficientemente pequenas.

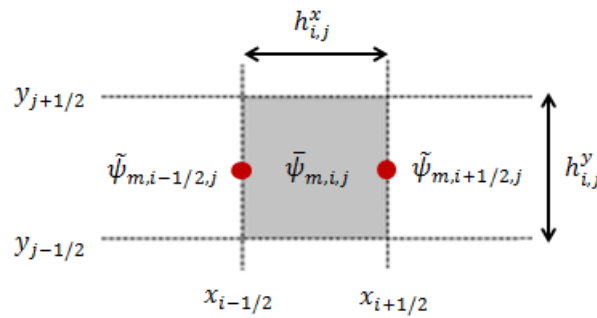


Figura 19 – Representação do fluxo angular médio em uma célula arbitrária $\Gamma_{i,j}$ bidimensional no eixo x para o método DD.

As equações auxiliares do DD aparecem na forma:

- Considerando o eixo x , temos

$$\bar{\psi}_{m,i,j} = \frac{\tilde{\psi}_{m,i-1/2,j} + \tilde{\psi}_{m,i+1/2,j}}{2}; \quad (73)$$

- Considerando o eixo y , temos

$$\bar{\psi}_{m,i,j} = \frac{\hat{\psi}_{m,i,j-1/2} + \hat{\psi}_{m,i,j+1/2}}{2}. \quad (74)$$

Na Eq. (73) os M fluxos angulares médios são calculados em função da média dos valores dos fluxos angulares na mesma direção angular m definidos nos pontos $x_{i\pm 1/2}$

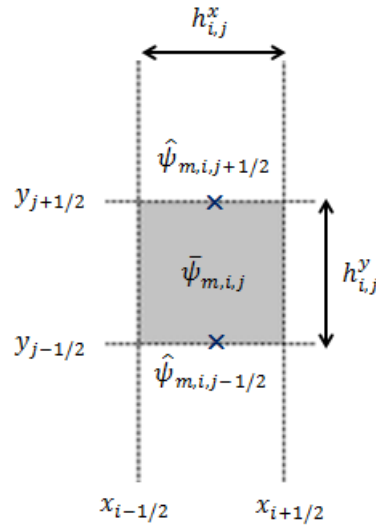


Figura 20 – Representação do fluxo angular médio em uma célula arbitrária $\Gamma_{i,j}$ bidimensional no eixo y para o método DD.

da célula $\Gamma_{i,j}$ e mediados em y_j , já na Eq. (74) os M fluxos angulares médios são calculados em função da média dos valores dos fluxos angulares na mesma direção angular m definidos nos pontos $y_{j\pm 1/2}$ da célula $\Gamma_{i,j}$ e mediados em x_i .

Em virtude do desacoplamento angular nas equações auxiliares (73) e (74) do método DD, isto é, o fluxo médio na direção m depende apenas dos fluxos incidentes e emergentes na própria direção, o esquema numérico iterativo de varredura SI tradicional pode ser utilizado para solucionar as equações constitutivas do método DD. Maiores detalhes do esquema de varredura SI tradicional são apresentados na seção 3.3.

As equações de varredura do esquema iterativo SI tradicional para o método DD, podem ser obtidas explicitando:

- $\tilde{\psi}_{m,i+1/2,j}$ na Eq. (73) quando $\mu_m > 0$, para estimarmos os fluxos angulares que emergem da célula espacial $\Gamma_{i,j}$ através da aresta localizada no ponto $x_{i+1/2}$, conforme Figura 19, resultando em

$$\tilde{\psi}_{m,i+1/2,j} = 2\bar{\psi}_{m,i,j} - \tilde{\psi}_{m,i-1/2,j}; \quad (75)$$

- $\tilde{\psi}_{m,i-1/2,j}$ na Eq. (73) quando $\mu_m < 0$, para estimarmos os fluxos angulares que emergem da célula espacial $\Gamma_{i,j}$ através da aresta localizada no ponto $x_{i-1/2}$, conforme Figura 19, obtendo

$$\tilde{\psi}_{m,i-1/2,j} = 2\bar{\psi}_{m,i,j} - \tilde{\psi}_{m,i+1/2,j}; \quad (76)$$

- $\hat{\psi}_{m,i,j+1/2}$ na Eq. (74) quando $\eta_m > 0$, para estimarmos os fluxos angulares que emergem da célula espacial $\Gamma_{i,j}$ através da aresta localizada no ponto $y_{j+1/2}$, conforme Figura 20, o resultado aparece como

$$\hat{\psi}_{m,i,j+1/2} = 2\bar{\psi}_{m,i,j} - \hat{\psi}_{m,i,j-1/2}; \quad (77)$$

- $\hat{\psi}_{m,i,j-1/2}$ na Eq. (74) quando $\eta_m < 0$, para estimarmos os fluxos angulares que emergem da célula espacial $\Gamma_{i,j}$ através da aresta localizada no ponto $y_{j-1/2}$, conforme Figura 20, resultando em

$$\hat{\psi}_{m,i,j-1/2} = 2\bar{\psi}_{m,i,j} - \hat{\psi}_{m,i+1/2,j}. \quad (78)$$

A expressão para o cálculo dos fluxos angulares médios $\bar{\psi}_{m,i,j}$ da célula $\Gamma_{i,j}$ nas Eqs. (75), (76), (77) e (78) pode ser obtida substituindo tais equações na Eq. (67), de acordo com o sentido de varredura adotado, a expressão resultante para o cálculo dos fluxos angulares médios aparece na forma

$$\bar{\psi}_{m,i,j} = \frac{1}{\left(1 + \frac{2}{|\alpha_{m,i,j}^x|} + \frac{2}{|\alpha_{m,i,j}^y|}\right)} \left[S_{SC_{i,j}} + S_{F_{i,j}} + \frac{2}{|\alpha_{m,i,j}^x|} \tilde{\psi}_{m,i\pm 1/2,j} + \frac{2}{|\alpha_{m,i,j}^y|} \hat{\psi}_{m,i,j\pm 1/2} \right] \quad (79)$$

As Eqs. (75), (76), (77), (78) e (79) constituem as equações de varredura do esquema iterativo SI tradicional para o método de discretização espacial bidimensional DD. Na Eq. (79) consideramos o sinal superior dos índices dos fluxos angulares nas arestas da célula espacial $\Gamma_{i,j}$ para $\mu_m > 0$ ou $\eta_m > 0$ e o sinal inferior destes índices para $\mu_m < 0$ ou $\eta_m < 0$.

Os principais passos do algoritmo computacional do método DD são mostrados na Figura 21. Este algoritmo combina o método iterativo de potência ao esquema numérico iterativo de varredura SI tradicional para estimar o autovalor dominante k_{eff} e resolver iterativamente as equações constitutivas do método DD para o problema bidimensional, respectivamente.

Para avaliar o desempenho computacional do método DD calculamos o número de operações aritméticas de ponto flutuante (NOF) necessárias para resolver um problema, para isso, considerando os processos de varredura como operações dominantes no Algoritmo da Figura 21, o NOF para o método DD pode ser computado segundo o procedimento descrito a seguir.

- Em uma equação de varredura, considerando uma célula espacial arbitrária $\Gamma_{i,j}$ em uma direção angular m qualquer,
 - adição/subtração: 7 operações; e,

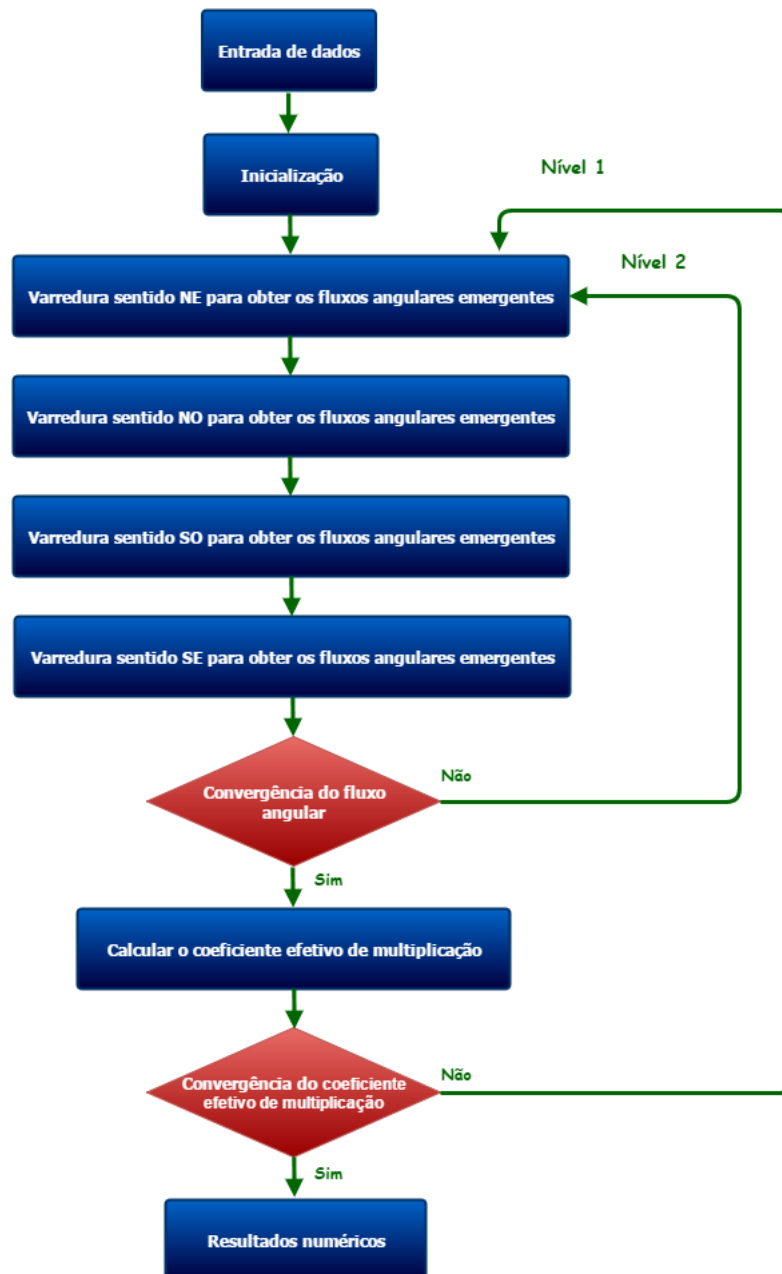


Figura 21 – Algoritmo computacional do método DD.

- multiplicação/divisão: 7 operações;
- Em uma célula espacial arbitrária $\Gamma_{i,j}$, considerando $M/4$ direções angulares para um sentido de varredura,
 - adição/subtração: $(7/4)M$ operações; e,
 - multiplicação/divisão: $(7/4)M$ operações;
- Em todas as células espaciais $\Gamma_{i,j}$, $i = 1 : I$ e $j = 1 : J$, considerando as $M/4$ direções angulares em cada célula para um sentido de varredura,

- adição/subtração: $(I \cdot J)(7/4)M$ operações; e,
- multiplicação/divisão: $(I \cdot J)(7/4)M$ operações.

Portanto, o NOF total neste algoritmo, considerando os quatro sentidos de varreduras, e o número de iterações necessárias para a convergência do autovalor (I_{keff}) e do fluxo angular (I_{Fluxo}), pode ser computado como

- adição/subtração: $I_{keff} \cdot I_{Fluxo} [4 \cdot (I \cdot J)(7/4)M]$ operações;
- multiplicação/divisão: $I_{keff} \cdot I_{Fluxo} [4 \cdot (I \cdot J)(7/4)M]$ operações.

consideramos o total de operações como a soma do número de operações aditivas e multiplicativas.

Na próxima subseção, discutimos o método de discretização espacial SD-SGF-CN, o qual utilizamos em nosso trabalho, assim como o DD, para avaliar a precisão e o desempenho computacional do método de grades compostas proposto. Ressaltamos aqui, que apresentaremos apenas a parte do método SD-SGF-CN associada a problemas de autovalor que considera regiões com combustíveis físséis ou multiplicativas, i. e., discutiremos apenas as equações auxiliares SD referentes a regiões que apresentam o problema de autovalor. O método SD-SGF-CN é o principal motivo de levarmos a desenvolver o método de multigrade, uma vez que o objetivo do método proposto nesta dissertação é obter resultados precisos com baixo custo algébrico e computacional.

3.2.2 Método *Spectral Diamond - Spectral Green's Function - Constant Nodal*

No intuito de obter resultados com ganho de eficiência computacional e precisão numérica na modelagem computacional de problemas de transporte de partículas na formulação de ordenadas discretas S_N é desejável que as variáveis espaciais sejam discretizadas utilizando métodos de discretização de malha grossa. Os métodos nodais (BADRUZZAMAN, 1990) e (LAWRENCE, 1986), classificados como métodos de malha grossa, são baseados no conceito de integração transversal que permite obter dois problemas unidimensionais de equações diferenciais ordinárias a partir do problema original de uma equação diferencial parcial bidimensional (65), para cada direção angular m . Estes problemas unidimensionais são resolvidos analiticamente, introduzindo aproximações para os termos de fonte de espalhamento e fissão, e fuga transversal, ressaltamos ainda, que os métodos nodais apresentam resultados satisfatórios em malhas grossas devido a preservação das soluções analíticas gerais das equações S_N unidimensionais integradas transversalmente e que estes métodos não preservam a solução analítica geral do problema bidimensional original. Os métodos nodais convencionais de discretização espacial S_N , tais como o CCN e LN, utilizam aproximações polinomiais

de baixa ordem tanto para aproximar os termos de fonte quanto para aproximar o termo de fuga transversal, estas aproximações polinomiais de baixa ordem comprometem a precisão dos métodos nodais convencionais em malhas consideradas muito grossas. Visando amenizar este problema (FILHO, 1999) desenvolveu um novo método nodal de discretização espacial denominado *Spectral Diamond - Spectral Green's Function - Constant Nodal* (SD-SGF-CN), baseado num método numérico analítico que utiliza a análise espectral das equações S_N unidimensionais obtidas do processo de integração transversal para resolver os termos de fonte de forma exata.

As equações S_N integradas transversalmente para o momento de ordem zero na direção x e y são obtidas aplicando os operadores

$$\frac{1}{h_{i,j}^y} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} P_l \left[\frac{2(y - y_j)}{h_{i,j}^y} \right] \bullet dy, \quad (80)$$

e

$$\frac{1}{h_{i,j}^x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} P_l \left[\frac{2(x - x_i)}{h_{i,j}^x} \right] \bullet dx. \quad (81)$$

respectivamente na Eq. (65), onde consideramos $l = 0$. Os resultados do procedimento anterior aparece para cada uma das direções espaciais, na forma de

- M equações S_N integradas transversalmente para o momento de ordem zero do fluxo angular dependentes da variável x ,

$$\begin{aligned} \mu_m \frac{d}{dx} \tilde{\psi}_{m,j}(x) + \sigma_{t_{i,j}} \tilde{\psi}_{m,j}(x) &= \frac{\sigma_{s0_{i,j}}}{4} \sum_{n=1}^M \tilde{\psi}_{n,j}(x) \omega_n + \\ \frac{\nu \sigma_{f_{i,j}}}{4k_{eff}} \sum_{n=1}^M \tilde{\psi}_{n,j}(x) \omega_n - \frac{\eta_m}{h_{i,j}^y} &\left[\psi_m(x, y_{j+1/2}) - \psi_m(x, y_{j-1/2}) \right], \end{aligned} \quad (82)$$

onde definimos,

$$\tilde{\psi}_{m,j}(x) = \frac{1}{h_{i,j}^y} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \psi_m(x, y) dy, \quad (83)$$

como o fluxo angular dependente de x , $x_{i-1/2} \leq x \leq x_{i+1/2}$, e mediado no eixo y da célula espacial $\Gamma_{i,j}$; e $\psi_m(x, y_{j\pm 1/2})$ como os fluxos angulares dependentes de x e avaliados nos pontos de contorno $y_{j\pm 1/2}$ da célula espacial $\Gamma_{i,j}$, respectivamente;

e

- M equações S_N integradas transversalmente para o momento de ordem zero do fluxo angular dependentes da variável y ,

$$\eta_m \frac{d}{dy} \hat{\psi}_{m,i}(y) + \sigma_{t_{i,j}} \hat{\psi}_{m,i}(y) = \frac{\sigma_{s0_{i,j}}}{4} \sum_{n=1}^M \hat{\psi}_{n,i}(y) \omega_n + \frac{\nu \sigma_{f_{i,j}}}{4k_{eff}} \sum_{n=1}^M \hat{\psi}_{n,i}(y) \omega_n - \frac{\mu_m}{h_{i,j}^x} [\psi_m(x_{i+1/2}, y) - \psi_m(x_{i-1/2}, y)], \quad (84)$$

onde definimos,

$$\hat{\psi}_{m,i}(y) = \frac{1}{h_{i,j}^x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \psi_m(x, y) dy \quad (85)$$

como o fluxo angular dependente de y , $y_{j-1/2} \leq y \leq y_{j+1/2}$, e mediado no eixo x da célula espacial $\Gamma_{i,j}$; e $\psi_m(x_{i\pm 1/2}, y)$ como os fluxos angulares dependentes de y e avaliados nos pontos de contorno $x_{i\pm 1/2}$ da célula espacial $\Gamma_{i,j}$.

As M equações S_N integradas transversalmente (82) e as M equações S_N (84) formam, em cada célula espacial $\Gamma_{i,j}$, um sistema de equações diferenciais ordinárias solúvel porém indeterminado com $2M$ equações diferenciais ordinárias e $4M$ incógnitas. Para tornarmos este sistema solúvel e determinado, introduzimos aproximações constantes para os termos de fuga transversal, onde definimos

$$\frac{\eta_m}{h_{i,j}^y} [\psi_m(x, y_{j+1/2}) - \psi_m(x, y_{j-1/2})] = \frac{\eta_m}{h_{i,j}^y} [\hat{\psi}_{m,i,j+1/2} - \hat{\psi}_{m,i,j-1/2}] = \hat{\tau}_{m,i,j}. \quad (86)$$

$$\frac{\mu_m}{h_{i,j}^x} [\psi_m(x_{i+1/2}, y) - \psi_m(x_{i-1/2}, y)] = \frac{\mu_m}{h_{i,j}^x} [\tilde{\psi}_{m,i+1/2,j} - \tilde{\psi}_{m,i-1/2,j}] = \tilde{\tau}_{m,i,j}, \quad (87)$$

Substituímos as definições (86) e (87) nas Eqs. (82) e (84), respectivamente, e obtemos as equações S_N dependentes de x e y integradas transversalmente com aproximação constante para os termos de fuga transversal, as quais aparecem como

$$\mu_m \frac{d}{dx} \tilde{\psi}_{m,j}(x) + \sigma_{t_{i,j}} \tilde{\psi}_{m,j}(x) = \frac{\sigma_{s0_{i,j}}}{4} \sum_{n=1}^M \tilde{\psi}_{n,j}(x) \omega_n + \frac{\nu \sigma_{f_{i,j}}}{4k_{eff}} \sum_{n=1}^M \tilde{\psi}_{n,j}(x) \omega_n - \hat{\tau}_{m,i,j}, \quad (88)$$

$$\eta_m \frac{d}{dy} \hat{\psi}_{m,i}(y) + \sigma_{t_{i,j}} \hat{\psi}_{m,i}(y) = \frac{\sigma_{s0_{i,j}}}{4} \sum_{n=1}^M \hat{\psi}_{n,i}(y) \omega_n + \frac{\nu \sigma_{f_{i,j}}}{4k_{eff}} \sum_{n=1}^M \hat{\psi}_{n,i}(y) \omega_n - \tilde{\tau}_{m,i,j}. \quad (89)$$

A análise espectral das equações S_N integradas transversalmente (88) e (89) para obtenção das soluções analíticas gerais pode ser realizada usando a técnica de análise

espectral proposta por (CASE; ZWEIFEL, 1967) que utiliza o método de “separação de variáveis”. As soluções analíticas gerais das equações (88) e (89) propõem-se na forma

$$\tilde{\psi}_{m,j}(x) = \tilde{\psi}_{m,i,j}^h(x) + \hat{\psi}_{m,i,j}^p, \quad m = 1 : M \quad (90)$$

$$\hat{\psi}_{m,i}(y) = \hat{\psi}_{m,i,j}^h(y) + \tilde{\psi}_{m,i,j}^p, \quad m = 1 : M \quad (91)$$

sendo que, $\tilde{\psi}_{m,i,j}^h(x)$ e $\hat{\psi}_{m,i,j}^h(y)$ representam as componentes homogêneas das soluções analíticas gerais, para uma direção m . Estas componentes homogêneas aparecem na seguinte forma

$$\tilde{\psi}_{m,i,j}^h(x) = \sum_{k=1}^M \beta_k^x a_m^x(\vartheta_k) e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}}^x}{\vartheta_k}}, \quad (92)$$

$$\hat{\psi}_{m,i,j}^h(y) = \sum_{k=1}^M \beta_k^y a_m^y(\vartheta_k) e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}}^y}{\vartheta_k}}, \quad (93)$$

onde $\beta_k^{x|y} \in \mathbb{R}, k = 1 : M$ são constantes arbitrárias, $a_m^{x|y}(\vartheta_k)$ são componentes do autovetor associado ao autovalor ϑ_k . Nas Eqs (90) e (91) os termos $\tilde{\psi}_{m,i}^p$ e $\hat{\psi}_{m,j}^p$ denotam as componentes particulares das soluções analíticas gerais, para uma direção m . Estas componentes particulares aparecem na seguinte forma

$$\tilde{\psi}_{m,i,j}^p = \frac{C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}}}{4 \left[\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}} \right) - 1 \right]} \sum_{n=1}^M \tilde{F}_{n,i,j} \omega_n - \tilde{F}_{m,i,j} \quad (94)$$

$$\hat{\psi}_{m,i,j}^p = \frac{C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}}}{4 \left[\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}} \right) - 1 \right]} \sum_{n=1}^M \hat{F}_{n,i,j} \omega_n - \hat{F}_{m,i,j} \quad (95)$$

onde definimos $C_{0,i,j} = \frac{\sigma_{s0,i,j}}{\sigma_{t_{i,j}}}, B_{i,j} = \frac{\nu \sigma_{f_{i,j}}}{\sigma_{t_{i,j}}}, \hat{F}_{m,i,j} = \frac{\hat{\tau}_{m,i,j}}{\sigma_{t_{i,j}}}$ e $\tilde{F}_{m,i,j} = \frac{\tilde{\tau}_{m,i,j}}{\sigma_{t_{i,j}}}$.

As equações auxiliares do método SD-SGF-CN referentes às regiões multiplicativas são uma extensão bidimensional das equações auxiliares (58) do método SD unidimensional. Estas equações apresentam-se na forma que descrevemos a seguir:

$$\bar{\psi}_{m,i,j} = \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^x \left(\frac{\tilde{\psi}_{n,i-1/2,j} + \tilde{\psi}_{n,i+1/2,j}}{2} \right) + \hat{G}_{m,i,j}; \quad (96)$$

$$\bar{\psi}_{m,i,j} = \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^y \left(\frac{\hat{\psi}_{n,i,j-1/2} + \hat{\psi}_{n,i,j+1/2}}{2} \right) + \tilde{G}_{m,i,j}. \quad (97)$$

As Eqs (96) e (97) descrevem o fluxo angular médio $\bar{\psi}_{m,i,j}$ numa célula espacial arbitrária $\Gamma_{i,j}$ na direção angular m em função da ponderação dos fluxos angulares incidentes e emergentes nesta célula em todas as direções angulares μ_n e η_n nos eixos x ou y , definidos nos pontos de contorno $x_{i\pm 1/2}$ e $y_{j\pm 1/2}$, respectivamente, adicionados a uma função que denota a contribuição dos termos de fuga transversal na célula $\Gamma_{i,j}$, conforme mostram as Figuras (22) e (23). Destacamos que, estas equações auxiliares são acopladas em direções angulares, uma vez que, o fluxo médio na direção m depende dos fluxos incidentes/emergentes em todas as direções.

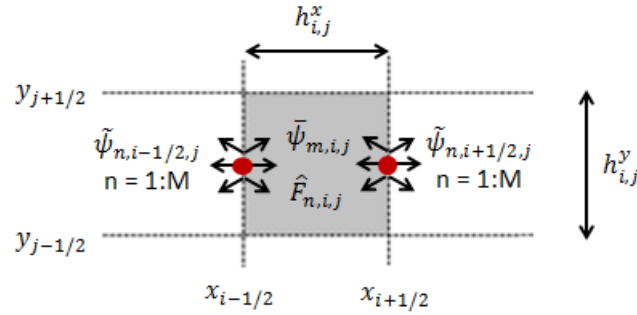


Figura 22 – Representação do fluxo angular médio em uma célula arbitrária $\Gamma_{i,j}$ bidimensional no eixo x para o método SD-SGF-CN.

Os parâmetros espectrais $\Theta_{m,n}^x$ e $\Theta_{m,n}^y$ são determinados de forma a preservarem em $\Gamma_{i,j}$ as componentes homogêneas $\tilde{\psi}_{m,i,j}^h(x)$ e $\hat{\psi}_{m,i,j}^h(y)$ das soluções analíticas gerais, (90) e (91), obtidas pela análise espectral das equações S_N unidimensionais integradas transversalmente em x e y , respectivamente. Já os parâmetros espectrais $\hat{G}_{m,i,j}$ e $\tilde{G}_{m,i,j}$ são calculados de forma que as componentes particulares $\hat{\psi}_{m,i,j}^p$ e $\tilde{\psi}_{m,i,j}^p$ destas soluções analíticas gerais sejam preservadas no interior da célula espacial $\Gamma_{i,j}$. Dessa forma, o conjunto dos parâmetros espectrais preservam incondicionalmente as soluções analíticas gerais (90) e (91) no interior de uma célula espacial arbitrária $\Gamma_{i,j}$. As expressões que permitem calcular os valores dos parâmetros espectrais $\Theta_{m,n}^x$ e $\Theta_{m,n}^y$ aparecem na forma

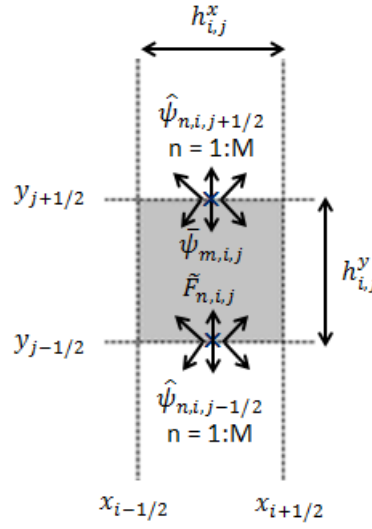


Figura 23 – Representação do fluxo angular médio em uma célula arbitrária $\Gamma_{i,j}$ bidimensional no eixo y para o método SD-SGF-CN.

$$\frac{2a_m^x(\vartheta_k)\vartheta_k}{h_{i,j}^x\sigma_{t_{i,j}}} \tanh\left[\frac{h_{i,j}^x\sigma_{t_{i,j}}}{2\vartheta_k}\right] = \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^x a_n^x(\vartheta_k), \quad m = 1 : M \quad (98)$$

$$\frac{2\gamma_k\mu_m}{h_{i,j}^x\sigma_{t_{i,j}}(\mu_m^2 + \gamma_k^2)} \tan\left[\frac{h_{i,j}^x\sigma_{t_{i,j}}}{2\gamma_k}\right] = \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^x \frac{\mu_n}{(\mu_n^2 + \gamma_k^2)} \quad m = 1 : M. \quad (99)$$

$$\frac{2\gamma_k}{h_{i,j}^x\sigma_{t_{i,j}}(\mu_m^2 + \gamma_k^2)} \tan\left[\frac{h_{i,j}^x\sigma_{t_{i,j}}}{2\gamma_k}\right] = \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^x \frac{1}{(\mu_n^2 + \gamma_k^2)} \quad m = 1 : M. \quad (100)$$

$$\frac{2a_m^y(\vartheta_k)\vartheta_k}{h_{i,j}^y\sigma_{t_{i,j}}} \tanh\left[\frac{h_{i,j}^y\sigma_{t_{i,j}}}{2\vartheta_k}\right] = \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^y a_n^y(\vartheta_k), \quad m = 1 : M \quad (101)$$

$$\frac{2\gamma_k\eta_m}{h_{i,j}^y\sigma_{t_{i,j}}(\eta_m^2 + \gamma_k^2)} \tan\left[\frac{h_{i,j}^y\sigma_{t_{i,j}}}{2\gamma_k}\right] = \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^y \frac{\eta_n}{(\eta_n^2 + \gamma_k^2)} \quad m = 1 : M. \quad (102)$$

$$\frac{2\gamma_k}{h_{i,j}^y\sigma_{t_{i,j}}(\eta_m^2 + \gamma_k^2)} \tan\left[\frac{h_{i,j}^y\sigma_{t_{i,j}}}{2\gamma_k}\right] = \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^y \frac{1}{(\eta_n^2 + \gamma_k^2)} \quad m = 1 : M. \quad (103)$$

Ressaltamos que as equações (98) e (101) permitem calcular, respectivamente, apenas os parâmetros espectrais $\Theta_{m,n}^x$ e $\Theta_{m,n}^y$ associados aos autovalores ϑ_k reais. Para calcularmos os parâmetros espectrais associados aos autovalores imaginários puros, $\vartheta_k = \pm i\gamma_k$, devemos utilizar as equações (99) e (100) para $\Theta_{m,n}^x$ e as equações (102) e (103) para $\Theta_{m,n}^y$.

As equações (98) ou (99) e (100), (101) ou (102) e (103) formam, cada uma, M sistemas lineares com M equações que nos permite obter os valores dos M^2 parâmetros espectrais $\Theta_{m,n}^x$ e $\Theta_{m,n}^y$, para cada direção espacial. Em virtude da utilização da quadratura de simetria de níveis na discretização das variáveis angulares da equação de transporte de nêutrons (45) para problemas bidimensionais o conjunto de valores dos parâmetros espectrais $\Theta_{m,n}^x$ e $\Theta_{m,n}^y$ formam matrizes com dimensões $M \times M$ considerada simétrica por blocos 4×4 , conforme ilustra a Figura 24.

As expressões que permitem calcular os valores dos parâmetros espectrais $\hat{G}_{m,i,j}$ e $\tilde{G}_{m,i,j}$ aparecem na seguinte forma

$$\begin{aligned} \hat{G}_{m,i,j} = \frac{C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}}}{4 \left[\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}} \right) - 1 \right]} \sum_{n=1}^M \hat{F}_{n,i,j} \omega_n \left(1 - \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^x \right) \\ - \hat{F}_{m,i,j} + \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^x \hat{F}_{n,i,j}, \quad m = 1 : M \end{aligned} \quad (104)$$

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{m,i,j} = \frac{C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}}}{4 \left[\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}} \right) - 1 \right]} \sum_{n=1}^M \tilde{F}_{n,i,j} \omega_n \left(1 - \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^y \right) \\ - \tilde{F}_{m,i,j} + \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^y \tilde{F}_{n,i,j}, \quad m = 1 : M \end{aligned} \quad (105)$$

Em razão do acoplamento angular nas equações auxiliares do método SD-SGF-CN, o esquema numérico iterativo SI tradicional não pode ser empregado para solucionar as equações constitutivas do método SD-SGF-CN. Neste caso, o esquema iterativo NBI, *One-Node Block Inversion* (BARROS; LARSEN, 1992) e (ZANI, 2001), deve ser utilizado. As equações de varredura do esquema numérico iterativo NBI para solucionar as equações constitutivas do método SD-SGF-CN são obtidas substituindo as equações auxiliares (96) e (97) na equação de balanço espacial de ordem zero (67) e obtemos um sistema de equações lineares e algébricas para cada uma das direções de varredura, que pode ser representado pela expressão matricial

$$\underline{\underline{A}}^n \underline{\underline{\psi}}_n^{em} + \underline{\underline{B}}^n \underline{\underline{\psi}}_n^{fug} = \underline{\underline{C}}^n \underline{\underline{\psi}}_n^{in,+} + \underline{\underline{D}}^n \underline{\underline{\psi}}_n^{in,-} + \underline{\underline{S}}_n \quad (106)$$

$\frac{M}{4} \times \frac{M}{4}$	$\frac{M}{4} \times \frac{M}{4}$	$\frac{M}{4} \times \frac{M}{4}$	$\frac{M}{4} \times \frac{M}{4}$
$\frac{M}{4} \times \frac{M}{4}$	$\frac{M}{4} \times \frac{M}{4}$	$\frac{M}{4} \times \frac{M}{4}$	$\frac{M}{4} \times \frac{M}{4}$
$\frac{M}{4} \times \frac{M}{4}$	$\frac{M}{4} \times \frac{M}{4}$	$\frac{M}{4} \times \frac{M}{4}$	$\frac{M}{4} \times \frac{M}{4}$
$\frac{M}{4} \times \frac{M}{4}$	$\frac{M}{4} \times \frac{M}{4}$	$\frac{M}{4} \times \frac{M}{4}$	$\frac{M}{4} \times \frac{M}{4}$

Figura 24 – Representação das matrizes simétricas por blocos 4×4 associadas aos parâmetros espectrais $\Theta_{m,n}^x$ e $\Theta_{m,n}^y$ das equações S_N bidimensionais.

onde, $n = 1 : 4$ representa a direção de varredura, $\underline{\psi}_n^{em}$ contém os fluxos que emergem da célula espacial $\Gamma_{i,j}$ no sentido de varredura, $\underline{\psi}_n^{fug}$ são os fluxos que emergem da célula no sentido contrário ao da varredura, $\underline{\psi}_n^{in,+}$ contém os fluxos incidentes no sentido da varredura, $\underline{\psi}_n^{in,-}$ são os fluxos incidentes contrários ao sentido de varredura e $\underline{S}_n$ contém os termos associados á fonte de fissão. Realizando operações matriciais sobre a Eq. (106) podemos explicitar os fluxos que emergem da célula espacial $\Gamma_{i,j}$ no sentido de varredura $\underline{\psi}_n^{em}$, onde escolhemos n de acordo com o sentido de varredura adotado.

A Figura 25 mostra os passos básicos do algoritmo computacional para o método SD-SGF-CN que utiliza, assim como o método DD o convencional método de potência para estimar o autovalor dominante do problema de transporte de nêutrons e o esquema iterativo de solução numérica NBI para resolver as equações constitutivas do método SD-SGF-CN. Para avaliar o custo computacional do método SD-SGF-CN obtemos uma expressão para calcular o número de operações aritméticas de ponto flutuante (NOF) necessárias para resolver um problema. Então, considerando os processos de varredura como operações dominantes no Algoritmo 25, o número de operações aritméticas de ponto flutuante computa-se seguindo as seguintes etapas:

- Em uma equação de varredura, considerando uma célula espacial arbitrária $\Gamma_{i,j}$ em uma direção angular m qualquer, temos
 - adição/subtração: $2M^2 - 2M + 5$ operações; e,
 - multiplicação/divisão: $M^2 + 2M + 4$ operações;

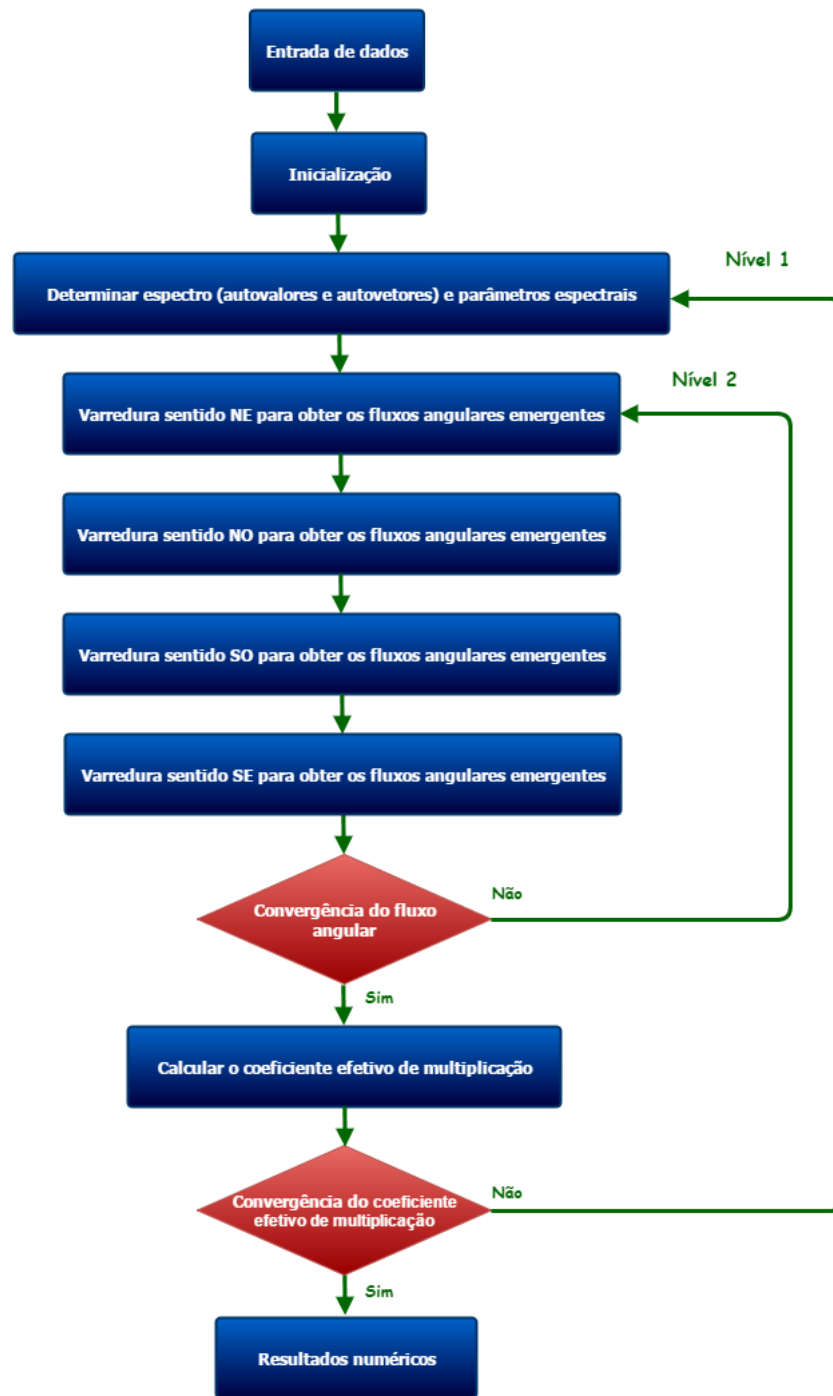


Figura 25 – Algoritmo computacional do método SD-SGF-CN.

- Em uma célula espacial arbitrária $\Gamma_{i,j}$, considerando M direções angulares para um sentido de varredura,
 - adição/subtração: $2M^3 - 2M^2 + 5M$ operações; e,
 - multiplicação/divisão: $M^3 + 2M^2 + 4M$ operações;
- Em todas as células espaciais $\Gamma_{i,j}$, $i = 1 : I$ e $j = 1 : J$, considerando as M direções

angulares em cada célula para um sentido de varredura, precisamos de

- adição/subtração: $(I \cdot J)(2M^3 - 2M^2 + 5M)$ operações; e,
- multiplicação/divisão: $(I \cdot J)(M^3 + 2M^2 + 4M)$ operações.

Portanto, o NOF total neste algoritmo, considerando os quatro sentidos de varreduras, é:

- adição/subtração: $I_{keff} \cdot I_{Fluxo}[4 \cdot (I \cdot J)(2M^3 - 2M^2 + 5M)]$ operações;
- multiplicação/divisão: $I_{keff} \cdot I_{Fluxo}[4 \cdot (I \cdot J)(M^3 + 2M^2 + 4M)]$ operações,

onde, I_{keff} é a quantidade de iterações necessárias para a convergência do coeficiente efetivo de multiplicação, I_{Fluxo} é a quantidade de iterações necessárias para a convergência dos fluxos angulares emergentes das células espaciais $\Gamma_{i,j}$. O total de operações considera a soma dos dois tipos de operações aritméticas. Podemos observar que o algoritmo é linear nas dimensões da grade (I, J) , e no número de iterações (I_{keff}, I_{Fluxo}) , e cúbico no número de direções angulares M .

Na seção subsequente, discutimos e apresentamos os conceitos básicos dos esquemas iterativos de solução numérica para solucionar as equações constitutivas dos métodos de discretização espacial, descritos neste capítulo.

3.3 Esquemas iterativos de solução numérica

Obtidos os sistemas de equações lineares e algébricas através da aplicação dos métodos de discretização espacial na formulação S_N da equação de transporte de nêutrons, torna-se necessário obter soluções eficientes destes sistemas. Estas soluções podem ser obtidas via métodos diretos ou iterativos. Os métodos iterativos para solução das equações S_N discretizadas espacialmente são frequentemente denominados esquemas numéricos de varredura, que nada mais são que uma sequência de passos que são executados na grade espacial para aproximar estas soluções iterativamente. Os esquemas numéricos de varredura para problemas em geometria cartesiana unidimensional possuem dois sentidos de varredura, conforme ilustrado na Figura 26:

- varredura no sentido positivo do eixo x ($\mu_m > 0$), onde iniciamos nossa varredura partindo da célula espacial Γ_1 no extremo esquerdo do domínio, calculando as grandezas médias e emergentes na direção positiva desta célula, e continuamos com a próxima célula espacial à direita até alcançarmos a célula Γ_I ;

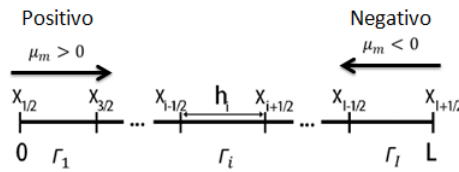


Figura 26 – Representação dos sentidos de varredura para o problema unidimensional.

- varredura no sentido negativo do eixo x ($\mu_m < 0$), onde iniciamos nossa varredura partindo da célula espacial Γ_I no extremo direito do domínio, calculando as grandezas médias e emergentes na direção negativa desta célula, e continuamos com a próxima célula espacial à esquerda até alcançarmos a célula Γ_1 ;

Já para problemas em geometria cartesiana bidimensional os esquemas numéricos de varredura possuem quatro sentidos de varredura, cada sentido de varredura pode ser identificado com um quadrante como mostra a Figura 27:

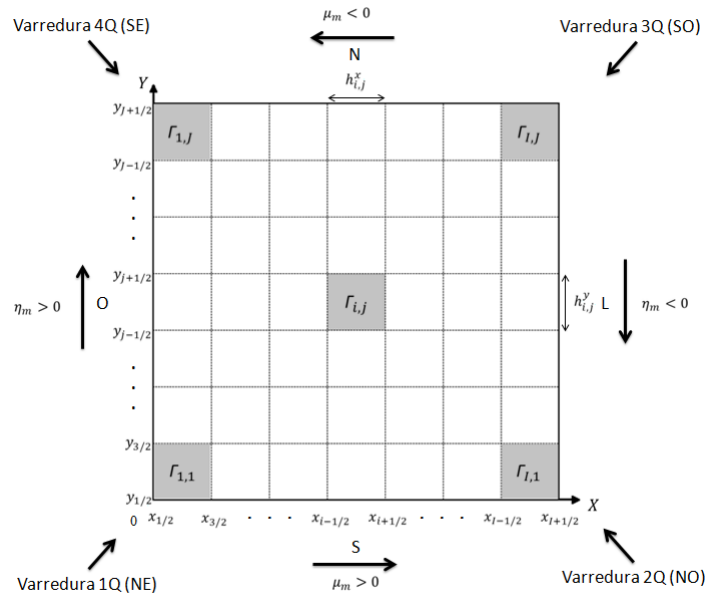


Figura 27 – Representação dos sentidos de varredura para o problema bidimensional.

- varredura no sentido nordeste (NE), correspondente ao primeiro quadrante (1Q) do plano cartesiano, ($\mu_m > 0$ e $\eta_m > 0$), onde iniciamos nossa varredura partindo da célula espacial $\Gamma_{1,1}$ no canto esquerdo inferior, calculando as grandezas médias e emergentes desta célula, e continuamos com a próxima célula à direita, ao completarmos uma linha, isto é, chegarmos à célula $\Gamma_{I,1}$, voltamos ao extremo es-

querdo do domínio agora na segunda linha, a varredura continua até alcançarmos a célula $\Gamma_{I,J}$;

- varredura no sentido noroeste (NO), correspondente ao segundo quadrante (2Q) do plano cartesiano, ($\mu_m < 0$ e $\eta_m > 0$), iniciamos nossa varredura partindo da célula espacial $\Gamma_{I,1}$ no canto inferior direito, calculando as grandezas médias e emergentes desta célula, e continuamos com a próxima célula espacial até alcançarmos a célula $\Gamma_{1,J}$ no canto superior esquerdo;
- varredura no sentido sudoeste (SO), correspondente ao terceiro quadrante (3Q) do plano cartesiano, ($\mu_m < 0$ e $\eta_m < 0$), iniciamos nossa varredura partindo da célula espacial $\Gamma_{I,J}$ no canto superior direito, calculando as grandezas médias e emergentes desta célula, e continuamos com a próxima célula espacial até alcançarmos a célula $\Gamma_{1,1}$ no canto inferior esquerdo;
- varredura no sentido sudeste (SE), correspondente ao quadrante (4Q) do plano cartesiano, ($\mu_m > 0$ e $\eta_m < 0$), iniciamos nossa varredura partindo da célula espacial $\Gamma_{1,J}$ no canto superior esquerdo, calculando as grandezas médias e emergentes desta célula, e continuamos com a próxima célula espacial até alcançarmos a célula $\Gamma_{I,1}$ no canto inferior direito;

Dentre os esquemas numéricos de varredura, temos os convencionais SI (*Source Iteration*), com construção e implementação mais simples, e NBI (*One-Node Block Inversion*), com construção e implementação mais complexa. A seguir descrevemos as principais características destes dois esquemas de varredura.

O esquema iterativo SI, (ADAMS; LARSEN, 2002), é apropriado para resolver as equações discretizadas que surgem em métodos convencionais, onde as equações auxiliares são desacopladas nas direções angulares, i. e., métodos em que as grandezas médias na direção angular m são calculadas em função das grandezas emergentes e incidentes na célula espacial na própria direção angular m . O processo de obtenção das equações de varredura do esquema SI, assim como sua implementação são bastante simples, no entanto a taxa de convergência para a aproximação dos fluxos angulares emergentes da célula pode ser bastante lenta em meios altamente espalhadores (AZMY; SARTORI, 2010). No esquema de varredura SI, utilizamos a informação da fonte de espalhamento calculada na iteração anterior para a aproximação das grandezas emergentes da célula espacial em todo o processo de varredura.

O esquema iterativo de varredura NBI foi desenvolvido a fim de solucionar os sistemas de equações lineares e algébricas obtidos através da aplicação dos métodos de discretização espacial que possuem equações auxiliares acopladas em direções angulares, i. e., métodos em que as grandezas médias na direção angular m são calculadas em

função das grandezas emergentes e incidentes na célula espacial em todas as direções angulares. A ideia que suporta a varredura NBI é utilizar as estimativas mais recentes disponíveis dos fluxos angulares incidentes em uma dada célula espacial para determinar os fluxos angulares médios em todas as direções angulares emergentes desta célula nas direções de varredura antes de prosseguir para outra célula espacial. O processo de obtenção das equações de varredura do NBI e sua implementação são mais complexas que o esquema de varredura SI, pois envolve mais álgebra em sua construção, e consequentemente o NBI leva a algoritmos computacionais mais complexos que o SI. No entanto, o NBI possui uma taxa de convergência maior que o SI, pois a fonte de espalhamento utilizada na aproximação do fluxo emergente da célula espacial é atualizada instantaneamente durante varredura para cada célula espacial.

4 Método Espectro Nodal de Grades Compostas

Neste capítulo, descrevemos o método numérico, proposto neste trabalho, para resolver problemas de autovalor multiplicativo em geometria retangular cartesiana bidimensional (X,Y) na formulação de ordenadas discretas (S_N) a um grupo de energia e com fonte de espalhamento isotrópica. Devido a utilização de três grades espaciais e um método espectro nodal com aproximação constante para resolver o problema, nos referimos ao novo método como um método espectro nodal de grades compostas com aproximação constante - CSG-SD-CN (*Composite Spatial Grid - Spectral Diamond - Constant Nodal*).

As principais desvantagens dos métodos espectro-nodais são a grande dificuldade de implementação do algoritmo computacional e o alto custo algébrico, para amenizar estas deficiências foram desenvolvidos os métodos espectro nodais de grades compostas, que objetivam simplificar a formulação matemática preservando a precisão em cálculos de malha grossa. A Tabela 3 compara as principais características dos métodos SD-SGF-CN e CSG-SD-CN.

O método CSG-SD-CN se caracteriza por realizar discretização espacial em duas etapas: na primeira realizamos uma discretização bidimensional de malha grossa, onde

Tabela 3 – Principais características dos métodos SD-SGF-CN e CSG-SD-CN

Método SD-SGF-CN	Método CSG-SD-CN
• Aproxima os termos de fuga transversal de nêutrons nas arestas das células	• Aproxima os termos de fuga transversal de nêutrons nas arestas das regiões
• Discretização em um único passo	• Discretização em dois passos
• Uma grade regular grossa	• Três grades: uma grade grossa externa, duas grades finas internas nas direções x e y
• Resolve um problema bidimensional usando o esquema de varredura NBI	• Resolve dois problemas unidimensionais acoplados pelos termos de fuga da região usando o esquema de varredura SI modificado para direções alternadas
• Alto custo algébrico e computacional e algoritmo complexo	• Baixo custo algébrico e computacional e algoritmo simples
• Calcula grandezas locais e integrais com boa precisão	• Calcula grandezas integrais com boa precisão

a malha coincide com as regiões materiais do domínio, em seguida, aplicamos o conceito de integração transversal em cada uma das regiões materiais para as direções x e y , e introduzimos aproximações constantes para os termos de fuga transversal na região, dessa forma, é possível reduzir o problema bidimensional em derivadas parciais para dois problemas unidimensionais de equações diferenciais ordinárias acoplados pelos termos de fuga. Na segunda etapa, procedemos com uma discretização de malha fina em cada um dos problemas unidimensionais, isto é, uma malha em que o comprimento das células são inferiores aos da malha externa ou da primeira discretização. Por fim, resolvemos estes problemas unidimensionais utilizando um esquema iterativo explícito de direções alternadas, que envolve fundamentos do método SD unidimensional para problemas de autovalor.

Iniciamos as seções deste capítulo com o desenvolvimento da primeira etapa de discretização na seção 4.1, em que apresentamos o conceito de integração transversal aplicados às células de malha grossa da grade espacial externa. Em seguida, na seção 4.2, descrevemos a análise espectral dos dois problemas unidimensionais de equações diferenciais ordinárias obtidos da primeira etapa de discretização, a partir desta análise obtemos a solução analítica geral local dos problemas unidimensionais. Na seção 4.3, oferecemos a segunda etapa de discretização, onde encontramos as equações de balanço de ordem zero para cada um dos dois problemas unidimensionais. Apresentamos, na seção 4.4, as equações auxiliares necessárias para a solução numérica dos dois problemas unidimensionais de autovalor. Na seção 4.5, desenvolvemos as equações de varredura, utilizadas no esquema iterativo explícito de direções alternadas. Por último, na seção 4.6, apresentamos um algoritmo para a solução numérica dominante de problemas de autovalor multiplicativo e o esquema iterativo numérico de direções alternadas para aproximação dos fluxos angulares nodais.

4.1 Primeira etapa de discretização

Para iniciarmos o procedimento de discretização espacial, consideramos um domínio bidimensional retangular em $\mathbb{R}^2$ com dimensões (X, Y) , que contém várias regiões retangulares $R_{i,j}$, $i = 1 : I$ e $j = 1 : J$, com propriedades físicas constantes e dimensões $(h_{i,j}^x, h_{i,j}^y)$, como ilustrado na Figura 28.

Neste ponto, passamos a descrever a primeira etapa de discretização espacial, na qual definimos uma malha espacial Λ , que chamaremos de grade externa, cujas células $\Lambda_{i,j}$ coincidem com as regiões materiais $R_{i,j}$ do domínio representado na Figura 28, i.e., $\Lambda_{i,j} \equiv R_{i,j}$, para $i = 1 : I$ e $j = 1 : J$. A formulação de ordenadas discretas S_N da equação de transporte de nêutrons, Eq.(49), aparece em cada célula espacial $\Lambda_{i,j}$ da grade externa como,

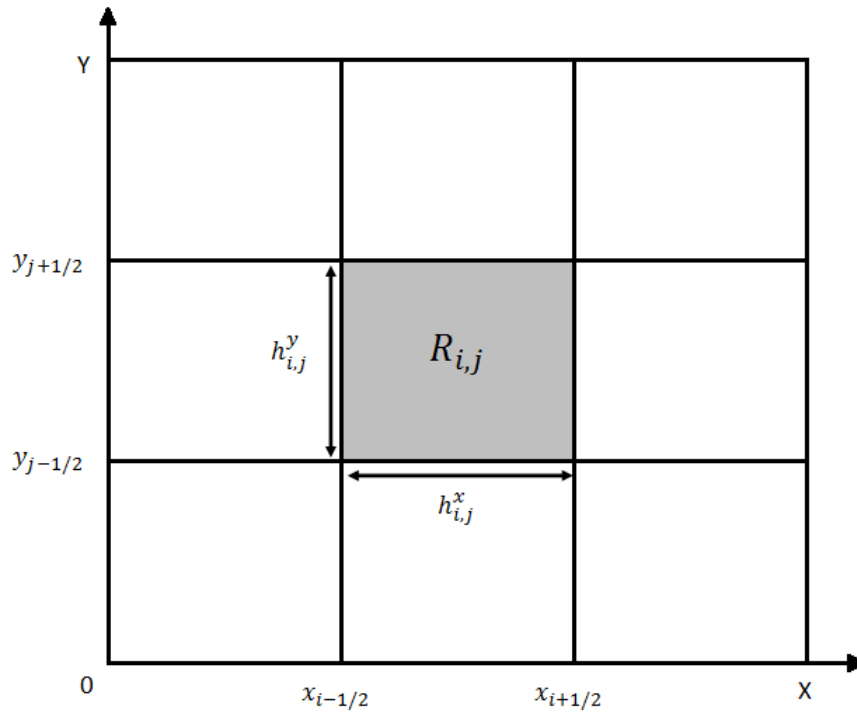


Figura 28 – Grade externa do método CSG-SD-CN sobre o domínio bidimensional retangular do problema.

$$\begin{aligned} \mu_m \frac{\partial}{\partial x} \psi_m(x, y) + \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \psi_m(x, y) + \sigma_{t_{i,j}} \psi_m(x, y) = \\ \frac{\sigma_{s0_{i,j}}}{4} \sum_{n=1}^M \psi_n(x, y) \omega_n + \frac{\sigma_{f_{i,j}}}{4k_{eff}} \sum_{n=1}^M \psi_n(x, y) \omega_n \end{aligned} \quad (107)$$

onde, $(x, y) \in R_{i,j}$ com $i = 1 : I$, $j = 1 : J$ e $m = 1 : M$.

O próximo passo, é reduzir o problema bidimensional representado pela equação em derivadas parciais, Eq. (107), para dois problemas unidimensionais de equações diferenciais ordinárias. Para isso, aplicamos o conceito de integração transversal nas direções x e y em cada uma das células espaciais $\Lambda_{i,j}$ da grade externa e obtemos duas equações de ordenadas discretas S_N integradas transversalmente, nas quais introduzimos aproximações constantes para os termos de fuga transversal na região.

Para integrarmos transversalmente a equação em derivadas parciais, Eq. (107), em uma célula espacial arbitrária $\Lambda_{i,j}$ na direção y , aplicamos o operador,

$$\frac{1}{h_{i,j}^y} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \bullet dy. \quad (108)$$

O resultado são M equações S_N integradas transversalmente para o momento de ordem zero do fluxo angular dependentes da variável x , que aparecem como

$$\mu_m \frac{d}{dx} \tilde{\psi}_{m,j}(x) + \sigma_{t_{i,j}} \tilde{\psi}_{m,j}(x) = \frac{\sigma_{s0_{i,j}}}{4} \sum_{n=1}^M \tilde{\psi}_{n,j}(x) \omega_n + \frac{\nu \sigma_{f_{i,j}}}{4k_{eff}} \sum_{n=1}^M \tilde{\psi}_{n,j}(x) \omega_n - \frac{\eta_m}{h_{i,j}^y} [\psi_m(x, y_{j+1/2}) - \psi_m(x, y_{j-1/2})] \quad (109)$$

onde definimos,

$$\tilde{\psi}_{m,j}(x) = \frac{1}{h_{i,j}^y} \int_{y_{j-1/2}}^{y_{j+1/2}} \psi_m(x, y) dy, \quad (110)$$

como o fluxo angular dependente de x , $x_{i-1/2} \leq x \leq x_{i+1/2}$, e mediado no eixo y da célula espacial $\Lambda_{i,j}$, conforme ilustrado na Figura 29. As notações $\psi_m(x, y_{j\pm 1/2})$ representam respectivamente os fluxos angulares dependentes de x e definidos nas arestas $y_{j\pm 1/2}$ da célula espacial $\Lambda_{i,j}$, conforme mostra a Figura 29 nos contornos inferior e superior.

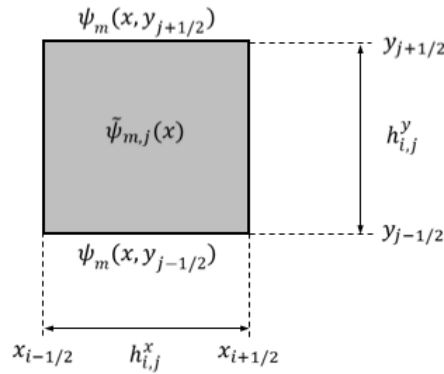


Figura 29 – Representação das grandezas obtidas da integração transversal em y na região arbitrária $R_{i,j}$, equação dependente de x .

As equações S_N integradas transversalmente para o momento de ordem zero do fluxo angular na direção x em uma célula arbitrária $\Lambda_{i,j}$ podem ser obtidas por um procedimento similar ao da direção y , onde aplicamos na Eq. (107) o operador,

$$\frac{1}{h_{i,j}^x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \bullet dx \quad (111)$$

e obtemos M equações S_N integradas transversalmente dependentes da variável y , na forma

$$\eta_m \frac{d}{dy} \hat{\psi}_{m,i}(y) + \sigma_{t,i,j} \hat{\psi}_{m,i}(y) = \frac{\sigma_{s0,i,j}}{4} \sum_{n=1}^M \hat{\psi}_{n,i}(y) \omega_n + \frac{\nu \sigma_{f,i,j}}{4k_{eff}} \sum_{n=1}^M \hat{\psi}_{n,i}(y) \omega_n - \frac{\mu_m}{h_{i,j}^x} [\psi_m(x_{i+1/2}, y) - \psi_m(x_{i-1/2}, y)] \quad (112)$$

onde definimos,

$$\hat{\psi}_{m,i}(y) = \frac{1}{h_{i,j}^x} \int_{x_{i-1/2}}^{x_{i+1/2}} \psi_m(x, y) dy, \quad (113)$$

como o fluxo angular dependente de y , $y_{j-1/2} \leq y \leq y_{j+1/2}$, e mediado no eixo x da célula espacial $\Lambda_{i,j}$, conforme ilustrado na Figura 30. As notações $\psi_m(x_{i\pm 1/2}, y)$ representam respectivamente os fluxos angulares dependentes de y e definidos nas arestas $x_{i\pm 1/2}$ da célula espacial $\Lambda_{i,j}$, conforme mostra a Figura 30 nos contornos esquerdo e direito.

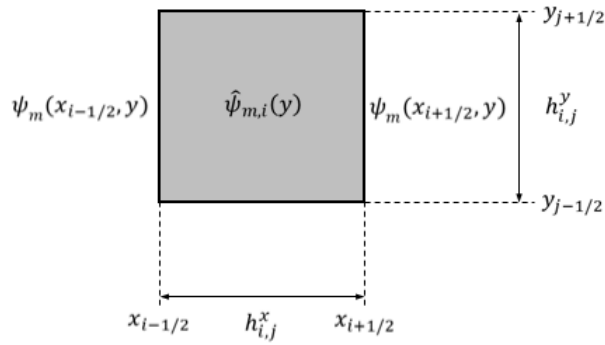


Figura 30 – Representação das grandezas obtidas da integração transversal em x na região arbitrária $R_{i,j}$, equação dependente de y .

Para cada célula espacial $\Lambda_{i,j}$, da grade externa, integrada transversalmente nas direções x e y , obtemos M equações diferenciais ordinárias dependentes da variável x , Eq. (109); M equações diferenciais ordinárias dependentes da variável y , Eq. (112); M variáveis $\tilde{\psi}_{m,j}(x)$, M variáveis $\hat{\psi}_{m,i}(y)$, M variáveis $\psi_m(x_{i\pm 1/2}, y)$ e M variáveis $\psi_m(x, y_{j\pm 1/2})$; que formam um sistema solúvel porém indeterminado com $2M$ equações diferenciais ordinárias e $4M$ variáveis. Para que estes sistemas sejam solúveis e determinados, i.e., tenham solução única, devemos introduzir aproximações para o termo de fuga transversal em cada região $R_{i,j}$. Dessa forma, definimos o termo de fuga transversal em função dos valores médios dos fluxos angulares nas arestas da região $R_{i,j}$, i.e., $\psi_m(x_{i\pm 1/2}, y) \cong \tilde{\psi}_{m,i\pm 1/2,j}$ e $\psi_m(x, y_{j\pm 1/2}) \cong \hat{\psi}_{m,i,j\pm 1/2}$, conforme ilustrado na Figura 31, pelos pontos nas arestas inferior e superior da célula espacial $\Lambda_{i,j}$, e na Figura 32, pelos pontos nas arestas esquerda e direita da célula espacial $\Lambda_{i,j}$.

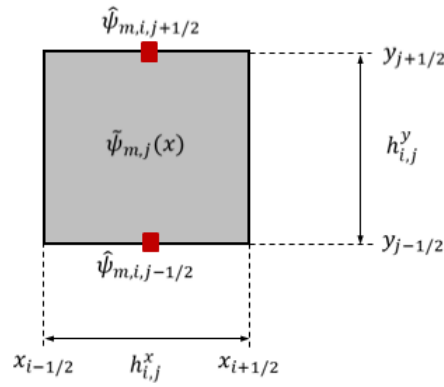


Figura 31 – Representação das grandezas presentes na equação S_N integrada transversalmente dependente de x na região arbitrária $R_{i,j}$ com aproximação constante da fuga transversal.

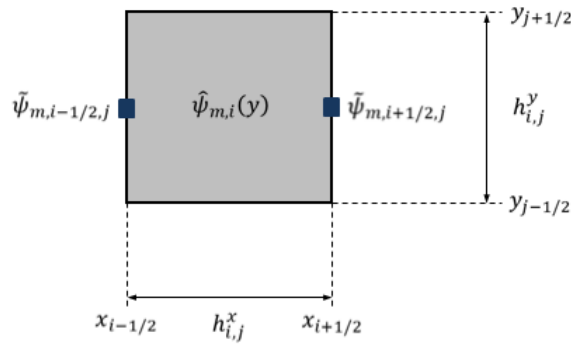


Figura 32 – Representação das grandezas presentes na equação S_N integrada transversalmente dependente de y na região arbitrária $R_{i,j}$ com aproximação constante da fuga transversal.

Consequentemente, os termos de fuga transversal nas direções x e y aparece respectivamente como,

$$\frac{\mu_m}{h_{i,j}^x} [\psi_m(x_{i+1/2}, y) - \psi_m(x_{i-1/2}, y)] = \frac{\mu_m}{h_{i,j}^x} [\tilde{\psi}_{m,i+1/2,j} - \tilde{\psi}_{m,i-1/2,j}] = \tilde{\tau}_{m,i,j}, \quad (114)$$

$$\frac{\eta_m}{h_{i,j}^y} [\psi_m(x, y_{j+1/2}) - \psi_m(x, y_{j-1/2})] = \frac{\eta_m}{h_{i,j}^y} [\hat{\psi}_{m,i,j+1/2} - \hat{\psi}_{m,i,j-1/2}] = \hat{\tau}_{m,i,j}. \quad (115)$$

Substituindo a Eq. (115) na Eq. (109), e a Eq. (114) na Eq. (112) obtemos respectivamente,

$$\mu_m \frac{d}{dx} \tilde{\psi}_{m,j}(x) + \sigma_{t_{i,j}} \tilde{\psi}_{m,j}(x) = \frac{\sigma_{s0_{i,j}}}{4} \sum_{n=1}^M \tilde{\psi}_{n,j}(x) \omega_n + \frac{\nu \sigma_{f_{i,j}}}{4k_{eff}} \sum_{n=1}^M \tilde{\psi}_{n,j}(x) \omega_n - \hat{\tau}_{m,i,j}, \quad (116)$$

$$\eta_m \frac{d}{dy} \hat{\psi}_{m,i}(y) + \sigma_{t_{i,j}} \hat{\psi}_{m,i}(y) = \frac{\sigma_{s0_{i,j}}}{4} \sum_{n=1}^M \hat{\psi}_{n,i}(y) \omega_n + \frac{\nu \sigma_{f_{i,j}}}{4k_{eff}} \sum_{n=1}^M \hat{\psi}_{n,i}(y) \omega_n - \tilde{\tau}_{m,i,j}. \quad (117)$$

As Eqs (116) e (117) representam dois problemas unidimensionais de equações diferenciais ordinárias acoplados pelo termo de fuga transversal com aproximação constante, que podem ser resolvidos separadamente. Estas equações são chamadas de equações S_N integradas transversalmente com aproximação constante. O próximo passo a ser realizado na construção do método CSG-SD-CN será a análise espectral dessas equações.

4.2 Análise espectral

Consideramos as seguintes equações diferenciais ordinárias obtidas pela aplicação do conceito de integração transversal na formulação de ordenadas discretas S_N em um meio homogêneo,

$$\lambda_m \frac{d}{du} \psi_m(u) + \sigma_t \psi_m(u) = \frac{\sigma_{s0}}{4} \sum_{n=1}^M \psi_n(u) \omega_n + \frac{\nu \sigma_f}{4k_{eff}} \sum_{n=1}^M \psi_n(u) \omega_n - \tau_m, \quad (118)$$

onde temos,

$$\begin{aligned} m &= 1 : M \\ u &= \{x|y\} \\ \lambda_m &= \{\mu_m|\eta_m\} \\ \psi_m &= \{\tilde{\psi}_m|\hat{\psi}_m\} \\ \tau_m &= \{\tilde{\tau}_m|\hat{\tau}_m\} \end{aligned}$$

dividimos a Eq. (118) por σ_t e definimos as constantes $C_0 = \frac{\sigma_{s0}}{\sigma_t}$, $B = \frac{\nu \sigma_f}{\sigma_t}$ e $F_m = \frac{\tau_m}{\sigma_t}$

$$\frac{\lambda_m}{\sigma_t} \frac{d}{du} \psi_m(u) + \psi_m(u) = \frac{C_0}{4} \sum_{n=1}^M \psi_n(u) \omega_n + \frac{B}{4k_{eff}} \sum_{n=1}^M \psi_n(u) \omega_n - F_m. \quad (119)$$

Ressaltamos que a Eq. (119) representa simultaneamente as Eqs. (116) e (117).

Para realizarmos a análise espectral da equação S_N integradas transversalmente, Eq. (119), utilizamos o método de separação de variáveis. As soluções analíticas gerais do sistema de equações diferenciais ordinárias composto pelas M equações representada pela Eq. (119) podem ser escritas na forma

$$\psi_m(u) = \psi_m^h(u) + \psi_m^p(u), \quad m = 1 : M \quad (120)$$

em que, $\psi_m^p(u)$ denota a componente particular e $\psi_m^h(u)$ representa a componente homogênea da solução analítica geral (120) para uma direção m . Devido ao termo de fuga transversal, que torna presente fontes prescritas no interior do domínio unidimensional, a componente particular em Eq. (120) não se torna identicamente nula. Dessa forma, utilizamos o método dos coeficientes indeterminados no intuito de obtermos uma expressão para o cálculo da componente particular, $\psi_m^p(u)$, que neste caso, independe da variável u , i.e., $\psi_m^p(u) \equiv \psi_m^p$. Substituindo $\psi_m(u)$ por ψ_m^p na Eq. (119) obtemos,

$$\frac{\lambda_m}{\sigma_t} \frac{d}{du} \psi_m^p + \psi_m^p = \frac{C_0}{4} \sum_{n=1}^M \psi_n^p \omega_n + \frac{B}{4k_{eff}} \sum_{n=1}^M \psi_n^p \omega_n - F_m, \quad (121)$$

como a componente particular, ψ_m^p , independe da variável u temos

$$\frac{\lambda_m}{\sigma_t} \frac{d}{du} \psi_m^p = 0, \quad (122)$$

substituindo a Eq. (122) na Eq. (121) e reorganizando esta equação temos

$$\psi_m^p = \frac{1}{4} \left(C_0 + \frac{B}{k_{eff}} \right) \sum_{n=1}^M \psi_n^p \omega_n - F_m, \quad (123)$$

multiplicamos cada termo em Eq. (123) por ω_m e somamos cada termo da equação resultante para $m = 1 : M$, obtendo

$$\sum_{m=1}^M \psi_m^p \omega_m = \sum_{m=1}^M \left[\frac{1}{4} \left(C_0 + \frac{B}{k_{eff}} \right) \sum_{n=1}^M \psi_n^p \omega_n \right] \omega_m - \sum_{m=1}^M F_m \omega_m \quad (124)$$

devido aos valores admitidos para ω_m na quadratura de níveis, temos a condição de normalização $\sum_{m=1}^M \omega_m = 4$. Substituindo este valor na Eq. (124) e realizando algumas manipulações algébricas na equação resultante, obtemos

$$\sum_{m=1}^M \psi_m^p \omega_m = \frac{1}{\left[\left(C_0 + \frac{B}{k_{eff}} \right) - 1 \right]} \sum_{m=1}^M F_m \omega_m, \quad (125)$$

agora, substituindo a expressão para o somatório dada pela Eq. (125) na Eq. (123) obtemos

$$\psi_m^p = \frac{\left(C_0 + \frac{B}{k_{eff}} \right)}{4 \left[\left(C_0 + \frac{B}{k_{eff}} \right) - 1 \right]} \sum_{n=1}^M F_n \omega_n - F_m, \quad m = 1 : M. \quad (126)$$

As M expressões denotadas pela Eq. (126), representam as componentes particulares das soluções analíticas gerais do sistema de equações diferenciais ordinárias.

Para encontrarmos a componente homogênea, $\psi_m^h(u)$, da solução analítica geral (120) para uma direção m , reescrevemos a Eq. (119), substituindo $\psi_m(u)$ por $\psi_m^h(u)$, e anulamos o termo de fuga transversal, i.e., $F_m = 0$,

$$\frac{\lambda_m}{\sigma_t} \frac{d}{du} \psi_m^h(u) + \psi_m^h(u) = \frac{C_0}{4} \sum_{n=1}^M \psi_n^h(u) \omega_n + \frac{B}{4k_{eff}} \sum_{n=1}^M \psi_n^h(u) \omega_n. \quad (127)$$

Determinamos a solução homogênea, com o auxílio da técnica de análise espectral proposta por (CASE; ZWEIFEL, 1967) para a equação de transporte de *Boltzmann* em geometria cartesiana unidimensional, que propõe uma solução segundo o *ansatz*

$$\psi_{m\vartheta}^h(u) = a_m(\vartheta) e^{\frac{\sigma_t u}{\vartheta}}, \quad (128)$$

onde $a_m(\vartheta)$ é a m -ésima componente do autovetor $\underline{a}(\vartheta)$ e ϑ é o autovalor associado.

Para obtermos uma expressão para o cálculo da componente do autovetor $a_m(\vartheta)$ e calcularmos o autovalor associado ϑ , primeiramente, substituímos a Eq. (128) na Eq. (127), realizamos uma manipulação algébrica no primeiro termo da equação e reorganizamos a equação resultante, obtendo

$$\frac{\lambda_m}{\vartheta} a_m(\vartheta) e^{\frac{\sigma_t u}{\vartheta}} + a_m(\vartheta) e^{\frac{\sigma_t u}{\vartheta}} = \frac{1}{4} \left(C_0 + \frac{B}{k_{eff}} \right) \sum_{n=1}^M a_n(\vartheta) e^{\frac{\sigma_t u}{\vartheta}} \omega_n, \quad (129)$$

agora, multiplicamos a Eq. (129) por $e^{-\frac{\sigma_t u}{\vartheta}}$ e obtemos

$$\frac{\lambda_m}{\vartheta} a_m(\vartheta) + a_m(\vartheta) = \frac{1}{4} \left(C_0 + \frac{B}{k_{eff}} \right) \sum_{n=1}^M a_n(\vartheta) \omega_n. \quad (130)$$

Após algumas manipulações algébricas sobre a Eq. (130) obtemos a seguinte expressão

$$a_m(\vartheta) = \frac{\left(C_0 + \frac{B}{k_{eff}} \right) \vartheta}{4(\lambda_m + \vartheta)} \sum_{n=1}^M a_n(\vartheta) \omega_n, \quad (131)$$

sendo $a_m(\vartheta)$ as componentes do autovetor do problema podemos considerar como condição de normalização, a expressão

$$\sum_{n=1}^M a_n(\vartheta) \omega_n = 1. \quad (132)$$

Por fim, substituímos a Eq. (132) na Eq. (131) e obtemos

$$a_m(\vartheta) = \frac{\left(C_0 + \frac{B}{k_{eff}} \right) \vartheta}{4(\lambda_m + \vartheta)}. \quad (133)$$

A partir da expressão (133), podemos calcular a m -ésima componente do autovetor $\underline{a}(\vartheta)$, a partir da direção angular, os parâmetros físicos e o autovalor associado ϑ .

Para obtermos a relação de dispersão, utilizada no cálculo do autovalor ϑ , multiplicamos a Eq. (133) por ω_m , somamos a equação resultante para $m = 1 : M$ e obtemos

$$\sum_{m=1}^M a_m(\vartheta) \omega_m = \sum_{m=1}^M \frac{\left(C_0 + \frac{B}{k_{eff}} \right) \vartheta}{4(\lambda_m + \vartheta)} \omega_m, \quad (134)$$

após este procedimento, substituímos Eq. (132) na Eq. (134), obtendo

$$\frac{\left(C_0 + \frac{B}{k_{eff}} \right) \vartheta}{4} \sum_{m=1}^M \frac{\omega_m}{\lambda_m + \vartheta} = 1, \quad \vartheta \neq -\lambda_m. \quad (135)$$

A expressão (135) representa a relação de dispersão, que é utilizada para o cálculo do autovalor ϑ . Devido a configuração de simetria da quadratura de nível,

utilizada no método de ordenadas discreta S_N , temos somente N valores de λ_m distintos. Dessa forma, multiplicamos a relação de dispersão por $\prod_{m=1}^M (\lambda_m + \vartheta)$ e obtemos um polinômio característico de grau N , cujas raízes representam os autovalores ϑ_k , $k = 1 : N$ do espectro das equações diferenciais ordinárias S_N unidimensionais (127). A partir dos N autovalores obtidos, podemos calcular as N componentes de cada um dos N autovetores correspondentes utilizando a Eq. (133). Em meios multiplicativos, dependendo dos valores dos parâmetros físicos do meio e da estimativa do coeficiente efetivo de multiplicação, podemos ter autovalores reais e/ou imaginários puros. Maiores detalhes em relação ao caráter dos autovalores podem ser encontrados no Apêndice A.

Para completarmos o espectro das Eqs (127), devemos obter os outros $(M - N)$ autovetores e os autovalores associados. Para isto, consideramos a seguinte condição de normalização,

$$\sum_{n=1}^M a_n(\vartheta) \omega_n = 0, \quad (136)$$

substituímos a Eq. (136) na Eq. (130) e obtemos

$$\frac{\lambda_m}{\vartheta} a_m(\vartheta) + a_m(\vartheta) = 0, \quad (137)$$

reorganizando a equação (137) obtemos

$$(\lambda_m + \vartheta) a_m(\vartheta) = 0. \quad (138)$$

Para satisfazermos a equação (138) temos duas alternativas:

- i. Se $\vartheta = -\lambda_m$, então $a_m(\vartheta) \neq 0$;
- ii. Se $\vartheta \neq -\lambda_m$, então $a_m(\vartheta) = 0$.

Desde que atendam a exigência da condição de normalização (136), as alternativas (i) e (ii) nos permitem construir os $(M - N)$ autovetores e autovalores restantes.

As técnicas utilizadas para calcular os N autovalores através da relação de dispersão (135), bem como as técnicas utilizadas para construir o complemento do espectro das equações diferenciais ordinárias S_N unidimensionais (127) podem ser encontradas nos Apêndices A e B, respectivamente.

Obtidos os M autovalores e os respectivos autovetores do espectro das equações S_N unidimensionais, podemos agora reescrever a solução homogênea (128) como,

$$\psi_{m\vartheta_k}^h(u) = \sum_{k=1}^M \beta_k a_m(\vartheta_k) e^{\frac{\sigma_k u}{\vartheta_k}}, \quad m = 1 : M, \quad (139)$$

onde β_k , $k = 1 : M$, são constantes arbitrárias.

Para concluir a análise espectral das equações diferenciais ordinárias S_N unidimensionais integradas transversalmente em u para o momento de ordem zero do fluxo angular, reescrevemos a solução analítica geral, substituindo a Eq. (139) e a Eq. (126) na Eq. (120),

$$\psi_m(u) = \sum_{k=1}^M \beta_k a_m(\vartheta_k) e^{\frac{\sigma_k u}{\vartheta_k}} + \frac{\left(C_0 + \frac{B}{k_{eff}}\right)}{4 \left[\left(C_0 + \frac{B}{k_{eff}}\right) - 1\right]} \sum_{n=1}^M F_n \omega_n - F_m, \quad (140)$$

onde $m = 1 : M$ e $\beta_k \in \mathbb{R}$, $k = 1 : M$.

Para darmos continuidade ao desenvolvimento do método CSG-SD-CN, realizaremos na seção 4.3, a segunda etapa de discretização que consiste em submeter cada problema unidimensional a uma discretização de malha fina, que chamaremos de grade interna, em que a dimensão das células que a compõem são inferiores às dimensões das células da grade externa.

4.3 Segunda etapa de discretização

Para discretizarmos as equações S_N unidimensionais nas direções x e y , consideramos uma célula espacial $\Lambda_{i,j}$, da grade externa, e introduzimos grades internas com células espaciais finas, que denominaremos Γ^x e Γ^y , para cada uma das direções x e y respectivamente, conforme ilustrado na Figura 33.

A grade interna Γ^x divide cada célula espacial externa $\Lambda_{i,j}$, na direção x , em $P_{i,j}$ células espaciais $\Gamma_{p,j}^x$ finas com comprimento $\Delta_{p,j}^x$ e largura $h_{i,j}^y$. Por sua vez, a grade interna Γ^y divide cada célula espacial externa $\Lambda_{i,j}$, na direção y , em $Q_{i,j}$ células espaciais $\Gamma_{i,q}^y$ finas com largura $\Delta_{i,q}^y$ e comprimento $h_{i,j}^x$.

A seguir, derivamos as equações de balanço espacial de ordem zero para os dois problemas unidimensionais de equações diferenciais ordinárias acoplados pelo termo de fuga transversal com aproximação constante, Eqs (116) e (117).

Para obtermos as equações de balanço espacial de ordem zero para o problema dependente de x em uma célula espacial $\Gamma_{p,j}^x$, aplicamos na Eq. (116) o operador

$$\frac{1}{\Delta_{p,j}^x} \int_{x_{p-1/2}}^{x_{p+1/2}} \bullet dx \quad (141)$$

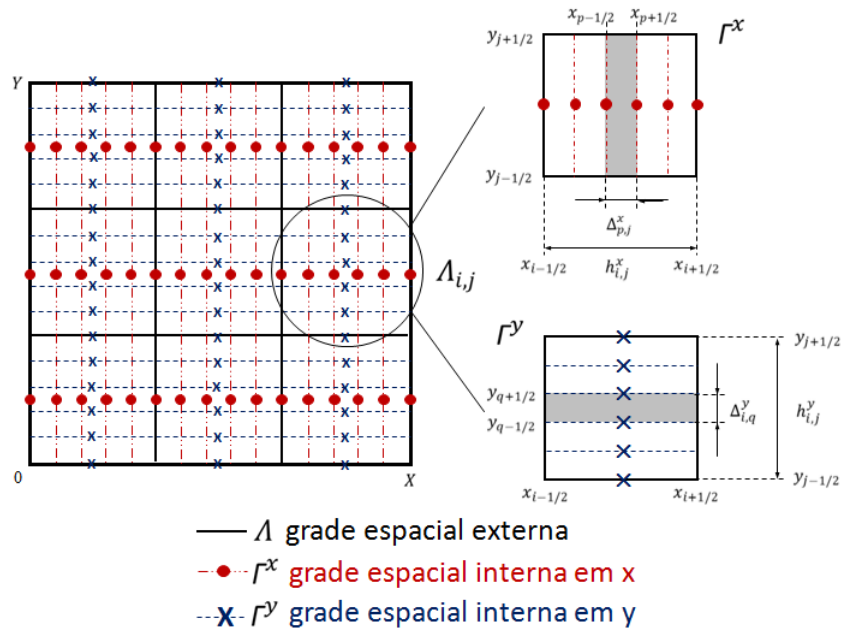


Figura 33 – Representação das grades externas e internas utilizadas no domínio de interesse.

e obtemos,

$$\frac{\tilde{\psi}_{m,p+1/2,j} - \tilde{\psi}_{m,p-1/2,j}}{\alpha_{m,p,j}^x} + \bar{\psi}_{m,p,j}^x = S_{SC_{p,j}}^x + S_{F_{p,j}}^x - \hat{F}_{m,i,j} \quad (142)$$

onde $\tilde{\psi}_{m,p\pm 1/2,j}$ representam respectivamente os fluxos angulares de nêutrons que se deslocam nas direções angulares discretas μ_m definidos nas arestas $x_{p\pm 1/2}$ da célula espacial $\Gamma_{p,j}^x$ e mediados em y_j . Ainda na Eq. (142), definimos as seguintes grandezas

$$\alpha_{m,p,j}^x = \frac{\Delta_{p,j}^x \sigma_{t_{i,j}}}{\mu_m}, \quad (143)$$

como uma constante utilizada para simplificar a equação (142), que envolve a dimensão da célula espacial $\Gamma_{p,j}^x$, a seção de choque macroscópica total na região $R_{i,j}$ e os valores das direções angulares da quadratura de nível μ_m ;

$$\bar{\psi}_{m,p,j}^x = \frac{1}{\Delta_{p,j}^x} \int_{x_{p-1/2}}^{x_{p+1/2}} \tilde{\psi}_{m,j}(x) dx, \quad (144)$$

como o fluxo angular médio na célula espacial $\Gamma_{p,j}^x$;

$$S_{SC_{p,j}}^x = \frac{C_{0,i,j}}{4} \sum_{n=1}^M \bar{\psi}_{n,p,j}^x \omega_n, \quad (145)$$

como o termo de fonte de espalhamento associado aos problemas na direção x ;

$$S_{F_{p,j}}^x = \frac{B_{i,j}}{4k_{eff}} \sum_{n=1}^M \bar{\psi}_{n,p,j}^x \omega_n, \quad (146)$$

como o termo de fonte de fissão associado aos problemas na direção x ; e

$$\hat{F}_{m,i,j} = \frac{\hat{\tau}_{m,i,j}}{\sigma_{t_{i,j}}} \quad (147)$$

como o termo de fuga transversal na região $\Lambda_{i,j}$ na direção y .

De maneira análoga ao procedimento para obtenção das equações de balanço de ordem zero para o problema dependente de x , obtemos as equações de balanço espacial de ordem zero para o problema dependente de y em uma célula espacial $\Gamma_{i,q}^y$. Para isto, aplicamos o operador integral

$$\frac{1}{\Delta_{i,q}^y} \int_{y_{q-1/2}}^{y_{q+1/2}} \bullet dy \quad (148)$$

na Eq. (116) e obtemos,

$$\frac{\hat{\psi}_{m,i,q+1/2} - \hat{\psi}_{m,i,q-1/2}}{\alpha_{m,i,q}^y} + \bar{\psi}_{m,i,q}^y = S_{SC_{i,q}}^y + S_{F_{i,q}}^y - \tilde{F}_{m,i,j} \quad (149)$$

onde $\hat{\psi}_{m,i,q\pm 1/2}$ representam respectivamente os fluxos angulares de nêutrons que se deslocam nas direções angulares discretas η_m definidos nas arestas $y_{q\pm 1/2}$ da célula espacial $\Gamma_{i,q}^y$ e mediados em x_i . Ainda na Eq. (149), definimos as seguintes grandezas

$$\alpha_{m,i,q}^y = \frac{\Delta_{i,q}^y \sigma_{t_{i,j}}}{\eta_m}, \quad (150)$$

como uma constante utilizada para simplificar a equação (149), que envolve a dimensão da célula espacial $\Gamma_{i,q}^y$, a seção de choque macroscópica total na região $R_{i,j}$ e os valores das direções angulares da quadratura de nível, η_m ;

$$\bar{\psi}_{m,i,q}^y = \frac{1}{\Delta_{i,q}^y} \int_{y_{q-1/2}}^{y_{q+1/2}} \hat{\psi}_{m,i}(y) dy, \quad (151)$$

como o fluxo angular médio na célula espacial $\Gamma_{i,q}^y$;

$$S_{SC_{i,q}}^y = \frac{C_{0i,j}}{4} \sum_{n=1}^M \bar{\psi}_{n,i,q}^y \omega_n, \quad (152)$$

como o termo de fonte de espalhamento associado aos problemas na direção y ;

$$S_{Fi,q}^y = \frac{B_{i,j}}{4k_{eff}} \sum_{n=1}^M \bar{\psi}_{n,i,q}^y \omega_n, \quad (153)$$

como o termo de fonte de fissão associado aos problemas na direção y ; e

$$\tilde{F}_{m,i,j} = \frac{\tilde{\tau}_{m,i,j}}{\sigma_{t_{i,j}}} \quad (154)$$

como o termo de fuga transversal na região $\Lambda_{i,j}$ na direção x .

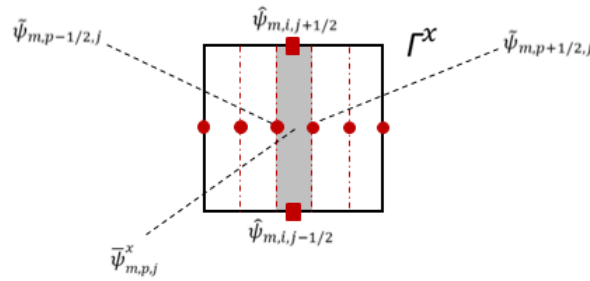
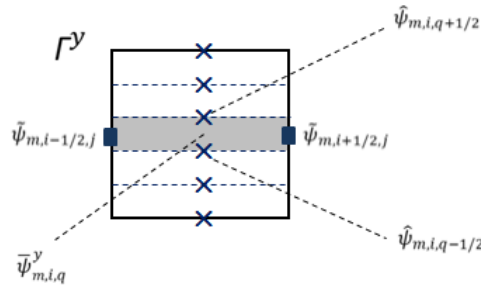
Fixemos agora, no problema dependente da variável x . Devido a quadratura de nível utilizada no método de ordenadas discretas para a discretização da variável angular de Eq. (45), derivamos M equações de balanço espacial de ordem zero (142) para cada célula espacial $\Gamma_{p,j}^x$ da grade interna Γ^x ; cujas incógnitas correspondem aos M fluxos angulares $\bar{\psi}_{m,p,j}^x$ mediados na célula $\Gamma_{p,j}^x$; aos $M/2$ fluxos angulares $\tilde{\psi}_{m,p+1/2,j}$ definidos na aresta $x_{p+1/2}$ da célula $\Gamma_{p,j}^x$ nas direções angulares emergentes ($\mu_m > 0$); e aos $M/2$ fluxos angulares $\tilde{\psi}_{m,p-1/2,j}$ definidos na aresta $x_{p-1/2}$ da célula $\Gamma_{p,j}^x$ nas direções angulares emergentes ($\mu_m < 0$).

Analogamente, considerando o problema dependente da variável y , derivamos M equações de balanço espacial de ordem zero (149) para cada célula espacial $\Gamma_{i,q}^y$ da grade interna Γ^y ; que contém M incógnitas $\bar{\psi}_{m,i,q}^y$ correspondentes aos fluxos angulares mediados na célula $\Gamma_{i,q}^y$; $M/2$ incógnitas $\hat{\psi}_{m,i,q+1/2}$, que correspondem aos fluxos angulares definidos no ponto de contorno $y_{q+1/2}$ da célula $\Gamma_{i,q}^y$ nas direções angulares emergentes ($\eta_m > 0$); e $M/2$ incógnitas $\hat{\psi}_{m,i,q-1/2}$ correspondentes aos fluxos angulares definidos no ponto de contorno $y_{q-1/2}$ da célula $\Gamma_{i,q}^y$ nas direções angulares emergentes ($\eta_m < 0$). Destacamos ainda, que os fluxos angulares incidentes nas células $\Gamma_{p,j}^x$ ou $\Gamma_{i,q}^y$ advém ou das condições de contorno da formulação de ordenadas discretas S_N ou das condições de interface para as células espaciais adjacentes às células $\Gamma_{p,j}^x$ ou $\Gamma_{i,q}^y$. As

Tabela 4 – Balanço de equações e incógnitas nos problemas unidimensionais

	Dependência de x	Dependência de y
Equações de balanço	M , Eq. (142)	M , Eq. (149)
Incógnitas médias na célula	M : $\bar{\psi}_{m,p,j}^x$, Eq. (144)	M : $\bar{\psi}_{m,i,q}^y$, Eq. (151)
Incógnitas nas arestas	M : $\hat{\psi}_{m,p\pm 1/2,j}$, $\mu_m \geq 0$	M : $\hat{\psi}_{m,q\pm 1/2}$, $\eta_m \geq 0$

Figuras 34 e 35 ilustra a distribuição das incógnitas nas células espaciais arbitrárias $\Gamma_{p,j}^x$ e $\Gamma_{i,q}^y$, respectivamente. Um resumo do balanço de equações e incógnitas nos problemas unidimensionais é oferecida na Tabela 4.

Figura 34 – Distribuição das incógnitas na grade espacial interna em x .Figura 35 – Distribuição das incógnitas na grade espacial interna em y .

Para cada problema S_N unidimensional dependentes das variáveis x ou y , as M equações e $2M$ incógnitas formam um sistema de equações lineares algébricas solúvel e indeterminado. Para obtermos uma única solução para estes dois problemas, precisamos incluir M equações auxiliares para cada problema e considerar condições de contorno nos extremos do domínio e continuidade nas interfaces $x_{p\pm 1/2}$ e $y_{q\pm 1/2}$ das células $\Gamma_{p,j}^x$ ou $\Gamma_{i,q}^y$, respectivamente.

Na próxima seção, descrevemos as equações auxiliares, que combinadas com as Eqs (142) ou (149) e suas respectivas condições de contorno, produzem sistemas

solúveis e determinados, para cada um dos problemas unidimensionais que conformam o método CSG-SD-CN.

4.4 Equações auxiliares

As equações auxiliares, utilizadas no método CSG-SD-CN para auxiliar na solução dos problemas S_N unidimensionais dependentes das variáveis x ou y , derivam da equação auxiliar do método SD-unidimensional acrescida de um parâmetro espectral para considerar o termo de fuga transversal, e de $(M - N)$ direções angulares discretas provenientes da quadratura de simetria de níveis. Dessa forma, as equações auxiliares do método CSG-SD-CN apresentam-se na seguinte forma

- Para o problema dependente de x , temos

$$\bar{\psi}_{m,p,j}^x = \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^x \left(\tilde{\psi}_{n,p-1/2,j} + \tilde{\psi}_{n,p+1/2,j} \right) + \hat{G}_{m,i,j}; \quad (155)$$

- Para o problema dependente de y , temos

$$\bar{\psi}_{m,i,q}^y = \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^y \left(\hat{\psi}_{n,i,q-1/2} + \hat{\psi}_{n,i,q+1/2} \right) + \tilde{G}_{m,i,j}. \quad (156)$$

Para compreendermos as grandezas envolvidas nas equações auxiliares (155) e (156), consideramos células arbitrárias $\Gamma_{p,j}^x$ e $\Gamma_{i,q}^y$ nas grades internas unidimensionais, ilustradas nas Figuras 36 e 37, respectivamente.

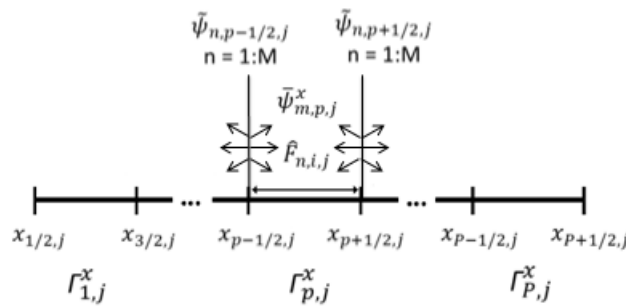


Figura 36 – Representação das grandezas envolvidas na equação auxiliar em uma célula arbitrária da grade interna Γ^x unidimensional para o método CSG-SD-CN.

As equações auxiliares, (155) e (156), expressam os fluxos angulares $\bar{\psi}_{m,p,j}^x$ e $\bar{\psi}_{m,i,q}^y$ nas direções angulares discretas (μ_m, η_m) mediados nas células espaciais $\Gamma_{p,j}^x$ e $\Gamma_{i,q}^y$ através da ponderação dos fluxos angulares incidentes e emergentes nestas células, definidos nas arestas $x_{p\pm 1/2,j}$ e $y_{i,q\pm 1/2}$, adicionando a uma função que denota a

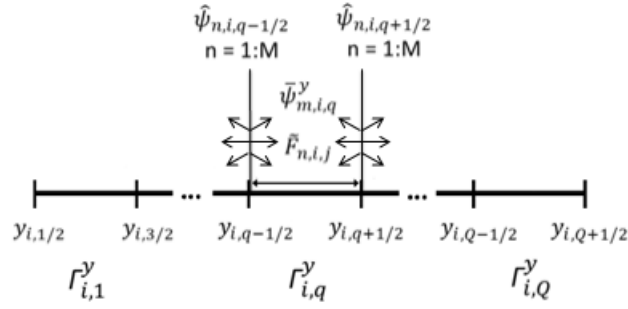


Figura 37 – Representação das grandezas envolvidas na equação auxiliar em uma célula arbitrária da grade interna Γ^y unidimensional para o método CSG-SD-CN.

contribuição dos termos de fuga transversal, (154) e (147). Os parâmetros espectrais, $\Theta_{m,n}^x$ e $\Theta_{m,n}^y$, compreendem os pesos utilizados na ponderação dos fluxos angulares nas arestas das células e preservam a solução da componente homogênea no interior da célula. Já os parâmetros espectrais, $\hat{G}_{m,i,j}$ e $\tilde{G}_{m,i,j}$, preservam a componente particular da solução no interior das células $\Gamma_{p,j}^x$ e $\Gamma_{i,q}^y$. Portanto, os parâmetros $\Theta_{m,n}^x$, $\Theta_{m,n}^y$, $\hat{G}_{m,i,j}$ e $\tilde{G}_{m,i,j}$ preservam a solução analítica geral das equações S_N unidimensionais integradas transversalmente, (116) e (117).

Para calcularmos os parâmetros $\Theta_{m,n}^x$, $\Theta_{m,n}^y$, $\hat{G}_{m,i,j}$ e $\tilde{G}_{m,i,j}$ de forma a preservarem incondicionalmente a solução analítica geral das equações S_N integradas transversalmente, (116) e (117), no interior das células espaciais $\Gamma_{p,j}^x$ e $\Gamma_{i,q}^y$, consideramos a Eq. (140) para a m -ésima direção do fluxo angular em uma célula espacial arbitrária $\Lambda_{i,j}$ dependente da variável x e y , respectivamente,

$$\tilde{\psi}_{m,j}(x) = \sum_{k=1}^M \beta_k^x a_m^x(\vartheta_k) e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}}^x}{\vartheta_k}} + \frac{\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}}\right)}{4 \left[\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}}\right) - 1\right]} \sum_{n=1}^M \hat{F}_{n,i,j} \omega_n - \hat{F}_{m,i,j}, \quad (157)$$

$$\hat{\psi}_{m,i}(y) = \sum_{k=1}^M \beta_k^y a_m^y(\vartheta_k) e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}}^y}{\vartheta_k}} + \frac{\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}}\right)}{4 \left[\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}}\right) - 1\right]} \sum_{n=1}^M \tilde{F}_{n,i,j} \omega_n - \tilde{F}_{m,i,j}. \quad (158)$$

Primeiramente, consideramos a solução analítica geral dependente de x , (157), e a partir desta equação, obtemos expressões para os fluxos angulares nas arestas e para o fluxo angular médio no interior de uma célula espacial arbitrária $\Gamma_{p,j}^x$, o que nos permite calcular os parâmetros espectrais $\Theta_{m,n}^x$ e $\hat{G}_{m,i,j}$. Para isto, num primeiro momento, substituímos na definição (144) a Eq. (157) e obtemos uma expressão para o fluxo angular médio no interior da célula espacial $\Gamma_{p,j}^x$ em x ,

$$\begin{aligned} \bar{\psi}_{m,p,j}^x = & \sum_{k=1}^M \beta_k^x \frac{\vartheta_k a_m^x(\vartheta_k)}{\Delta_{p,j}^x \sigma_{t_{i,j}}} \left(e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}} x_{p+1/2}}{\vartheta_k}} - e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}} x_{p-1/2}}{\vartheta_k}} \right) + \\ & \frac{\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}} \right)}{4 \left[\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}} \right) - 1 \right]} \sum_{n=1}^M \hat{F}_{n,i,j} \omega_n - \hat{F}_{m,i,j}, \end{aligned} \quad (159)$$

agora, avaliamos a Eq. (157) nos extremos esquerdo $x_{p-1/2}$ e direito $x_{p+1/2}$ da célula espacial $\Gamma_{p,j}^x$ e obtemos as respectivas expressões para os fluxos angulares na aresta esquerda e direita desta célula arbitrária,

$$\tilde{\psi}_{m,p\mp 1/2,j} = \sum_{k=1}^M \beta_k^x a_m^x(\vartheta_k) e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}} x_{p\mp 1/2}}{\vartheta_k}} + \frac{\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}} \right)}{4 \left[\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}} \right) - 1 \right]} \sum_{n=1}^M \hat{F}_{n,i,j} \omega_n - \hat{F}_{m,i,j}, \quad (160)$$

Obtidas as expressões (159) e (160) substituímos as mesmas na equação auxiliar (155) e obtemos

$$\begin{aligned} & \sum_{k=1}^M \beta_k^x \frac{\vartheta_k a_m^x(\vartheta_k)}{\Delta_{p,j}^x \sigma_{t_{i,j}}} \left(e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}} x_{p+1/2}}{\vartheta_k}} - e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}} x_{p-1/2}}{\vartheta_k}} \right) + \frac{\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}} \right)}{4 \left[\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}} \right) - 1 \right]} \sum_{n=1}^M \hat{F}_{n,i,j} \omega_n - \\ & \hat{F}_{m,i,j} = \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^x \left[\sum_{k=1}^M \beta_k^x a_n^x(\vartheta_k) \left(e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}} x_{p-1/2}}{\vartheta_k}} + e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}} x_{p+1/2}}{\vartheta_k}} \right) + \right. \\ & \left. \frac{\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}} \right)}{2 \left[\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}} \right) - 1 \right]} \sum_{s=1}^M \hat{F}_{s,i,j} \omega_s - 2 \hat{F}_{n,i,j} \right] + \hat{G}_{m,i,j}. \end{aligned} \quad (161)$$

Para obtermos a expressão que nos permite calcular o parâmetro espectral $\hat{G}_{m,i,j}$, consideramos na Eq. (161) apenas os termos associados à componente particular da solução analítica, isto é, aqueles que envolvem a fuga transversal $\hat{F}$ na direção y e obtemos

$$\begin{aligned} \hat{G}_{m,i,j} = & \frac{\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}} \right)}{4 \left[\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}} \right) - 1 \right]} \sum_{n=1}^M \hat{F}_{n,i,j} \omega_n \left(1 - 2 \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^x \right) \\ & - \hat{F}_{m,i,j} + 2 \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^x \hat{F}_{n,i,j}. \end{aligned} \quad (162)$$

Ainda na Eq. (161), consideramos somente os termos associados à componente homogênea da solução analítica, isto é, aqueles que independem da fuga transversal $\hat{F}$ na direção y , reorganizamos a equação resultante e obtemos

$$\sum_{k=1}^M \beta_k^x \frac{\vartheta_k a_m^x(\vartheta_k)}{\Delta_{p,j}^x \sigma_{t_{i,j}}} \left(e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}} x_{p+1/2}}{\vartheta_k}} - e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}} x_{p-1/2}}{\vartheta_k}} \right) = \sum_{k=1}^M \beta_k^x \left[\sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^x a_n^x(\vartheta_k) \left(e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}} x_{p-1/2}}{\vartheta_k}} + e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}} x_{p+1/2}}{\vartheta_k}} \right) \right], \quad (163)$$

que deverá ser satisfeita para quaisquer valores das constantes arbitrárias β_k^x , $k = 1 : M$, portanto

$$\frac{\vartheta_k a_m^x(\vartheta_k)}{\Delta_{p,j}^x \sigma_{t_{i,j}}} \left(e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}} x_{p+1/2}}{\vartheta_k}} - e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}} x_{p-1/2}}{\vartheta_k}} \right) = \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^x a_n^x(\vartheta_k) \left(e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}} x_{p-1/2}}{\vartheta_k}} + e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}} x_{p+1/2}}{\vartheta_k}} \right). \quad (164)$$

Agora, multiplicamos a Eq. (164) por $e^{-\frac{\sigma_{t_{i,j}} x_p}{\vartheta_k}}$, onde x_p representa o ponto médio da célula espacial $\Gamma_{p,j}^x$, i.e., $x_p = \frac{x_{p-1/2} + x_{p+1/2}}{2}$. Em seguida, na equação resultante, aplicamos a definição $\Delta_{p,j}^x = x_{p+1/2} - x_{p-1/2}$ e a definição de tangente hiperbólica, i.e., $\tanh(t) = \frac{e^t - e^{-t}}{e^t + e^{-t}}$, e obtemos

$$\frac{a_m^x(\vartheta_k) \vartheta_k}{\Delta_{p,j}^x \sigma_{t_{i,j}}} \tanh \left[\frac{\Delta_{p,j}^x \sigma_{t_{i,j}}}{2 \vartheta_k} \right] = \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^x a_n^x(\vartheta_k) \quad m = 1 : M. \quad (165)$$

Como mencionado anteriormente, em meios multiplicativos os autovalores ϑ_k podem assumir valores reais ou imaginários puros, i. e., $\vartheta_k = \pm i \gamma_k$. Dessa forma, a expressão (165) deve ser utilizada para calcular apenas os parâmetros espectrais associados aos autovalores ϑ_k reais. Para calcularmos os parâmetros espectrais associados aos autovalores imaginários puro, substituímos a expressão (133) na Eq. (165), atribuímos $\vartheta_k = \pm i \gamma_k$ e procedemos com uma análise complexa identificando as partes real e imaginária da equação resultante. Após esta análise complexa, obtemos as expressões que nos permitem obter os parâmetros espectrais associados aos autovalores imaginários puro $\pm i \gamma_k$, as quais aparecem na forma

$$\frac{\gamma_k \mu_m}{\Delta_{p,j}^x \sigma_{t_{i,j}} (\mu_m^2 + \gamma_k^2)} \tan \left[\frac{\Delta_{p,j}^x \sigma_{t_{i,j}}}{2 \gamma_k} \right] = \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^x \frac{\mu_n}{(\mu_n^2 + \gamma_k^2)} \quad m = 1 : M. \quad (166)$$

$$\frac{\gamma_k}{\Delta_{p,j}^x \sigma_{t_{i,j}} (\mu_m^2 + \gamma_k^2)} \tan \left[\frac{\Delta_{p,j}^x \sigma_{t_{i,j}}}{2 \gamma_k} \right] = \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^x \frac{1}{(\mu_n^2 + \gamma_k^2)} \quad m = 1 : M. \quad (167)$$

Se fixarmos m em (165) ou (166) e (167) e variarmos k , $k = 1 : M$ obtemos um sistema linear com M equações que nos permite obter os valores das M incógnitas $\Theta_{m,n}^x$, $n = 1 :$

M correspondentes à direção m fixada. Como forma de ilustração, representamos este sistema considerando apenas o cálculo do parâmetros espectrais $\Theta_{m,n}^x$ associados aos autovalores reais ϑ_k na forma matricial $\underline{\underline{A}} \cdot \underline{x} = \underline{b}$, onde

$$\underline{\underline{A}} = \begin{pmatrix} a_1^x(\vartheta_1) & a_2^x(\vartheta_1) & \cdots & a_{M-1}^x(\vartheta_1) & a_M^x(\vartheta_1) \\ a_1^x(\vartheta_2) & a_2^x(\vartheta_2) & \cdots & a_{M-1}^x(\vartheta_2) & a_M^x(\vartheta_2) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots & \vdots \\ a_1^x(\vartheta_{M-1}) & a_2^x(\vartheta_{M-1}) & \cdots & a_{M-1}^x(\vartheta_{M-1}) & a_M^x(\vartheta_{M-1}) \\ a_1^x(\vartheta_M) & a_2^x(\vartheta_M) & \cdots & a_{M-1}^x(\vartheta_M) & a_M^x(\vartheta_M) \end{pmatrix}, \quad (168)$$

$$\underline{x} = \begin{pmatrix} \Theta_{m,1}^x \\ \Theta_{m,2}^x \\ \vdots \\ \Theta_{m,M-1}^x \\ \Theta_{m,M}^x \end{pmatrix}, \quad (169)$$

$$\underline{b} = \begin{pmatrix} \frac{a_m^x(\vartheta_1)\vartheta_1}{\Delta_{p,j}^x \sigma_{t_{i,j}}} \tanh \left[\frac{\Delta_{p,j}^x \sigma_{t_{i,j}}}{2\vartheta_1} \right] \\ \frac{a_m^x(\vartheta_2)\vartheta_2}{\Delta_{p,j}^x \sigma_{t_{i,j}}} \tanh \left[\frac{\Delta_{p,j}^x \sigma_{t_{i,j}}}{2\vartheta_2} \right] \\ \vdots \\ \frac{a_m^x(\vartheta_{M-1})\vartheta_{M-1}}{\Delta_{p,j}^x \sigma_{t_{i,j}}} \tanh \left[\frac{\Delta_{p,j}^x \sigma_{t_{i,j}}}{2\vartheta_{M-1}} \right] \\ \frac{a_m^x(\vartheta_M)\vartheta_M}{\Delta_{p,j}^x \sigma_{t_{i,j}}} \tanh \left[\frac{\Delta_{p,j}^x \sigma_{t_{i,j}}}{2\vartheta_M} \right] \end{pmatrix}. \quad (170)$$

Ressaltamos que, em caso de autovalores imaginários puro, $\pm i\gamma_k$, as equações (166) ou (167) devem substituir a equação (165) neste sistema.

As equações (165) ou (166) e (167) podem ser vistas como um conjunto de M sistemas lineares, quando variamos $m = 1 : M$. A solução desses sistemas nos fornece M^2 valores para as M^2 incógnitas $\Theta_{m,n}^x$, $m, n = 1 : M$, que consideramos entradas para a matriz $\underline{\underline{\Theta}}^x$ com dimensões $M \times M$. Devido, a quadratura de nível utilizada na discretização das variáveis angulares da equação de transporte (45) para problemas bidimensionais, a matriz $\underline{\underline{\Theta}}^x$ compostas pelos parâmetros espectrais $\Theta_{m,n}^x$, $m, n = 1 : M$, é considerada uma matriz simétrica por blocos 4×4 , vide Figura (38).

Seguindo um procedimento similar ao descrito para obtermos os parâmetros espectrais $\Theta_{m,n}^x$ e $\hat{G}_{m,i,j}$, obtemos as expressões que nos permite calcular os parâmetros espectrais $\Theta_{m,n}^y$ e $\tilde{G}_{m,i,j}$. Primeiramente, substituímos na definição (151) a Eq. (158) e obtemos uma expressão para o fluxo angular médio no interior da célula espacial $\Gamma_{i,q}^y$ na direção y , em seguida avaliamos a Eq. (158) nos extremos superior e inferior da célula

espacial $\Gamma_{i,q}^y$, i.e., $y_{q\pm 1/2}$, e obtemos as expressões para os fluxos angulares nas arestas desta célula espacial. As expressões obtidas para os fluxos localizados no interior e nas arestas da célula $\Gamma_{i,q}^y$ aparecem respectivamente na seguinte forma

$$\begin{aligned} \overline{\psi}_{m,i,q}^y = & \sum_{k=1}^M \beta_k^y \frac{\vartheta_k a_m^y(\vartheta_k)}{\Delta_{i,q}^y \sigma_{t_{i,j}}} \left(e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}} y_{q+1/2}}{\vartheta_k}} - e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}} y_{q-1/2}}{\vartheta_k}} \right) + \\ & \frac{\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}} \right)}{4 \left[\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}} \right) - 1 \right]} \sum_{n=1}^M \tilde{F}_{n,i,j} \omega_n - \tilde{F}_{m,i,j}, \end{aligned} \quad (171)$$

$$\widehat{\psi}_{m,i,q\mp 1/2}^y = \sum_{k=1}^M \beta_k^y a_m^y(\vartheta_k) e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}} y_{q\mp 1/2}}{\vartheta_k}} + \frac{\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}} \right)}{4 \left[\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}} \right) - 1 \right]} \sum_{n=1}^M \tilde{F}_{n,i,j} \omega_n - \tilde{F}_{m,i,j}, \quad (172)$$

Agora, substituímos as expressões (171) e (172) na Eq. (156), onde na equação resultante, desconsideramos os termos que independem da fuga transversal em x e obtemos a seguinte expressão que nos permite calcular o parâmetro espectral $\tilde{G}_{m,i,j}$

$$\begin{aligned} \tilde{G}_{m,i,j} = & \frac{\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}} \right)}{4 \left[\left(C_{0,i,j} + \frac{B_{i,j}}{k_{eff}} \right) - 1 \right]} \sum_{n=1}^M \tilde{F}_{n,i,j} \omega_n \left(1 - 2 \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^y \right) \\ & - \tilde{F}_{m,i,j} + 2 \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^y \tilde{F}_{n,i,j}. \end{aligned} \quad (173)$$

Para calcularmos o parâmetro espectral $\Theta_{m,n}^y$, ainda na equação resultante da substituição anterior, omitimos os termos dependentes da fuga transversal em x e obtemos uma equação que será satisfeita para quaisquer valores de β_k^y , $k = 1 : M$ se

$$\frac{\vartheta_k a_m^y(\vartheta_k)}{\Delta_{i,q}^y \sigma_{t_{i,j}}} \left(e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}} y_{q+1/2}}{\vartheta_k}} - e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}} y_{q-1/2}}{\vartheta_k}} \right) = \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^y a_n^y(\vartheta_k) \left(e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}} y_{q-1/2}}{\vartheta_k}} + e^{\frac{\sigma_{t_{i,j}} y_{q+1/2}}{\vartheta_k}} \right). \quad (174)$$

Na Eq. (174), multiplicamos cada termo por $e^{-\frac{\sigma_{t_{i,j}} y_q}{\vartheta_k}}$, e em seguida, aplicamos na equação resultante a definição $\Delta_{i,q}^y = y_{q+1/2} - y_{q-1/2}$ e a definição de tangente hiperbólica. Após estas manipulações algébricas, obtemos a seguinte equação para valores arbitrários de m e k

$$\frac{a_m^y(\vartheta_k) \vartheta_k}{\Delta_{i,q}^y \sigma_{t_{i,j}}} \tanh \left[\frac{\Delta_{i,q}^y \sigma_{t_{i,j}}}{2 \vartheta_k} \right] = \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^y a_n^y(\vartheta_k) \quad m = 1 : M. \quad (175)$$

A expressão (175) deve ser utilizada para calcular apenas os parâmetros espectrais associados aos autovalores ϑ_k reais. Os parâmetros espectrais associados aos autovalores imaginários puro, $\pm i\gamma_k$, são obtidos pelas seguintes expressões

$$\frac{\gamma_k \eta_m}{\Delta_{i,q}^y \sigma_{t_{i,j}} (\eta_m^2 + \gamma_k^2)} \tan \left[\frac{\Delta_{i,q}^y \sigma_{t_{i,j}}}{2\gamma_k} \right] = \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^y \frac{\eta_n}{(\eta_n^2 + \gamma_k^2)} \quad m = 1 : M. \quad (176)$$

$$\frac{\gamma_k}{\Delta_{i,q}^y \sigma_{t_{i,j}} (\eta_m^2 + \gamma_k^2)} \tan \left[\frac{\Delta_{i,q}^y \sigma_{t_{i,j}}}{2\gamma_k} \right] = \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^y \frac{1}{(\eta_n^2 + \gamma_k^2)} \quad m = 1 : M. \quad (177)$$

Os M sistemas lineares, obtidos da variação de $m = 1 : M$ nas equações (175) ou (176) e (177), nos fornece uma matriz $\underline{\underline{\Theta}}^y$ com dimensões $M \times M$, cujos elementos são os valores dos parâmetros espectrais $\Theta_{m,n}^y$, $m, n = 1 : M$. Analogamente à matriz $\underline{\underline{\Theta}}^x$, a matriz $\underline{\underline{\Theta}}^y$ é considerada uma matriz simétrica por blocos 4×4 . A Figura 38 ilustra a simetria das matrizes $\underline{\underline{\Theta}}^x$ e $\underline{\underline{\Theta}}^y$.

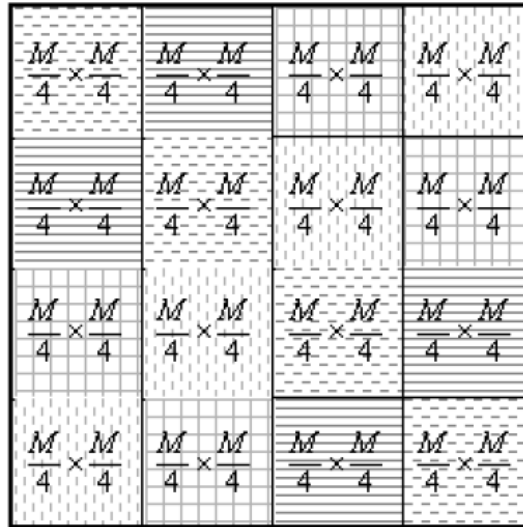


Figura 38 – Representação das matrizes simétricas por blocos 4×4 .

Após descrevermos as equações auxiliares (155) e (156) e calcularmos os parâmetros espectrais para preservar as soluções analíticas das equações integradas transversalmente, nossa próxima etapa no desenvolvimento do método CSG-SD-CN será descrever as equações de varredura que compõem o esquema numérico de varredura ou método iterativo utilizado para solucionar os sistemas solúveis e determinados dos problemas S_N unidimensionais em x e y . Para a direção x o sistema é formado pelas equações de balanço espacial (142), pelas equações auxiliares (155), e pelas condições de contorno na fronteira esquerda e direita. Por outro lado, para a direção y o sistema

é formado pelas equações de balanço espacial (149), pelas equações auxiliares (156), e pelas condições de contorno na fronteira inferior e superior.

4.5 Equações de varredura

Dentre os esquemas numéricos de varredura existentes, escolhemos o esquema de iteração da fonte modificado, SI modificado (ABREU, 1996), para a solução eficiente dos sistemas de equações lineares e algébricas obtidos da discretização espacial e angular da equação de transporte. A principal vantagem do esquema SI modificado é sua aplicabilidade a problemas unidimensionais com equações auxiliares acopladas, permitindo resolver o problema sem recorrer a varredura NBI.

Diferentemente do esquema iterativo SI tradicional, onde a aproximação para os fluxos angulares emergentes de uma célula espacial arbitrária $I_{p,j}^x$ ou $I_{i,q}^y$ na direção angular m é obtida em função dos fluxos angulares incidentes nesta célula na própria direção angular m , o esquema iterativo SI modificado, devido ao acoplamento angular nas equações auxiliares (155) e (156), obtém a aproximação para os fluxos angulares emergentes em uma célula espacial arbitrária na direção angular m em função dos fluxos angulares incidentes e emergentes nesta célula em todas as M direções angulares, com exceção dos próprios fluxos angulares emergentes na direção angular m . A similaridade dos esquemas numéricos iterativos SI tradicional e SI modificado está exclusivamente no tratamento explícito e invariância das fontes de espalhamento medidas nas correspondentes células espaciais em uma determinada iteração de varredura para obtenção dos fluxos angulares. Justamente por essa similaridade adotou-se a denominação: esquema SI modificado (ABREU, 1996).

Em função do acoplamento angular nas equações auxiliares (155) e (156), a obtenção das equações de varredura para o esquema numérico iterativo SI modificado torna-se mais complexa que a obtenção das equações de varredura para o esquema iterativo SI tradicional. Portanto a seguir, descrevemos detalhadamente o processo para obtenção das equações de varredura que constituem o método iterativo SI modificado.

Em razão da similaridade entre os problemas S_N unidimensionais dependentes das variáveis x e y , a princípio, descreveremos o procedimento para obtenção das equações de varredura do esquema iterativo SI modificado considerando apenas o problema S_N dependente da variável x , e ao término deste procedimento replicaremos as equações de varredura resultantes para o problema S_N dependente da variável y .

Inicialmente, consideramos a equação de balanço de ordem zero dependente de x , Eq. (142), como o ponto de partida para a derivação das equações de varredura. Primeiro substituímos na Eq. (142) a equação auxiliar (155) e obtemos

$$\frac{\tilde{\psi}_{m,p+1/2,j} - \tilde{\psi}_{m,p-1/2,j}}{\alpha_{m,p,j}^x} + \sum_{n=1}^M \Theta_{m,n}^x \left(\tilde{\psi}_{n,p-1/2,j} + \tilde{\psi}_{n,p+1/2,j} \right) + \hat{G}_{m,i,j} = S_{SC_{p,j}}^x + S_{F_{p,j}}^x - \hat{F}_{m,i,j}. \quad (178)$$

Uma vez que estamos derivando equações de varredura para estimar os fluxos angulares emergentes de uma célula espacial arbitrária $\Gamma_{p,j}^x$ na direção angular m , extraímos do somatório, presente na Eq. (178), os fluxos angulares referentes à m -ésima direção angular e obtemos

$$\left(\frac{1}{\alpha_{m,p,j}^x} + \Theta_{m,m}^x \right) \tilde{\psi}_{m,p+1/2,j} - \left(\frac{1}{\alpha_{m,p,j}^x} - \Theta_{m,m}^x \right) \tilde{\psi}_{m,p-1/2,j} + \sum_{n=1|n \neq m}^M \Theta_{m,n}^x \left(\tilde{\psi}_{n,p-1/2,j} + \tilde{\psi}_{n,p+1/2,j} \right) + \hat{G}_{m,i,j} = S_{SC_{p,j}}^x + S_{F_{p,j}}^x - \hat{F}_{m,i,j}. \quad (179)$$

Reorganizamos os termos na Eq. (179) e obtemos

$$\left(1 + \alpha_{m,p,j}^x \Theta_{m,m}^x \right) \tilde{\psi}_{m,p+1/2,j} - \left(1 - \alpha_{m,p,j}^x \Theta_{m,m}^x \right) \tilde{\psi}_{m,p-1/2,j} = \alpha_{m,p,j}^x \left[S_{SC_{p,j}}^x + S_{F_{p,j}}^x - \hat{F}_{m,i,j} - \sum_{n=1|n \neq m}^M \Theta_{m,n}^x \left(\tilde{\psi}_{n,p-1/2,j} + \tilde{\psi}_{n,p+1/2,j} \right) - \hat{G}_{m,i,j} \right]. \quad (180)$$

A partir de Eq. (180) podemos obter as equações de varredura para o cálculo dos fluxos angulares emergentes em uma célula espacial arbitrária $\Gamma_{p,j}^x$ na direção angular m . A depender do sentido de varredura, obtemos valores positivos e negativos para as direções angulares μ_m , dessa forma, temos duas alternativas:

- Para $\mu_m > 0$, explicitamos os fluxos angulares da Eq. (180) que emergem da célula espacial arbitrária $\Gamma_{p,j}^x$ através da aresta direita $x_{p+1/2}$, conforme Figura 36, e obtemos

$$\tilde{\psi}_{m,p+1/2,j} = \left(\frac{1 - \alpha_{m,p,j}^x \Theta_{m,m}^x}{1 + \alpha_{m,p,j}^x \Theta_{m,m}^x} \right) \tilde{\psi}_{m,p-1/2,j} + \frac{\alpha_{m,p,j}^x}{1 + \alpha_{m,p,j}^x \Theta_{m,m}^x} \left[S_{SC_{p,j}}^x + S_{F_{p,j}}^x - \hat{F}_{m,i,j} - \sum_{n=1|n \neq m}^M \Theta_{m,n}^x \left(\tilde{\psi}_{n,p-1/2,j} + \tilde{\psi}_{n,p+1/2,j} \right) - \hat{G}_{m,i,j} \right]; \quad (181)$$

- Para $\mu_m < 0$, explicitamos os fluxos angulares da Eq. (180) que emergem da célula espacial arbitrária $\Gamma_{p,j}^x$ através da aresta esquerda $x_{p-1/2}$, conforme Figura 36, e

obtemos

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}_{m,p-1/2,j} = & \left(\frac{1 + \alpha_{m,p,j}^x \Theta_{m,m}^x}{1 - \alpha_{m,p,j}^x \Theta_{m,m}^x} \right) \tilde{\psi}_{m,p+1/2,j} - \frac{\alpha_{m,p,j}^x}{1 - \alpha_{m,p,j}^x \Theta_{m,m}^x} \left[S_{SC_{p,j}}^x + \right. \\ & \left. S_{F_{p,j}}^x - \hat{F}_{m,i,j} - \sum_{n=1|n \neq m}^M \Theta_{m,n}^x \left(\tilde{\psi}_{n,p-1/2,j} + \tilde{\psi}_{n,p+1/2,j} \right) - \hat{G}_{m,i,j} \right]. \end{aligned} \quad (182)$$

Como mencionado anteriormente, a obtenção das equações de varredura do esquema iterativo SI modificado para solucionar o problema S_N dependente da variável y segue um procedimento análogo à obtenção das equações de varredura para o problema S_N dependente da variável x . Dessa forma, tomamos a equação auxiliar (156), substituímos na Eq. (149) e obtemos

$$\begin{aligned} & (1 + \alpha_{m,i,q}^y \Theta_{m,m}^y) \hat{\psi}_{m,i,q+1/2} - (1 - \alpha_{m,i,q}^y \Theta_{m,m}^y) \hat{\psi}_{m,i,q-1/2} = \\ & \alpha_{m,i,q}^y \left[S_{SC_{i,q}}^y + S_{F_{i,q}}^y - \hat{F}_{m,i,j} - \sum_{n=1|n \neq m}^M \Theta_{m,n}^y \left(\hat{\psi}_{n,i,q-1/2} + \hat{\psi}_{n,i,q+1/2} \right) - \tilde{G}_{m,i,j} \right]. \end{aligned} \quad (183)$$

As equações de varredura para a aproximação dos fluxos angulares emergentes na célula espacial arbitrária $\Gamma_{i,q}^y$ na direção angular m , podem ser obtidas a partir de Eq. (183), onde a depender do sentido de varredura, obtemos valores positivos e negativos para as direções angulares η_m . Dessa forma temos duas alternativas a considerar:

- Para $\eta_m > 0$, explicitamos os fluxos angulares da Eq. (183) que emergem da célula espacial arbitrária $\Gamma_{i,q}^y$ através da aresta superior $y_{q+1/2}$, conforme Figura 37, e obtemos

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_{m,i,q+1/2} = & \left(\frac{1 - \alpha_{m,i,q}^y \Theta_{m,m}^y}{1 + \alpha_{m,i,q}^y \Theta_{m,m}^y} \right) \hat{\psi}_{m,i,q-1/2} + \frac{\alpha_{m,i,q}^y}{1 + \alpha_{m,i,q}^y \Theta_{m,m}^y} \left[S_{SC_{i,q}}^y + \right. \\ & \left. S_{F_{i,q}}^y - \tilde{F}_{m,i,j} - \sum_{n=1|n \neq m}^M \Theta_{m,n}^y \left(\hat{\psi}_{n,i,q-1/2} + \hat{\psi}_{n,i,q+1/2} \right) - \tilde{G}_{m,i,j} \right]; \end{aligned} \quad (184)$$

- Para $\eta_m < 0$, explicitamos os fluxos angulares da Eq. (183) que emergem da célula espacial arbitrária $\Gamma_{i,q}^y$ através da aresta inferior $y_{q-1/2}$, conforme Figura 37, e obtemos

$$\begin{aligned} \hat{\psi}_{m,i,q-1/2} = & \left(\frac{1 + \alpha_{m,i,q}^y \Theta_{m,m}^y}{1 - \alpha_{m,i,q}^y \Theta_{m,m}^y} \right) \hat{\psi}_{m,i,q+1/2} - \frac{\alpha_{m,i,q}^y}{1 - \alpha_{m,i,q}^y \Theta_{m,m}^y} \left[S_{SC_{i,q}}^y + \right. \\ & \left. S_{F_{i,q}}^y - \tilde{F}_{m,i,j} - \sum_{n=1|n \neq m}^M \Theta_{m,n}^y \left(\hat{\psi}_{n,i,q-1/2} + \hat{\psi}_{n,i,q+1/2} \right) - \tilde{G}_{m,i,j} \right]. \end{aligned} \quad (185)$$

As Eqs. (181), (182), (184) e (185) são as respectivas equações de varredura que constituem o esquemas numéricos iterativos SI modificado para solução dos sistemas de equações lineares e algébricas dos problemas S_N unidimensionais dependentes das variáveis x e y .

Por fim, na próxima e última seção deste capítulo apresentamos um algoritmo computacional que organiza todas as ideias por trás do método de grades compostas proposto neste trabalho. Este método integra os fundamentos do método espectro nodal SD unidimensional com uma aproximação constante para o termo de fuga transversal na região, e uma discretização em dois estágios. O mesmo pode ser utilizado para resolver problemas de autovalor em ordenadas discretas S_N para domínios bidimensionais a um grupo de energia e com fonte de espalhamento isotrópica.

4.6 Algoritmo computacional

O algoritmo que apresentamos a seguir combina o convencional método iterativo de potência (BURDEN; FAIRES, 2010), cujo objetivo é obter uma estimativa para o autovalor dominante k_{eff} da formulação de ordenadas discretas S_N do problema bidimensional até que um critério de convergência prescrito seja atingido, ao esquema numérico iterativo SI modificado que resolve iterativamente os sistemas de equações lineares e algébricas dos problemas S_N unidimensionais dependentes das variáveis x e y , cujo objetivo é obter estimativas para os fluxos angulares emergentes nas M direções angulares em todas as células das grades espaciais internas até que um determinado critério de convergência pré-fixado seja alcançado. Ademais, como os problemas unidimensionais encontram-se acoplados pelos termos de fuga transversal, um esquema iterativo de direções alternadas deve ser utilizado até que a convergência nos termos de fuga seja satisfeita.

A Figura 39 mostra os principais passos do algoritmo computacional do método CSG-SD-CN, onde após realizarmos a leitura dos dados de entrada, fazemos as devidas inicializações das grandezas envolvidas tais como k_{eff} e os fluxos escalares médios ϕ nas células das grades internas em Γ^x e Γ^y e na grade externa Λ . Na próxima etapa do algoritmo computacional entramos em um processo iterativo de nível 1 para estimar o autovalor dominante do problema S_N bidimensional, onde o primeiro passo é determinar o espectro das equações S_N unidimensionais, i. e., seus autovalores e autovetores associados, $a(\vartheta)$ e ϑ , bem como calcular os parâmetros espectrais da solução homogênea Θ^x e Θ^y utilizados nas equações de varredura dos esquemas numéricos iterativos SI modificado para os problemas unidimensionais. O próximo passo é calcular os termos de fuga transversal na região e o parâmetro espectral $\hat{G}$ na direção y , em seguida, entramos em um outro processo iterativo de direções alternadas em um segundo nível para

estimar os termos de fuga transversal em x e y . Após calcular uma estimativa para a fuga, entramos no processo iterativo de nível 3 associado a varredura SI modificada e utilizado para obter aproximações para os fluxos angulares emergentes $\tilde{\psi}_{m,p\pm 1/2,j}$ nas M direções angulares em todas as células da grade espacial interna em x até que um determinado critério de convergência pré-fixado seja alcançado. No momento em que alcançamos a convergência para as aproximações dos fluxos angulares emergentes em x , passamos a calcular os termos de fuga transversal na região e o parâmetro espectral $\tilde{G}$ na direção x , agora, alternamos as direções dos cálculos da direção x para a direção y no processo iterativo de nível 2, e a partir de então, entramos em outro processo iterativo de nível 3 para realizar as varreduras em todas as células da grade espacial interna na direção y , onde obtemos aproximações para os fluxos angulares emergentes $\hat{\psi}_{m,i,q\pm 1/2}$ nas M direções angulares até atingirmos um determinado critério de convergência prescrito. Terminado o processo iterativo anterior, passamos a verificar a convergência para os termos de fuga transversal, caso o critério de convergência ainda não seja alcançado, repetimos todas as instruções do segundo e terceiro nível até que este critério seja alcançado. Neste ponto, alcançado o critério de convergência para a aproximação dos termos de fuga transversal, calculamos o coeficiente efetivo de multiplicação k_{eff} e verificamos a convergência deste, onde caso ainda não tenha alcançado o critério de convergência, voltamos ao primeiro passo que determina os parâmetros espectrais e repetimos todas as instruções em todos os níveis até que a convergência no k_{eff} seja alcançada.

Os Algoritmos 1 e 2 detalham os passos do esquema iterativo de varredura SI modificado para os problemas S_N unidimensionais nas direções x e y respectivamente, associados ao processos iterativos de nível 3 do algoritmo representado na Figura 39.

Neste ponto, podemos utilizar os algoritmos descritos (Figura 39, Algoritmos 1 e 2) para avaliar o desempenho computacional do método CSG-SD-CN a partir do número de operações aritméticas de ponto flutuante (NOF) necessárias para resolver o problema. Começamos avaliando o NOF para resolver os problemas unidimensionais utilizando a varredura SI modificado, ou seja, Algoritmos 1 e 2

- Em uma equação de varredura, considerando uma célula espacial arbitrária $\Gamma_{p,j}^x$ ou $\Gamma_{i,q}^y$ em uma direção angular m qualquer, temos
 - adição/subtração: $2M + 5$ operações; e,
 - multiplicação/divisão: $M + 6$ operações;
- Em uma célula espacial arbitrária $\Gamma_{p,j}^x$ ou $\Gamma_{i,q}^y$, considerando as M direções angulares, obtemos
 - adição/subtração: $2M^2 + 5M$ operações; e,

- multiplicação/divisão: $M^2 + 6M$ operações;
- Em todas as células espaciais $\Gamma_{p,j}^x$, $p = 1 : P$ ou $\Gamma_{i,q}^y$, $q = 1 : Q$, considerando as M direções angulares em cada célula,
 - adição/subtração: $P(2M^2 + 5M)$ ou $Q(2M^2 + 5M)$ operações;
 - multiplicação/divisão: $P(M^2 + 6M)$ ou $Q(M^2 + 6M)$ operações.

Algoritmo 1: CSG-SD-CN - VARREDURA SI MODIFICADA NA DIREÇÃO x

Entrada: Grandezas que constituem as equações de varredura do problema S_N dependente da variável x .

Saída: Estimativas para os fluxos angulares emergentes $\tilde{\psi}_{m,p\pm 1/2,j}$ na direção x .

início

Direções positivas ($\mu > 0$)

para $j = 1 : J$ **faça**

para $p = 1 : P$ **faça**

para $m = 1 : M/4$ (1º Quadrante) **faça**

 | Calcular $\tilde{\psi}_{m,p+1/2,j}$; Utilizar Eq. (181)

fim

para $m = 3M/4 + 1 : M$ (4º Quadrante) **faça**

 | Calcular $\tilde{\psi}_{m,p+1/2,j}$; Utilizar Eq. (181)

fim

fim

fim

Direções negativas ($\mu < 0$)

para $j = 1 : J$ **faça**

para $p = P : 1$ **faça**

para $m = M/4 + 1 : 3M/4$ (2º e 3º Quadrantes) **faça**

 | Calcular $\tilde{\psi}_{m,p-1/2,j}$; Utilizar Eq. (182)

fim

fim

fim

fim

Algoritmo 2: CSG-SD-CN - VARREDURA SI MODIFICADA NA DIREÇÃO y

Entrada: Grandezas que constituem as equações de varredura do problema S_N dependente da variável y .

Saída: Estimativas para os fluxos angulares emergentes $\hat{\psi}_{m,i,q\pm 1/2}$ na direção y .

início

Direções positivas ($\eta > 0$)

para $i = 1 : I$ **faça**

para $q = 1 : Q$ **faça**

para $m = 1 : M/2$ (1º e 2º Quadrantes) **faça**

 Calcular $\hat{\psi}_{m,i,q+1/2}$; Utilizar Eq. (184)

fim

fim

fim

Direções negativas ($\eta < 0$)

para $i = 1 : I$ **faça**

para $q = Q : 1$ **faça**

para $m = M/2 + 1 : M$ (3º e 4º Quadrante) **faça**

 Calcular $\hat{\psi}_{m,i,q-1/2}$; Utilizar Eq. (185)

fim

fim

fim

fim

Adicionalmente ao NOF das equações do esquema de varredura SI modificado, temos o NOF para os cálculos dos termos de fuga transversal da região e os parâmetros espectrais $\tilde{G}$ e $\hat{G}$ nas direções x e y respectivamente:

- NOF para os cálculos dos termos de fuga transversal da região em x ou y ,
 - adição/subtração: M operações;
 - multiplicação/divisão: $2M$ operações;
- NOF para os parâmetros espectrais $\tilde{G}$ ou $\hat{G}$,
 - adição/subtração: $2M + 2$ operações;
 - multiplicação/divisão: $2M + 5$ operações;

Portanto, considerando as equações do esquema de varredura SI modificado adicionados aos cálculos dos termos de fuga transversal da região e dos parâmetros espectrais $\tilde{G}$ e $\hat{G}$ nas direções x e y respectivamente como operações dominante do algoritmo representado na Figura 39, o NOF total deste algoritmo é pode ser descrito como

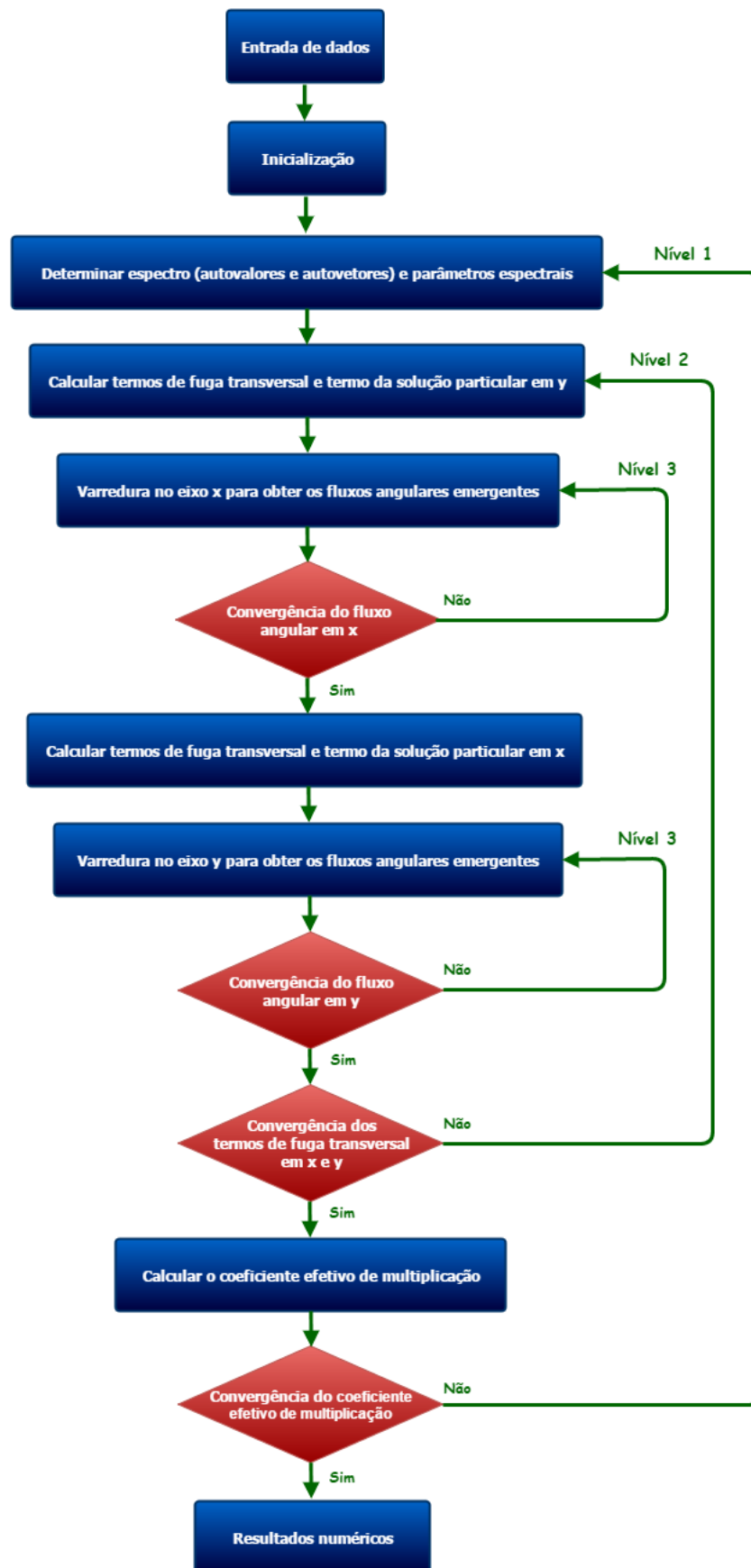


Figura 39 – Algoritmo computacional do método CSG-SD-CN.

- adição/subtração:

$$I_{k_{eff}} \cdot I_{Fuga} \{ I_{fluxo_x} [J \cdot P(2M^2 + 5M)] + I_{fluxo_y} [I \cdot Q(2M^2 + 5M)] + (I \cdot J) \cdot (6M + 4) \};$$

- multiplicação/divisão:

$$I_{k_{eff}} \cdot I_{Fuga} \{ I_{fluxo_x} [J \cdot P(M^2 + 6M)] + I_{fluxo_y} [I \cdot Q((M^2 + 6M))] + (I \cdot J) \cdot (8M + 10) \};$$

onde, $I_{k_{eff}}$ é a quantidade de iterações necessárias para a convergência do coeficiente efetivo de multiplicação, I_{Fuga} é a quantidade de iterações necessárias para a convergência dos termos de fuga transversal na região, e I_{fluxo_x} e I_{fluxo_y} são as quantidades de iterações necessárias para a convergência dos fluxos angulares emergentes nas direções x e y respectivamente. O número total de operações, sem considerar a natureza da operação, é obtido somando as duas expressões anteriores.

Neste capítulo foram apresentados os fundamentos matemáticos e algorítmicos do método CGS-SD-CN. Iniciamos o desenvolvimento com a discretização em malha grossa em nível de região, em seguida obtemos as equações S_N integradas transversalmente e introduzimos aproximações constantes para os termos de fuga transversal. Usamos a técnica de análise espectral para obter soluções analíticas gerais para as equações integradas transversalmente.

A partir deste ponto as equações integradas transversalmente com aproximações constantes representam problemas unidimensionais, em separado, discretizamos estes problemas utilizando uma grade fina, e obtemos as equações de balanço espacial de ordem zero. As equações de balanço espacial fornecem um sistema indeterminado, para obtermos solução única introduzimos as equações auxiliares do método CSG-SD-CN. Nas equações auxiliares aparecem parâmetros de ajuste que devem ser calculados de forma que as soluções analíticas gerais sejam preservadas.

As equações de balanço em conjunto com as equações auxiliares formam um sistema solúvel e determinado, para resolvê-lo usamos o esquema de varredura SI modificado, que preserva a simplicidade do esquema SI tradicional, e ao mesmo tempo incorpora as estimativas mais recentes dos fluxos emergentes na equação de varredura. Depois, mostramos um algoritmo computacional iterativo de três níveis, que combina o método da potência com um esquema de direções alternadas e as equações de varredura para convergir à solução do problema. Por último, obtemos uma expressão que permite estimar o desempenho computacional do método a partir do número de operações aritméticas de ponto flutuante.

No próximo capítulo resolvemos problemas modelos em domínios homogêneos e heterogêneos visando caracterizar o método CSG-SD-CN proposto neste capítulo.

5 Resultados e Discussão

Dedicamos este capítulo à apresentação dos resultados obtidos por meio do desenvolvimento e implementação do método de grades compostas proposto neste trabalho. A fim de quantificar a precisão e desempenho computacional do método de grades compostas, realizamos simulações computacionais para quatro problemas modelos, também conhecidos como (*benchmarks*), e apresentamos através de gráficos e tabelas comparativas os resultados numéricos gerados a partir dos experimentos destes *benchmarks*. Os métodos DD e SD-SGF-CN foram utilizados como referências para avaliar a precisão e desempenho computacional, respectivamente. Dentre os quatro problemas modelos, dois deles são caracterizados como homogêneos, onde as propriedades físicas são constantes em toda a extensão do domínio de interesse. Os outros dois problemas são caracterizados como heterogêneos, i. e., o domínio de interesse é composto por diferentes propriedades físicas.

Na seção 5.1, apresentamos e discutimos os resultados numéricos dos experimentos computacionais que envolvem os dois problemas homogêneos, cujo objetivo é validar o código computacional implementado para o CSG-SD-CN, i. e., serve como um protótipo ou etapa intermediária para resolver os problemas heterogêneos.

Na seção 5.2, apresentamos e discutimos os resultados numéricos obtidos apenas para simulações computacionais sobre problemas heterogêneos, cujo objetivo é simular tarefas típicas de engenharia nuclear em reatores nucleares de fissão.

5.1 Problemas homogêneos

Nesta seção, realizamos experimentos computacionais sobre dois problemas homogêneos, que em decorrência das condições de simetria do problema, consideramos apenas 1/4 do domínio para realizar as simulações. Na Tabela 5 encontramos as propriedades físicas utilizadas em ambos os problemas homogêneos. Na tabela 6 apresentamos os critérios para classificação das malhas em fina, média e grossa, segundo o livre caminho médio do nêutron na região, o qual pode ser calculado seguindo o procedimento descrito no Apêndice D. Ressaltamos que o critério de convergência nos fluxos angulares nas grades internas para as direções x e y foi um número fixo de iterações, considerando apenas uma iteração. O critério utilizado na convergência dos fluxos angulares na grade externa, utilizados para o cálculo dos termos de fuga de nêutrons, foi uma tolerância no desvio relativo de 10^{-5} . Utilizamos como critério de convergência para o coeficiente efetivo de multiplicação k_{eff} uma tolerância no desvio relativo de 10^{-6} . A ordem da quadratura utilizada nas variáveis angulares discretizadas

foi S_2 .

Os resultados numéricos apresentados nesta seção incluem o coeficiente efetivo de multiplicação de ambos os problemas homogêneos, a corrente neta de nêutrons nas fronteiras do domínio, bem como o número de iterações necessários para a convergência dos fluxos angulares nas fronteiras da região e do coeficiente efetivo de multiplicação.

Tabela 5 – Propriedades físicas para os problemas homogêneos

Propriedade física	$\sigma_t \text{ cm}^{-1}$	$\sigma_{S0} \text{ cm}^{-1}$	$\nu\sigma_f \text{ cm}^{-1}$
I	0,25	0,05	0,22

Tabela 6 – Classificação das células espaciais da grade interna para os problemas homogêneos

Tipo	Comprimento
Grossa	> 4
Média	≈ 4
Fina	< 4

5.1.1 Problema modelo A

O domínio de interesse utilizado para o experimento computacional do problema modelo A apresenta dimensões de $32 \text{ cm} \times 32 \text{ cm}$ representando $1/4$ do problema simétrico original, com condições de contorno reflexivas (linha contínua) para as fronteiras norte (superior), sul (inferior) e leste (direita) e condição de tipo vácuo (linha pontilhada) para a fronteira oeste (esquerda), uma representação do problema é oferecida na Figura 40. Uma característica deste problema é que as condições de contorno norte e sul são reflexivas o que fornece uma distribuição plana do fluxo em relação ao eixo y . Dessa forma, a aproximação constante para a fuga transversal de nêutrons na região é considerada uma aproximação precisa para este problema em particular, já que não há variações na distribuição do fluxo na direção vertical, pelo tanto as fugas são nulas nesta direção. Este problema pode ser resolvido satisfatoriamente por um modelo unidimensional. A razão para simularmos este problema modelo é simplesmente a validação o código computacional desenvolvido para o método CGS-SD-CN.

A distribuição do fluxo escalar de nêutrons no domínio para este problema não apresenta variações na direção y , na direção x os valores aparecem entre 1.75 n/cm^2 e 0.25 n/cm^2 , os pontos com maior fluxo de nêutrons encontram-se próximos à fronteira leste que tem condição de contorno reflexiva. Já o ponto com menor fluxo de nêutrons encontra-se próximo à fronteira oeste com condição de contorno vácuo.

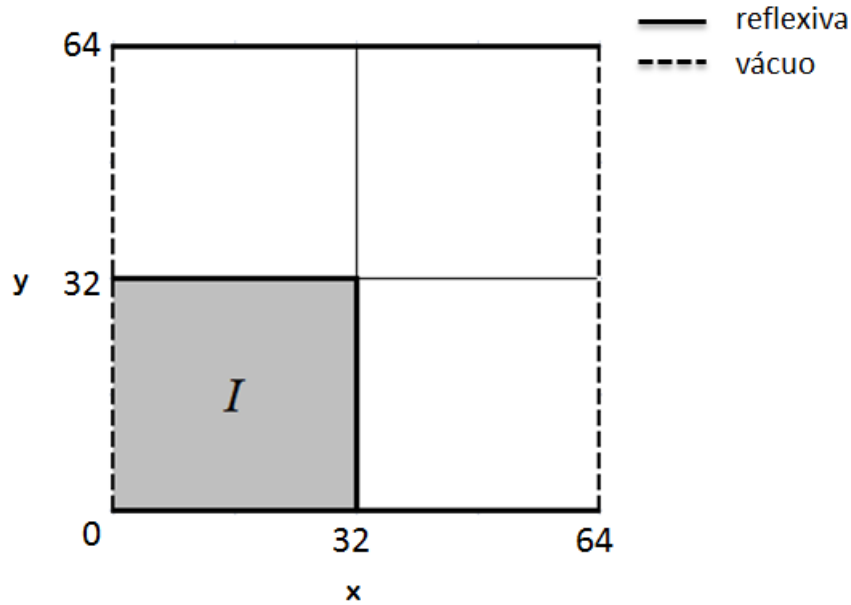


Figura 40 – Geometria e condições de contorno do problema homogêneo A.

As Tabelas 7 e 8 apresentam os resultados numéricos obtidos para o problema homogêneo A utilizando diferentes malhas de discretização. Na Tabela 7 mostramos os resultados para coeficiente efetivo de multiplicação, bem como os números de iterações necessários para a convergência do coeficiente efetivo de multiplicação e dos fluxos angulares nas fronteiras da região em cada malha. Na Tabela 8 oferecemos os resultados para a corrente neta de nêutrons pela fronteira oeste. Os valores de referência para as grandezas de interesse foram obtidas com o método DD para uma malha fina de 64 x 64 células.

De acordo com a Tabela 7 podemos afirmar que os resultados obtidos pelo CSG-SD-CN para o coeficiente efetivo de multiplicação são satisfatórios e se mostram pouco sensíveis à variação nas dimensões das células da malha mantendo seu valor constante até a segunda casa decimal. Uma melhor compreensão do comportamento desta grandeza pode ser visto na Figura 41 onde apresentamos os desvios relativos com relação à solução de referência. Na figura constatamos que o desvio relativo máximo do coeficiente efetivo de multiplicação é limitado a 10^{-1} % em uma malha contendo células de 16 cm de comprimento, considerada uma malha grossa. A Figura 41 nos mostra ainda que, o desvio relativo decresce de maneira significativa à medida que afinamos a malha, onde chega a apresentar um desvio relativo de 10^{-4} % em uma malha contendo células de 1 cm de comprimento. Ao compararmos o método CSG-SD-CN com o método DD e SD-SGF-CN, constatamos que o método multigrade oferece uma

Tabela 7 – Resultados do k_{eff} para o problema homogêneo A com diversas grades

Malha (Tipo)	Método	k_{eff}	Desvio Relativo (%)	Iterações
1x2x2 (Grossa)	CSG-SD-CN	1,082007E+00	2,593976E-01	203
2x2 (Grossa)	SD-SGF-CN	-	-	-
2x2 (Grossa)	DD	1,083495E+00	1,222321E-01	178
1x4x4 (Grossa)	CSG-SD-CN	1,084202E+00	5,706010E-02	295
4x4 (Grossa)	SD-SGF-CN	1,084833E+00	1,106173E-03	465
4x4 (Grossa)	DD	1,084508E+00	2,885269E-02	331
1x8x8 (Média)	CSG-SD-CN	1,084673E+00	1,364280E-02	307
8x8 (Média)	SD-SGF-CN	1,084833E+00	1,106173E-03	587
8x8 (Média)	DD	1,084745E+00	7,005764E-03	388
1x16x16 (Fina)	CSG-SD-CN	1,084786E+00	3,226339E-03	318
16x16 (Fina)	SD-SGF-CN	1,084833E+00	1,106173E-03	729
16x16 (Fina)	DD	1,084804E+00	1,567079E-03	414
1x32x32 (Fina)	CSG-SD-CN	1,084814E+00	6,452677E-04	318
32x32 (Fina)	SD-SGF-CN	1,084833E+00	1,106173E-03	783
32x32 (Fina)	DD	1,084818E+00	2,765433E-04	429
64x64 (Fina)	DD (Referência)	1,084821E+00	-	-

precisão semelhante ao DD para todas as malhas, e uma menor precisão que o método SD-SGF-CN para malhas grossas. Este comportamento está justificado na simplicidade do problema homogêneo e por termos poucas fugas (apenas na direção x) o que provoca que o fluxo varia suavemente facilitando a solução do problema para métodos com aproximações grosseiras como as utilizadas no DD.

Tabela 8 – Resultados da corrente neta de nêutrons na fronteira oeste do domínio para o problema homogêneo A com diversas grades

Malha (Tipo)	Método	J_{oeste}	Desvio Relativo (%)
1x2x2 (Grossa)	CSG-SD-CN	7,369825E+00	1,853642E+01
2x2 (Grossa)	DD	6,760409E+00	8,734556E+00
1x4x4 (Grossa)	CSG-SD-CN	6,470662E+00	4,074259E+00
4x4 (Grossa)	DD	6,345362E+00	2,058932E+00
1x8x8 (Média)	CSG-SD-CN	6,278004E+00	9,755441E-01
8x8 (Média)	DD	6,248275E+00	4,973822E-01
1x16x16 (Fina)	CSG-SD-CN	6,231487E+00	2,273637E-01
16x16 (Fina)	DD	6,224180E+00	1,098378E-01
1x32x32 (Fina)	CSG-SD-CN	6,220161E+00	4,519610E-02
32x32 (Fina)	DD	6,218370E+00	1,638962E-02
64x64 (Fina)	DD (Referência)	6,217351E+00	-

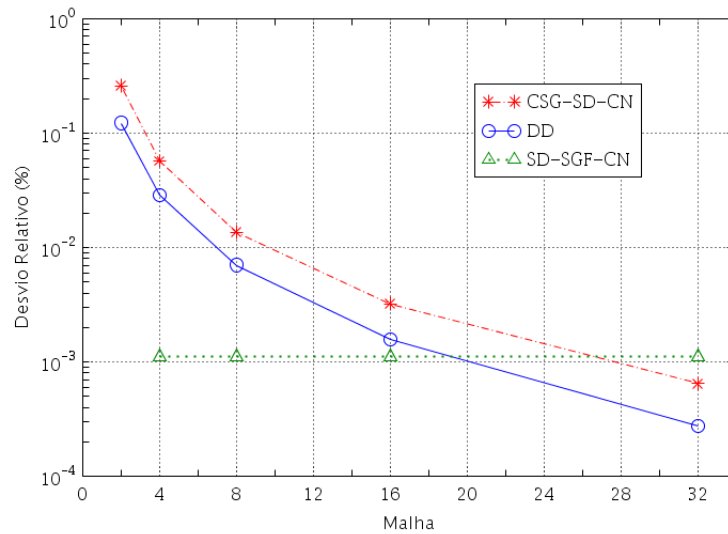


Figura 41 – Desvio relativo do coeficiente efetivo de multiplicação k_{eff} para o problema homogêneo A com múltiplas malhas.

Ao analisarmos a Tabela 8 observamos que o método CSG-SD-CN gera resultados precisos para a corrente neta de nêutrons na fronteira oeste (fugas), os resultados para esta grandeza apresentaram sensibilidade as dimensões da grade espacial, com desvios relativos variando entre $1,853642E + 01$ (malha muito grossa) e $4,519610E - 02$ (malha fina). Com relação ao coeficiente efetivo de multiplicação a sensibilidade a grade espacial desta grandeza esta justificada no fato de ser um valor mais localizado associado apenas a uma parte do domínio. Ao compararmos o método multigrade com o DD constatamos que os resultados para a fuga de nêutrons são semelhantes em relação à precisão.

Avaliamos o desempenho computacional do método CSG-SD-CN a partir do número de iterações (vide Tabela 7), observamos que excetuando o cálculo com a grade muito grossa, o método multigrade realiza menos iterações que os métodos SD-SGF-CN e DD. Entretanto, como a quantidade de operações realizadas pelos métodos em cada iteração são muito diferentes, oferecemos na Figura 42 o número de operações de ponto flutuante executadas por cada um dos métodos nos experimentos numéricos realizados. Podemos constatar, que o número de operações necessárias para obter a convergência no método CSG-SD-CN é significativamente inferior quando comparado com os métodos SD-SGF-CN e DD. Esta diminuição significativa se justifica na estratégia do método multigrade de dividir o problema multidimensional em dois problemas unidimensionais, levando a um menor número de incógnitas e varreduras de transporte mais simples. Podemos afirmar, que o método CSG-SD-CN oferece resultados precisos para o problema homogêneo A com maior desempenho computacional.

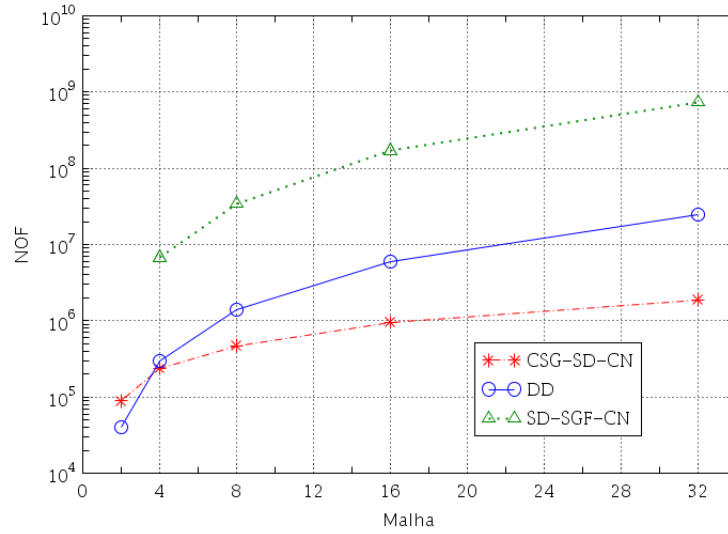


Figura 42 – Número de operações aritméticas de ponto flutuante para o problema homogêneo A com múltiplas malhas.

5.1.2 Problema modelo B

O domínio para o problema modelo B, é semelhante ao domínio do problema modelo A, mantêm as dimensões de $32\text{ cm} \times 32\text{ cm}$ representando $1/4$ do problema simétrico original, conforme Figura 43. Entretanto, utilizamos condições de contorno de tipo vácuo nas quatro fronteiras do domínio, ao considerarmos a simetria do problema teremos condições de contorno vácuo nas fronteiras oeste (direita) e norte (superior), e condições de contorno reflexivas nas fronteiras este (esquerda) sur e (inferior), pelo tanto este problema modelo é estritamente bidimensional, mais simplificado a uma única região homogênea para validação do código computacional desenvolvido para o método CGS-SD-CN. Neste problema temos fugas em ambas as direções espaciais x e y pelo que poderemos avaliar a influência da aproximação das fugas em nosso método.

A Figura 44 mostra a distribuição do fluxo escalar de nêutrons no domínio, onde podemos constatar que o ponto com maior valor do fluxo de nêutrons encontra-se próximo ao vértice formado pelas fronteiras oeste e sul as quais têm condições de contorno reflexivas, sendo o valor máximo do fluxo superior a 2.2 n/cm^2 . Já o ponto com menor valor do fluxo de nêutrons encontra-se próximo ao vértice formado pelas fronteiras leste e sul com condições de contorno vácuo, sendo o valor do fluxo menor que 0.2 n/cm^2 . Esta distribuição de fluxo e as linhas de níveis que aparecem na figura são consistentes com as condições geométricas e físicas do problema.

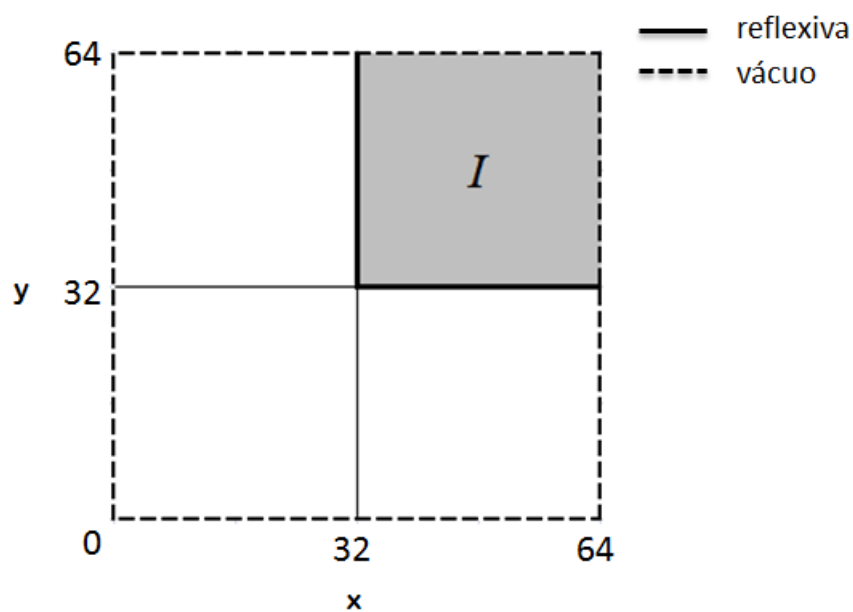


Figura 43 – Geometria e condições de contorno do problema homogêneo B.

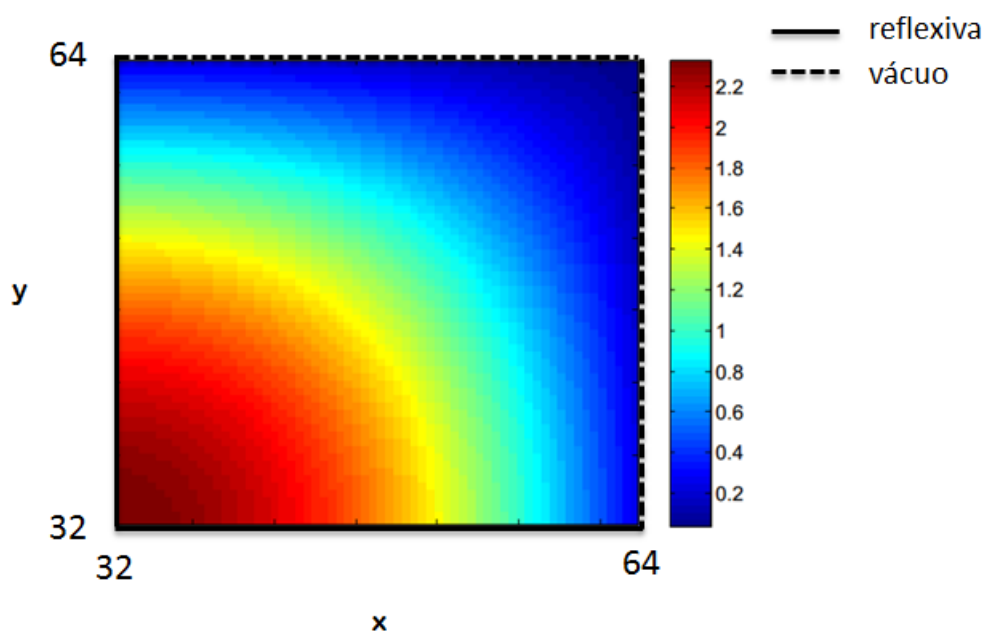


Figura 44 – Distribuição bidimensional do fluxo escalar de nêutrons no domínio do problema homogêneo B.

Nas Tabelas 9 e 10 oferecemos os resultados numéricos obtidos pelo método CSG-SD-CN para o problema homogêneo B considerando malhas de diferentes dimensões. Especificamente, na Tabela 9 apresentamos os resultados do coeficiente de multiplicação efetivo e o número de iterações para a convergência do método. Na Tabela 10 apresentamos os valores obtidos para a corrente neta de nêutrons pelas fronteiras leste e norte que têm resultados semelhantes devido à simetria em relação à diagonal sudoeste-nordeste. As soluções de referência para as grandezas de interesse foram obtidas utilizando o método DD com uma malha fina de 64 x 64 células.

Tabela 9 – Resultados do k_{eff} para o problema homogêneo B com diversas grades

Malha (Tipo)	Método	k_{eff}	Desvio Relativo (%)	Iterações
1x2x2 (Grossa)	CSG-SD-CN	1,067593E+00	2,779830E-01	246
2x2 (Grossa)	SD-SGF-CN	-	-	-
2x2 (Grossa)	DD	1,068050E+00	2,352954E-01	210
1x4x4 (Grossa)	CSG-SD-CN	1,073119E+00	2,381911E-01	409
4x2x2 (Grossa)	CSG-SD-CN	1,070274E+00	2,755544E-02	454
4x4 (Grossa)	SD-SGF-CN	1,071004E+00	4,063260E-02	558
4x4 (Grossa)	DD	1,069969E+00	5,604496E-02	380
1x8x8 (Média)	CSG-SD-CN	1,074253E+00	3,441161E-01	467
4x4x4 (Média)	CSG-SD-CN	1,071548E+00	9,144670E-02	532
16x2x2 (Média)	CSG-SD-CN	1,070574E+00	4,670414E-04	584
8x8 (Média)	SD-SGF-CN	1,070695E+00	1,176944E-02	682
8x8 (Média)	DD	1,070423E+00	1,363761E-02	449
1x16x16 (Fina)	CSG-SD-CN	1,074524E+00	3,694297E-01	484
4x8x8 (Fina)	CSG-SD-CN	1,071852E+00	1,198428E-01	554
16x4x4 (Fina)	CSG-SD-CN	1,070889E+00	2,989065E-02	602
16x16 (Fina)	SD-SGF-CN	1,070610E+00	3,829739E-03	860
16x16 (Fina)	DD	1,070534E+00	3,269290E-03	474
1x32x32 (Fina)	CSG-SD-CN	1,074591E+00	3,756881E-01	492
4x16x16 (Fina)	CSG-SD-CN	1,071928E+00	1,269418E-01	562
16x8x8 (Fina)	CSG-SD-CN	1,070966E+00	3,708308E-02	602
32x32 (Fina)	SD-SGF-CN	1,070588E+00	1,774757E-03	874
32x32 (Fina)	DD	1,070561E+00	7,472662E-04	484
64x64 (Fina)	DD (Referência)	1,070569E+00	-	-

Ao analisarmos a Tabela 9 podemos afirmar que o método CSG-SD-CN gera resultados precisos para o coeficiente efetivo de multiplicação, para todas as malhas consideradas os desvios relativos atingem no máximo valores da ordem 10^{-1} . Os desvios relativos no cálculo do k_{eff} para o problema modelo B para os três métodos empregados nesta pesquisa foram plotados na Figura 45. Uma característica importante deste

problema, e a pouca sensibilidade dos resultados ao refinamento da malha fina, isto é os desvios relativos permanecem praticamente constantes na medida que a malha interna se torna mais fina. Entretanto, se refinamos a malha externa, isto é introduzimos mais regiões na malha grossa, se observa um aumento da precisão dos resultados. Este comportamento está justificado na aproximação das fugas nos métodos multigrades, que ocorre na malha de região, e já tinha sido observado em método multigrades para problemas de fonte fixa (DOMINGUEZ et al., 2010). Ao compararmos o método CSG-SD-CN com os métodos SD-SGF-CN e DD, observamos que para malhas muito grossas os resultados do método multigrade apresentam precisão semelhante aos métodos de grade única, já para malhas intermediárias e finas os métodos de grade única se mostram mais precisos. Este resultado é consistente com os fundamentos do método de grades compostas, onde um refinamento da grade interna não influi na precisão dos resultados.

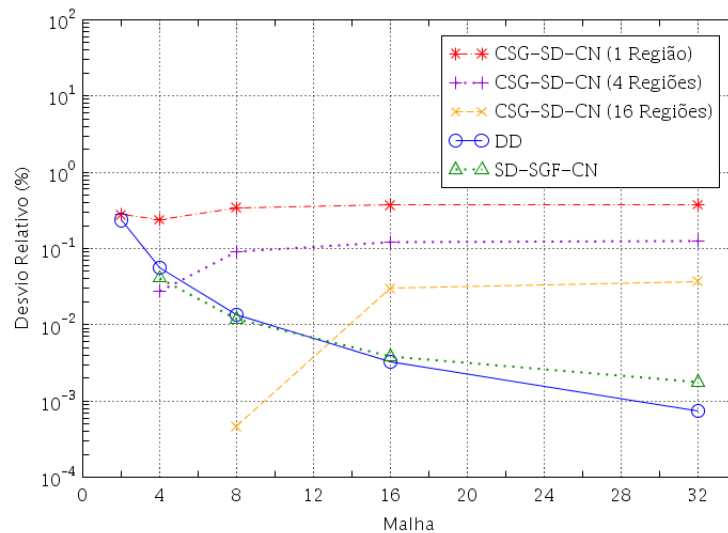


Figura 45 – Desvio relativo do coeficiente efetivo de multiplicação k_{eff} para o problema homogêneo B com múltiplas malhas.

A partir da Tabela 10 podemos constatar que o método CSG-SD-CN obtém resultados satisfatórios para a corrente neta nas fronteiras norte e leste do domínio de cálculo. Os resultados para as fugas no domínio apresentam um comportamento similar aos obtidos para o coeficiente efetivo de multiplicação. Entretanto, observamos que a precisão dos mesmos é inferior com desvios relativos que no pior caso chegam a 10^1 , também apresentam uma maior sensibilidade as mudanças das grades externas e internas. Reafirmando que o método multigrade têm maiores problemas com grandezas localizadas.

Tabela 10 – Resultados da corrente neta de nêutrons nas fronteiras norte e leste do domínio para o problema homogêneo B com diversas grades

Malha (Tipo)	Método	$J_+^{norte} = J_+^{leste}$	Desvio Relativo (%)
1x2x2 (Grossa)	CSG-SD-CN	6,636846E+00	1,010934E+01
2x2 (Grossa)	DD	6,543081E+00	8,553722E+00
1x4x4 (Grossa)	CSG-SD-CN	5,504977E+00	8,669060E+00
4x2x2 (Grossa)	CSG-SD-CN	6,087714E+00	9,989042E-01
4x4 (Grossa)	DD	6,150288E+00	2,037045E+00
1x8x8 (Média)	CSG-SD-CN	5,272621E+00	1,252399E+01
4x4x4 (Média)	CSG-SD-CN	5,826705E+00	3,331395E+00
16x2x2 (Média)	CSG-SD-CN	6,026366E+00	1,889671E-02
8x8 (Média)	DD	6,057425E+00	4,963911E-01
1x16x16 (Fina)	CSG-SD-CN	5,217216E+00	1,344319E+01
4x8x8 (Fina)	CSG-SD-CN	5,764496E+00	4,363480E+00
16x4x4 (Fina)	CSG-SD-CN	5,961744E+00	1,091015E+00
16x16 (Fina)	DD	6,034669E+00	1,188551E-01
1x32x32 (Fina)	CSG-SD-CN	5,203430E+00	1,367191E+01
4x16x16 (Fina)	CSG-SD-CN	5,748984E+00	4,620834E+00
16x8x8 (Fina)	CSG-SD-CN	5,946090E+00	1,350725E+00
32x32 (Fina)	DD	6,029096E+00	2,639566E-02
64x64 (Fina)	DD (Referência)	6,027505E+00	-

Por último avaliamos o desempenho computacional do método CSG-SD-CN na resolução deste problema, para isso apresentamos na Figura 46 o número de operações de ponto flutuante de cada método para alcançar a convergência nas malhas utilizadas nos experimentos numéricos. Adicionalmente, consideramos o número de iterações reportado na Tabela 9. Podemos afirmar, que o método CSG-SD-CN precisa menos operações de ponto flutuante que o método SD-SGF-CN para todas as malhas consideradas. Ao comparar, com o método DD observamos um custo semelhante para malhas grossas e um custo inferior para malhas finas. Em resumo, de forma geral o método de grades compostas oferece resultados precisos com menor custo computacional. Ressaltamos que por analisarmos um problema homogêneo o fluxo varia suavemente e o método DD alcança resultados precisos, este comportamento não é reproduzido em problemas mais complexos.

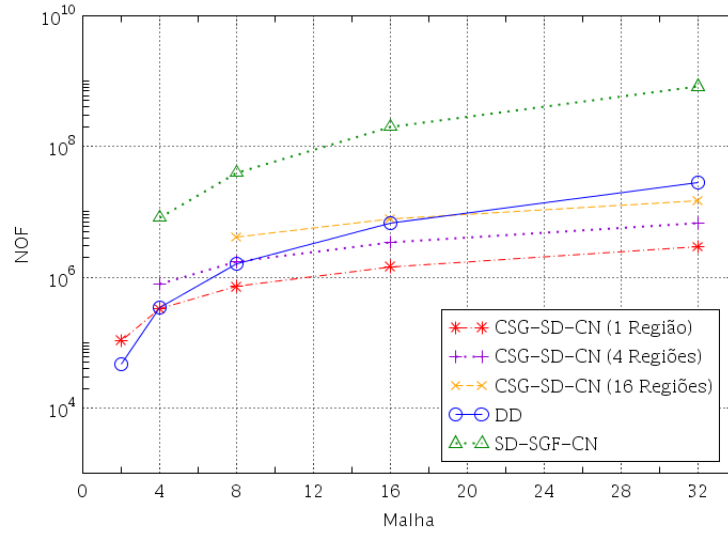


Figura 46 – Número de operações aritméticas de ponto flutuante para o problema homogêneo B com múltiplas malhas.

5.2 Problemas heterogêneos

Nesta seção, realizamos simulações computacionais para dois problemas heterogêneos, o primeiro deles uma generalização bidimensional de um problema reportado em (ABREU, 1996), o segundo foi adaptado de um problema disponível em (FILHO, 1999). Os critérios de parada utilizados nas diversas etapas do processo iterativo são semelhantes aos utilizados nos problemas homogêneos, isto é, o critério de convergência nos fluxos angulares nas grades internas foi apenas uma iteração. O critério utilizado na convergência dos fluxos angulares na grade externa foi uma tolerância no desvio relativo de 10^{-5} . Ainda, utilizamos como critério de convergência para o coeficiente efetivo de multiplicação k_{eff} uma tolerância no desvio relativo de 10^{-6} . A ordem da quadratura para discretização de das variáveis angulares foi $N = 2$, ou seja a formulação S_2 .

Os resultados numéricos apresentados nesta seção incluem o coeficiente efetivo de multiplicação, a densidade de potência em algumas das regiões do domínio, que pode ser obtida seguindo o procedimento descrito no Apêndice C, o número de iterações necessário para alcançar a convergência dos fluxos angulares nas fronteiras da região e do coeficiente efetivo de multiplicação, e o número de operações de ponto flutuante para encerrar o processo iterativo. Os resultados do método de grades compostas são comparados aos métodos SD-SGF-CN e DD visando avaliar precisão e desempenho computacional.

5.2.1 Problema modelo A

O domínio de interesse associado ao problema heterogêneo A apresenta quatro regiões materiais diferentes com dimensões totais de $150 \times 150 \text{ cm}$, representando a metade do problema simétrico original, com condições de contorno reflexivas (linha contínua) para as fronteiras norte (superior), sul (inferior) e leste (direita) e vácuo (linha pontilhada) para a fronteira oeste (esquerda), a geometria do problema pode ser visualizado na Figura 47. Na Tabela 11 listamos as propriedades físicas das regiões do problema, e na Tabela 12 mostramos as classificações da grade espacial segundo as dimensões das células.

Este problema pode ser considerado um meio infinito na direção y pelo que as grandezas do k_{eff} e a distribuição de fluxo neutrônico se correspondem com os valores do problema unidimensional equivalente. Dessa forma, a aproximação constante para a fuga transversal de nêutrons na região é considerada uma boa aproximação para este problema em específico, já que não há variações na distribuição do fluxo próximo à fronteira de fuga de cada região. A razão para simularmos este problema modelo é simplesmente a validação o código computacional desenvolvido para o método CGS-SD-CN para problema heterogêneos.

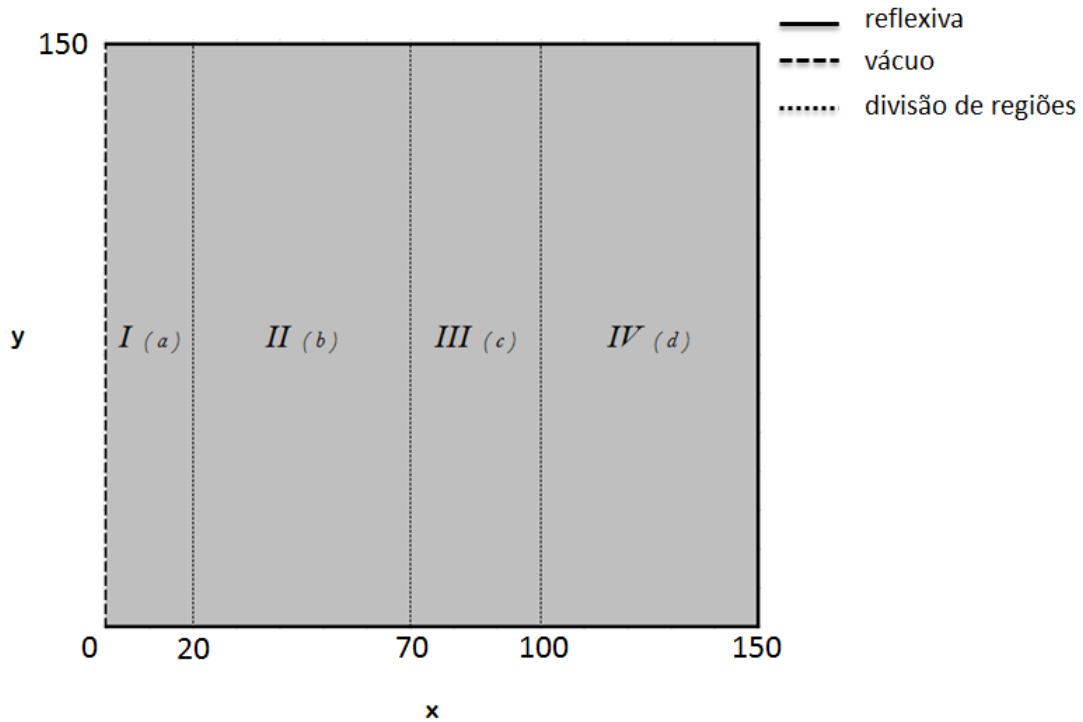


Figura 47 – Geometria e condições de contorno do problema heterogêneo A.

Tabela 11 – Propriedades físicas para problema heterogêneo A

Propriedade física	$\sigma_t \text{ cm}^{-1}$	$\sigma_{S0} \text{ cm}^{-1}$	$\nu\sigma_f \text{ cm}^{-1}$
I	0,3691	0,3371	0,0000
II	0,1200	0,0100	0,0800
III	0,2500	0,0100	0,2500
IV	0,2500	0,0500	0,2200

Tabela 12 – Classificação das células espaciais da grade interna para o problema heterogêneo A

Tipo	Comprimento
Grossa	> 8
Média	[4;8]
Fina	< 8

As Tabelas 13 e 14 apresentam os resultados numéricos obtidos pelo método CSG-SD-CN para o problema heterogêneo A considerando grades de diversas dimensões. Em particular, a Tabela 13 mostra os resultados para coeficiente efetivo de multiplicação e o número de iterações necessário para atender os critérios de convergência estabelecidos. Na Tabela 14 apresentamos os valores de densidade de potência da na região (d), que corresponde à região com maior densidade de potência. As soluções de referência para as grandezas de interesse foram geradas com o método DD para uma malha fina de 300 x 300 células.

De acordo com a Tabela 13 podemos afirmar que o método de grades compostas com aproximação constante gera resultados precisos para coeficiente efetivo de multiplicação para todas as grades consideradas. Os desvios relativos são inferiores a $7,8E-03$ valor obtido para uma uma malha contendo células de 10 cm de comprimento, considerada uma malha grossa. Na medida que refinamos a malha interna os desvios diminuem suavemente alcançando o valor $10^{-4} \%$ em uma malha contendo células de 1 cm de comprimento. Os valores dos desvios relativos em função dos tipos de malha aparecem na Figura 48, conforme esperado os resultados se mostram pouco sensíveis à variação nas dimensões das células da malha mantendo a precisão até a quarta casa decimal para uma malha contendo células com 6 cm de comprimento. Observamos no gráfico que para malhas grossas o método CSG-SD-CN gera resultados de aproximadamente a mesma precisão que o métodos SD-SGF-CN.

Tabela 13 – Resultados do k_{eff} para o problema heterogêneo A com diversas grades

Malha (Tipo)	Método	k_{eff}	Desvio Relativo (%)	Iterações
1x15x15 (Grossa)	CSG-SD-CN	1,094942E+00	7,762366E-03	7516
15x15 (Grossa)	SD-SGF-CN	1,095050E+00	2,100405E-03	10000
15x15 (Grossa)	DD	1,094985E+00	3,835522E-03	9759
1x25x25 (Média)	CSG-SD-CN	1,095002E+00	2,283049E-03	8032
25x25 (Média)	SD-SGF-CN	1,095050E+00	2,100405E-03	10000
25x25 (Média)	DD	1,095015E+00	1,095863E-03	8975
1x30x30 (Média)	CSG-SD-CN	1,095006E+00	1,917761E-03	8180
30x30 (Média)	SD-SGF-CN	1,095050E+00	2,100405E-03	10000
30x30 (Média)	DD	1,095017E+00	9,132195E-04	8986
1x50x50 (Fina)	CSG-SD-CN	1,095020E+00	6,392536E-04	8375
50x50 (Fina)	SD-SGF-CN	1,095050E+00	2,100405E-03	10000
50x50 (Fina)	DD	1,095024E+00	2,739658E-04	9012
1x75x75 (Fina)	CSG-SD-CN	1,095024E+00	2,739658E-04	8482
75x75 (Fina)	SD-SGF-CN	1,095050E+00	2,100405E-03	10000
75x75 (Fina)	DD	1,095026E+00	9,132195E-05	9006
1x150x150 (Fina)	CSG-SD-CN	1,095026E+00	9,132195E-05	8546
150x150 (Fina)	SD-SGF-CN	1,095050E+00	2,100405E-03	10000
150x150 (Fina)	DD	1,095027E+00	0,000000E+00	9012
300x300 (Fina)	DD (Referência)	1,095027E+00	-	-

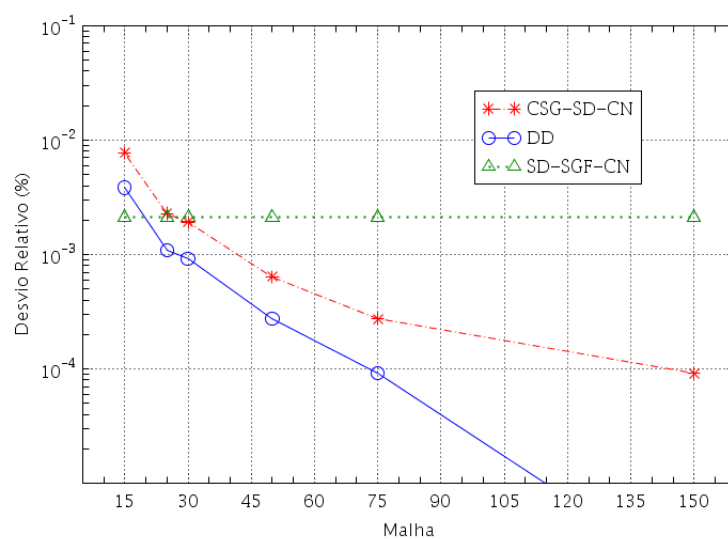
Figura 48 – Desvio relativo do coeficiente efetivo de multiplicação k_{eff} para o problema heterogêneo A com múltiplas malhas.

Tabela 14 – Resultados da densidade de potência na região (d) para o problema heterogêneo A com diversas grades

Malha (Tipo)	Método	DP (d)	Desvio Relativo (%)
1x15x15 (Grossa)	CSG-SD-CN	9,233645E+01	1,503642E-01
15x15 (Grossa)	DD	9,228906E+01	2,016102E-01
1x25x25 (Média)	CSG-SD-CN	9,243377E+01	4,512547E-02
25x25 (Média)	DD	9,241403E+01	6,647166E-02
1x30x30 (Média)	CSG-SD-CN	9,244196E+01	3,626907E-02
30x30 (Média)	DD	9,243057E+01	4,858584E-02
1x50x50 (Fina)	CSG-SD-CN	9,246471E+01	1,166796E-02
50x50 (Fina)	DD	9,246042E+01	1,630702E-02
1x75x75 (Fina)	CSG-SD-CN	9,247077E+01	5,114868E-03
75x75 (Fina)	DD	9,246896E+01	7,072143E-03
1x150x150 (Fina)	CSG-SD-CN	9,247464E+01	9,299760E-04
150x150 (Fina)	DD	9,247419E+01	1,416591E-03
300x300 (Fina)	DD (Referência)	9,247550E+01	-

Analisando a Tabela 14 constatamos que os resultados gerados pelo método CSG-SD-CN para a densidade de potencia na região (d) apresentam boa precisão, os maiores desvios aparecem para uma malha grossa com células de 10 cm e são da ordem de $1,5E - 01$. Adicionalmente, plotamos os desvios relativos no cálculo da densidade de potencia na Figura 49. Para esta grandeza a precisão dos resultados mostrou uma influencia maior das dimensões da malha espacial, atingindo uma precisão de $9,2E - 04$ para uma grade fina com células de 1 cm de comprimento. Este comportamento é consistente com as características dos métodos de grades compostas onde as dimensões de grade têm maior influência no cálculo de grandezas localizadas. Adicionalmente, destacamos que os resultados gerados pelo método CSG-SD-CN são superiores ao obtidos pelo DD para todas as malhas consideradas, neste problema onde temos maiores gradientes do fluxo de nêutrons o método DD apresenta dificuldades para gerar bons resultados.

Para avaliar o desempenho computacional do método proposto apresentamos na Figura 50 o numero de operações de ponto flutuante consumidas pelos métodos CSG-SD-CN, SD-SGF-CN e DD na resolução do problema heterogêneo A para as malhas propostas. Observamos que em todos as malhas consideradas o numero de operações do método de grades compostas é muito menor que nos métodos de grade única. Adicionalmente, se considerarmos o numero de iterações apresentado na Tabela 13 destaca-se em todos os casos um menor numero de iterações para o método CSG-SD-CN. Podemos afirmar que o método CSG-SD-CN apresentou um melhor desempenho computacional na resolução do problema heterogêneo A.

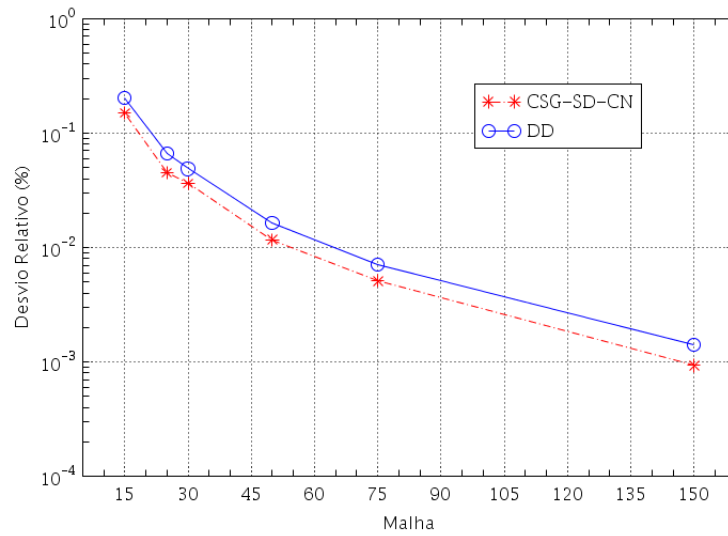


Figura 49 – Desvio relativo da densidade de potência na região (d) para o problema heterogêneo A com múltiplas malhas.

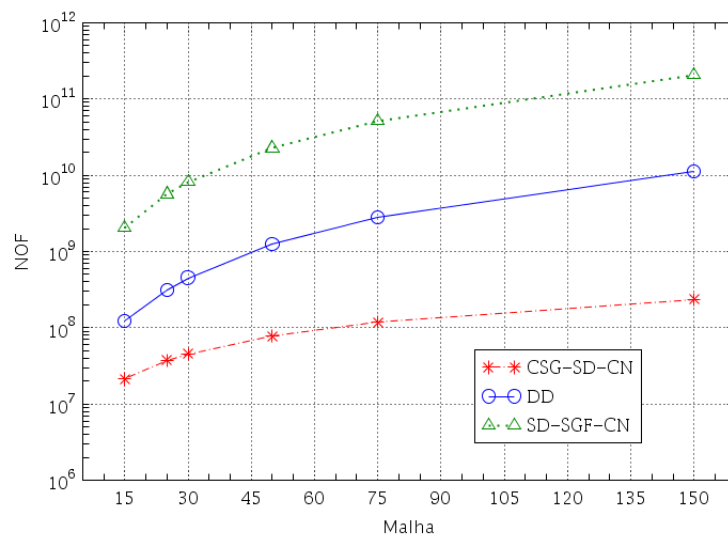


Figura 50 – Número de operações aritméticas de ponto flutuante para o problema heterogêneo A com múltiplas malhas.

5.2.2 Problema modelo B

O problema heterogêneo B representa uma simplificação de um reator nuclear com um núcleo quadrado no fim de campanha, isto é, com alta concentração de núcleos absorvedores. O núcleo é composto por três regiões prismáticas concêntricas, nas duas regiões centrais temos combustível, e na região mais externa um material refletor, neste tipo de problemas temos simetria de $1/4$, pelo tanto, ele pode ser modelado considerando apenas uma seção do domínio. Considerando as condições de simetria, teremos um domínio de $128 \times 128 \text{ cm}$ com condições de contorno reflexivas (linha contínua) para as fronteiras sul (inferior) e oeste (esquerda), e condições de contorno de tipo vácuo (linha pontilhada) nas fronteiras norte (superior) e leste (direita), uma representação do problema aparece na Figura 51. As propriedades físicas dos materiais utilizados neste problema, e a classificação das malhas segundo a relação entre as dimensões da célula e o livre caminho médio do nêutron aparecem nas Tabelas 15 e 16, respectivamente.

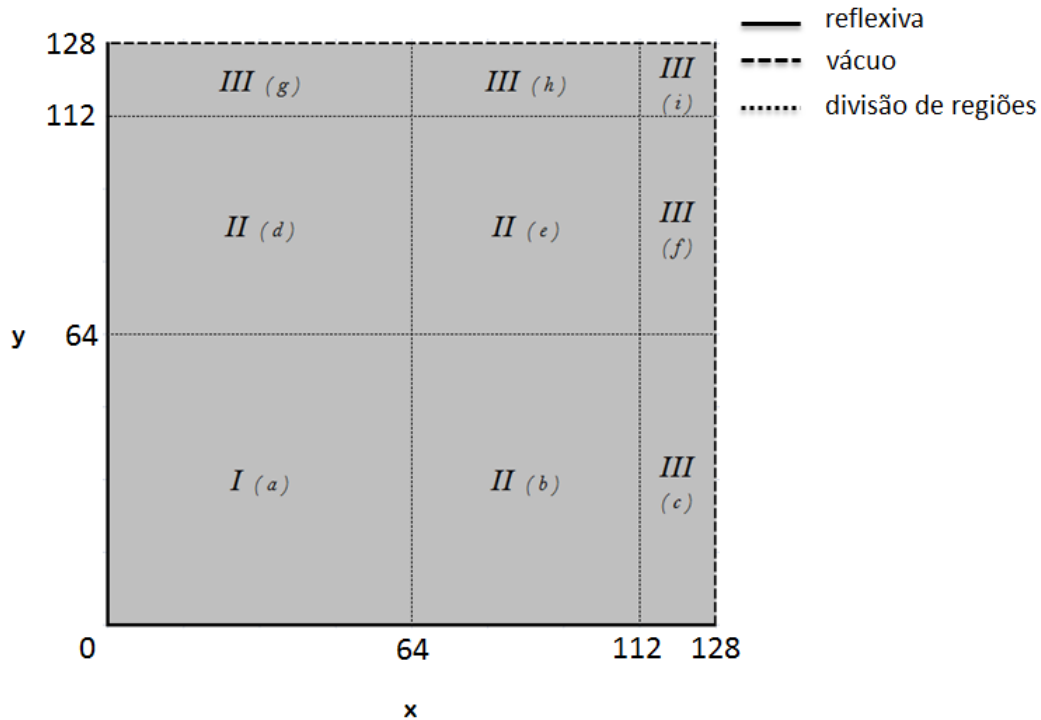


Figura 51 – Geometria e condições de contorno do problema heterogêneo B.

Tabela 15 – Propriedades físicas para problema heterogêneo B

Propriedade física	$\sigma_t \text{ cm}^{-1}$	$\sigma_{S0} \text{ cm}^{-1}$	$\nu\sigma_f \text{ cm}^{-1}$
I	0,2500	0,0500	0,2200
II	0,2500	0,0100	0,2500
III	0,3691	0,3371	0,0000

Tabela 16 – Classificação das células espaciais da grade interna para o problema heterogêneo B

Tipo	Comprimento
Grossa	> 4
Média	≈ 4
Fina	< 4

A distribuição de fluxo neutrônico para este problema é mostrada na Figura 52 e apresenta um valor máximo na região central do reator, ou seja no canto sudeste do domínio. Ao afastarmos deste ponto o fluxo diminui alcançando o valor mínimo no refletor onde temos uma forte influência da fugas e não temos produção de nêutrons por ser um meio não-multiplicativo.

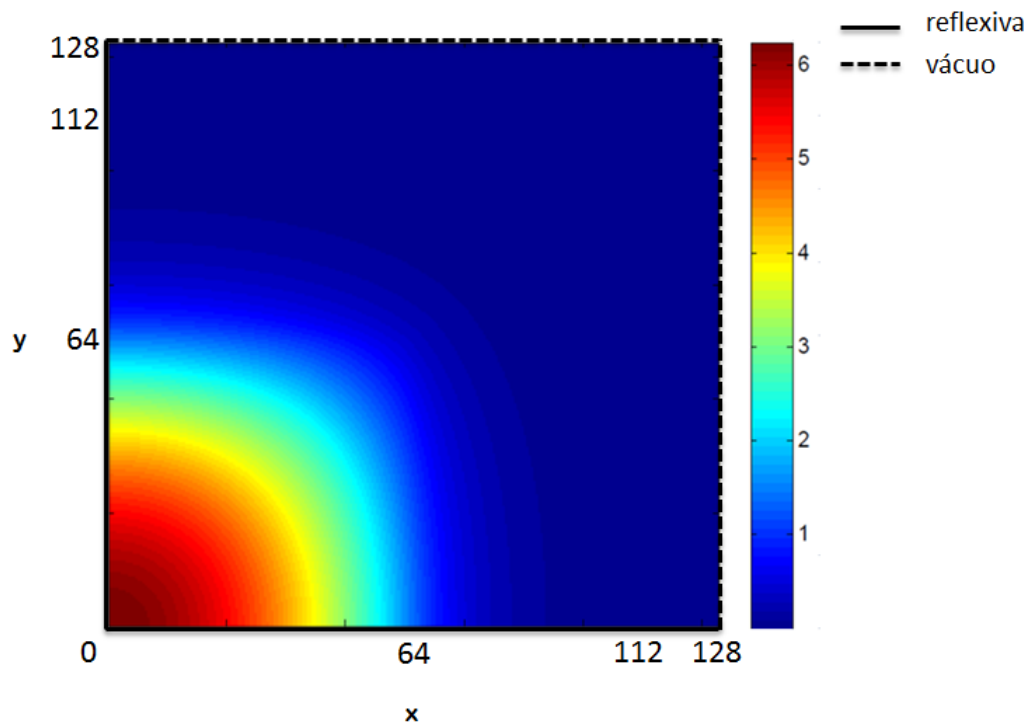


Figura 52 – Distribuição bidimensional do fluxo escalar de nêutrons no domínio do problema heterogêneo B.

Os resultados numéricos gerados pelo método CSG-SD-CN para diversas grades espaciais aparecem nas Tabelas 17 e 18. Especificamente, na Tabela 17 mostramos os valores obtidos para o coeficiente efetivo de multiplicação e o número de iterações até a convergência do problema. Na Tabela 18 oferecemos os valores de densidade de potência na região central do domínio. Os valores de referência para o coeficiente efetivo de multiplicação e a distribuição de potência foram gerados pelo método DD com uma malha fina de 256×256 células espaciais quadradas de $0,5 \text{ cm}$ de lado.

Tabela 17 – Resultados do k_{eff} para o problema heterogêneo B com diversas grades

Malha (Tipo)	Método	k_{eff}	Desvio Relativo (%)	Iterações
1x16x16 (Grossa)	CSG-SD-CN	1,094086E+00	5,569390E-02	13006
16x16 (Grossa)	SD-SGF-CN	1,084865E+00	7,875794E-01	14050
16x16 (Grossa)	DD	1,093453E+00	2,194834E-03	13248
1x32x32 (Média)	CSG-SD-CN	1,094133E+00	5,999212E-02	13999
32x32 (Média)	SD-SGF-CN	1,084852E+00	7,887683E-01	15897
32x32 (Média)	DD	1,093471E+00	5,487084E-04	13786
1x64x64 (Fina)	CSG-SD-CN	1,094145E+00	6,108953E-02	14385
64x64 (Fina)	SD-SGF-CN	1,084849E+00	7,890427E-01	17134
64x64 (Fina)	DD	1,093476E+00	9,145140E-05	13987
1x128x128 (Fina)	CSG-SD-CN	1,094148E+00	6,136389E-02	14495
128x128 (Fina)	SD-SGF-CN	-	-	-
128x128 (Fina)	DD	1,093477E+00	0,000000E+00	14491
256x256 (Fina)	DD (Referência)	1,093477E+00	-	-

Ao analisarmos a Tabela 17 podemos constatar que o método CSG-SD-CN gera bons resultados para o coeficiente efetivo de multiplicação com desvios relativos que variam entre $5,569390E-02$ e $6,136389E-02$. Os desvios relativos obtidos pelos três métodos foram plotados na Figura 53. Podemos observar, que os desvios relativos permanecem praticamente constantes no método multigrade, evidenciando pouca sensibilidade dos resultados as dimensões da grade interna. Os resultados obtidos pelo método SD-SGF-CN para este problema encontram-se afastados dos valores de referência, nesse sentido, sugerimos uma revisão desses valores para a versão final da dissertação. Para todas as grades propostas o método DD gera resultados mais precisos que o método multigrade, isto ocorre porque o DD gera resultados muito precisos em médios com razão de espalhamento próximas de zero. Neste sentido, novos problemas heterogêneos com domínios de maior complexidade devem ser avaliados.

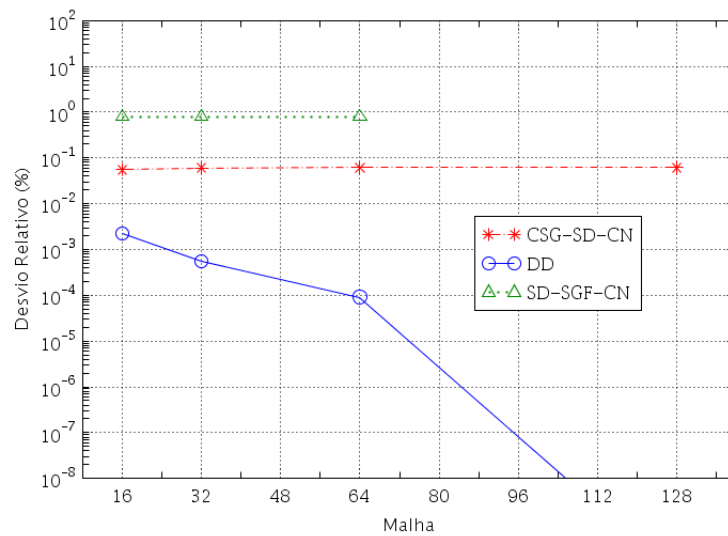


Figura 53 – Desvio relativo do coeficiente efetivo de multiplicação k_{eff} para o problema heterogêneo B com múltiplas malhas.

Tabela 18 – Resultados da densidade de potência na região (a) para o problema heterogêneo B com diversas grades

Malha (Tipo)	Método	DP (a)	Desvio Relativo (%)
1x16x16 (Grossa)	CSG-SD-CN	9,045658E+01	1,086582E+00
16x16 (Grossa)	DD	8,941867E+01	7,329781E-02
1x32x32 (Média)	CSG-SD-CN	9,053489E+01	1,174095E+00
32x32 (Média)	DD	8,946755E+01	1,867368E-02
1x64x64 (Fina)	CSG-SD-CN	9,055469E+01	1,196222E+00
64x64 (Fina)	DD	8,948068E+01	4,000704E-03
1x128x128 (Fina)	CSG-SD-CN	9,055920E+01	1,201262E+00
128x128 (Fina)	DD	8,948355E+01	7,934356E-04
256x256 (Fina)	DD (Referência)	8,948426E+01	-

Na Figura 54 mostramos os desvios relativos no cálculo da densidade de potência na região central do reator para os métodos CSG-SD-CN e DD. De acordo com a Tabela 18 e a Figura 54 podemos afirmar que os valores gerados pelo método multigrade para a densidade de potência são satisfatórios com desvios na ordem de 1%. Novamente os valores gerados pelo método de grades compostas mostram-se independentes das dimensões da grade espacial interna.

Ao comprarmos os desvios gerados para o k_{eff} e a densidade de potência, no método CSG-SD-CN observamos que os desvios para o coeficiente de multiplicação efetivo (aproximadamente $1E - 02$) são inferiores aos gerados para a densidade de potência (aproximadamente $1E + 00$), mostrando a característica dos métodos de grades compostas de gerar resultados mais precisos para grandezas integrais. Por outro lado, os desvios gerados pelo DD são muito semelhantes para as duas grandezas.

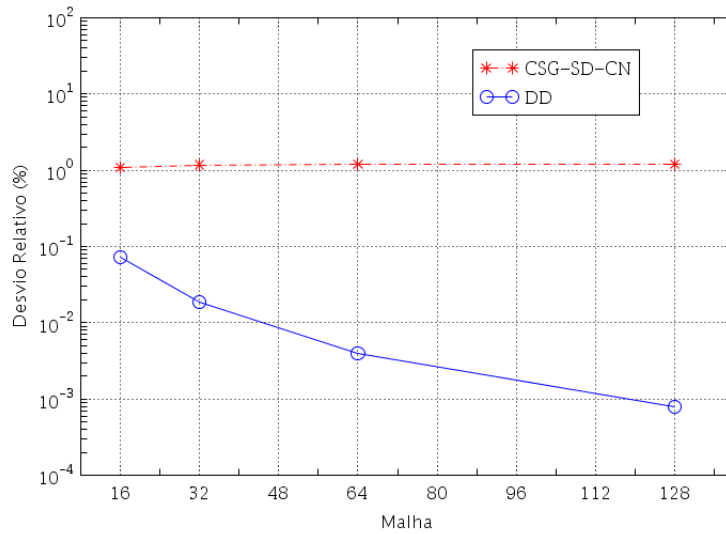


Figura 54 – Desvio relativo da densidade de potência na região (a) para o problema heterogêneo B com múltiplas malhas.

Apresentamos na Figura 55 o numero de operações de ponto flutuante consumidas pelos métodos CSG-SD-CN, SD-SGF-CN e DD na resolução do problema heterogêneo B para as malhas propostas. Observamos que em todas as malhas consideradas o numero de operações do método de grades compostas é muito menor que nos métodos SD-SGF-CN e DD. Adicionalmente, se considerarmos o numero de iterações apresentado na Tabela 17 observamos que o número de iterações dos métodos CSG-SD-CN são semelhantes, ambos os dois apresentam menos iterações que o método SD-SGF-CN. Então, podemos afirmar que o método CSG-SD-CN apresentou um melhor desempenho computacional na resolução do problema heterogêneo B.

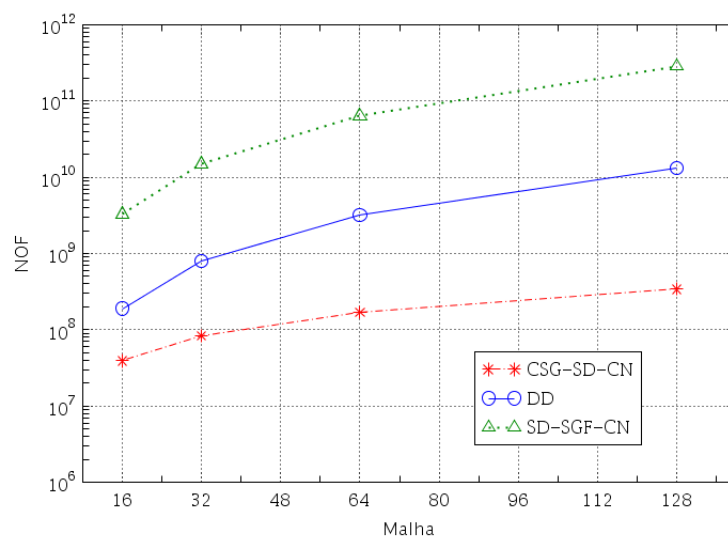


Figura 55 – Número de operações aritméticas de ponto flutuante para o problema heterogêneo B com múltiplas malhas.

6 Conclusões e Trabalhos Futuros

No presente trabalho apresentamos uma nova formulação espectro-nodal de grades múltiplas para resolver problemas de autovalor usando como modelagem matemática a formulação de ordenadas discretas em aproximação de um grupo de energia com fonte de espalhamento isotrópica e geometria X, Y . Chamamos o novo método numérico de CSG-SD-CN (método espectro-nodal de grades compostas com aproximação constante), para ele foi desenvolvida a formulação matemática e as equações iterativas de varreduras foram obtidas. Propomos também, um algoritmo computacional que resolve as equações de varredura utilizando um esquema iterativo de direções alternadas e uma varredura de iteração da fonte melhorada, que utiliza as estimativas mais recentes do fluxo incidente no cálculo dos fluxos emergentes. No esquema numérico proposto a solução numérica do problema bidimensional é obtida resolvendo de forma independente dois problemas unidimensionais acoplados pelos termos de fuga espacial em nível de região. A principal contribuição deste trabalho é utilizar um método de grades compostas em cálculos de criticalidade utilizando um modelo de transporte, especificamente a formulação de ordenadas discretas. O método CSG-SD-CN, ao utilizar uma estratégia de discretização de grades compostas que permite transformar o problema bidimensional em dois problemas unidimensionais, apresenta menor custo algébrico e um algoritmo computacional mais simples que os métodos espectro nodais convencionais que resolvem o mesmo problema.

Foram realizados experimentos numéricos baseados na resolução de problemas típicos em domínios homogêneos e heterogêneos, considerando diferentes malhas de discretização, mediante a análise dos resultados obtidos podemos concluir:

- O método CSG-SD-CN oferece resultados numéricos precisos para o coeficiente de multiplicação efetivo e a distribuição de potencia na região para problemas homogêneos e heterogêneos, pelo que o método pode ser utilizado no cálculo de grandezas integrais em problemas de criticalidade.
- Considerando um balanço entre precisão e custo computacional (tempo de processamento e operações de ponto flutuante), os melhores resultados foram obtidos para malhas grossas de uma célula por região, e malhas finas com dimensões da ordem do livre caminho médio do nêutron na região, isto é malhas intermediárias.
- Ao avaliarmos a precisão dos resultados com relação ao refinamento das dimensões das malhas, constatamos, que os resultados apresentaram uma dependência muito fraca em relação as dimensões da malha fina, e fraca em relação as dimensões da malha grossa, pelo que podemos afirmar que os erros de truncamento têm

pouca influência na precisão dos resultados. Este comportamento já tinha sido observado em problemas de fonte fixa ao utilizarmos o método CSG-SGF-CN.

- Os experimentos numéricos evidenciaram o aparecimento de instabilidades numéricas em problemas com regiões muito espalhadoras de pequenas dimensões, isto é, regiões onde a fuga transversal é significativa e não pode ser aproximada corretamente por um valor constante. A instabilidade numérica está relacionada ao cálculo dos valores espectrais onde operações com tendência a propagar os erros de arredondamento são necessárias.
- Em relação ao desempenho computacional podemos afirmar que o número de iterações aumenta suavemente com o refinamento da malha. Quando comparamos o método proposto com o método convencional SD-SGF-CN, podemos afirmar que o método de grades múltiplas obtém precisão semelhante com um menor número de operações de ponto flutuante.

Os desdobramentos futuros das pesquisas em métodos de grades compostas orientam-se em duas frentes: a primeira deve aperfeiçoar a validação do método CSG-SD-CN, e a segunda utilizar a abordagem de grades compostas em modelos de maior complexidade.

A validação exaustiva do método CSG-SD-CN deve identificar as causas das instabilidades numéricas e sugerir mudanças no esquema numérico que permita evitá-las. A segunda, deve utilizar a abordagem de grades compostas em aproximação multigrupo e/ou problemas tridimensionais.

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) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Rio de Janeiro-RJ, 1996.
- ABREU, M. P. de; FILHO, H. A.; BARROS, R. C. de. A numerical method for multigroup slab-geometry eigenvalue problems in transport theory with no spatial truncation error. **Transport Theory and Statistical Physics**, Taylor & Francis Group, v. 25, n. 1, p. 61–83, aug 1996.
- ADAMS, M. L.; LARSEN, E. W. Fast iterative methods for discrete-ordinates particle transport calculations. **Progress in Nuclear Energy**, v. 1, n. 40, p. 3–159, 2002.
- AGUIAR, A. S. O. **Método Exponencial de Grades Múltiplas para Problemas de Fonte Fixa na Formulação de Ordenadas Discretas a um Grupo de Energia em Geometria Cartesiana Bidimensional**. Dissertação (Dissertação de Mestrado) — Mestrado em Modelagem Computacional, Universidade Estadual de Santa Cruz, 2014.
- AZMY, Y. Comparison of three approximations to the linear-linear nodal transport method in weighted diamond-difference form. **Nuclear Science and Engineering**, v. 100, p. 190–200, 1988.
- AZMY, Y.; SARTORI, E. **Nuclear Computational Science - A Century in Review**. New York: Springer, 2010. 426 p. ISBN 9789048134106.
- BADRUZZAMAN, A. Nodal methods in transport theory. In: **Advances in Nuclear Science and Technology**, vol. 21. New York: Plenum Press, 1990. p. 293–331.
- BARROS, R. C.; FILHO, H. A.; Valero Orellana, E. T.; SILVA, F. C. da; COUTO, N. do; DOMINGUEZ, D. S.; HERNÁNDEZ, C. R. The application of spectral nodal methods to discrete ordinates and diffusion problems in Cartesian geometry for neutron multiplying systems. **Progress in Nuclear Energy**, v. 42, n. 4, p. 385–426, jan 2003. ISSN 01491970.
- BARROS, R. C.; GARCIA, C. R.; DOMINGUEZ, D. S.; GARCIA, O. D.; TAME, V. M. Recent Advances in Spectral Nodal Methods for Numerically Solving Neutron - Diffusion Eigenvalue Problems. **Transport Theory and Statistical Physics**, v. 33, n. 3-4, p. 331–346, 2004.
- BARROS, R. C.; LARSEN, E. A Numerical Method for Multigroup Slab-Geometry Discrete Ordinates Problems with No Spatial Truncation Error. **Transport Theory and Statistical Physics**, v. 20, p. 441–462, 1991.
- BARROS, R. C.; LARSEN, E. A spectral nodal method for one-group x,y-geometry discrete ordinates problems. **Nuclear Science and Engineering**, v. 111, p. 34–45, 1992.
- BARROS, R. C.; SILVA, F. C. da; FILHO, H. A. Recent Advances in Spectral Nodal Methods for X, Y-Geometry Discrete Ordinates Deep Penetration and Eigenvalue Problems. **Progress in Nuclear Energy**, v. 35, n. 3, p. 293–331, 1999.

- BELL, G. I.; GLASSTONE, S. **Nuclear Reactor Theory**. New York: Van Nostrand Reinhold Co., 1970. 637 p.
- BOLTZMANN, L. Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen. **Sitzungsberichte der Akademie der Wissenschaften zu Wien**, v. 66, p. 275–370, 1872.
- BURDEN, R. L.; FAIRES, J. D. **Numerical Analysis**. [S.l.]: Cengage Learning, 2010. v. 1.
- CARLSON, B. G.; LATHROP, K. D. Transport theory — the method of discrete ordinates. In: GREENSPAN, H.; KELBER, C. N.; D., O. (Ed.). **Computing Methods in Reactor Physics**. New York: Gordon & Breach, 1968. cap. 3.
- CASE, K.; ZWEIFEL, P. **Linear transport theory**. [S.l.]: Addison-Wesley Pub. Co., 1967.
- CHANDRASEKHAR, S. **Radiative Transfer**. New York, USA: Dover Publications, 1960.
- COURTOT, M. Study of some numerical schemes for solving the three-dimensional transport equation. **Advances in Mathematical Methods for the Solution of Nuclear Engineering Problems**, p. 115–129, 1981.
- DOMINGUEZ, 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, dec 2007. ISSN 03064549.
- DOMINGUEZ, D. S.; OLIVEIRA, F. B. S.; ALVES, H.; BARROS, R. C. Composite spatial grid spectral nodal method for one-speed discrete ordinates deep penetration problems in X , Y geometry. **Progress in Nuclear Energy**, v. 52, p. 298–303, 2010.
- DUDERSTADT, J. J. **Nuclear Reactor Analysis**. 1st. ed. New York: Jhon Wiley & Sons, 1976.
- Empresa de Pesquisa Energética - EPE. **Plano Nacional De Energia 2030**. [s.n.], 2007. 408 p. ISBN 978-85-60025-02-2. Disponível em: <http://www.epe.gov.br/PNE/20080111{_}1.>
- FILHO, H. A. **Um Método Espectro-Nodal para Problemas de Autovalor na Teoria de Transporte de Nêutrons segundo a formulação de Ordenadas Discretas**. Tese (Doutorado) — Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Rio de Janeiro-RJ, 1999.
- FILHO, H. A.; BARROS, R. C. de; SILVA, F. C. da. A coarse-mesh numerical method for one-speed neutron transport eigenvalue problems in two-dimensional cartesian geometry. **Applied Numerical Mathematics**, v. 40, p. 167–177, 2002.
- FURLAN, C.; GUIDOLIN, M.; GUSEO, R. Has the Fukushima accident influenced short-term consumption in the evolution of nuclear energy? An analysis of the world and seven leading countries. **Technological Forecasting and Social Change**, v. 107, p. 37–49, 2016. ISSN 00401625.
- GIF-OCDE. **Technology Roadmap Update for Generation IV Nuclear Energy Systems Preparing Today for Tomorrow's Energy Needs**. Paris, France: e Generation IV International Forum, Organization for Organisation for Economic Co-operation and Development, 2014. 66 p.

HAGHIGHAT, A. **Monte Carlo Methods for Particle Transport**. Boca Raton, FL: CRC Press, 2014. 272 p. ISBN 9781466592537.

HOFFMAN, J. D.; FRANKEL, S. **Numerical Methods for Engineers and Scientists, Second Edition**, New York: Marcel Dekker, Inc., 2001. ISBN 0824704436.

LARSEN, E. W. Spectral analysis of numerical methods for discrete-ordinates problems. I. **Transport Theory and Statistical Physics**, Taylor & Francis Group, v. 15, n. 1-2, p. 93–116, feb 1986. ISSN 0041-1450.

LAWRENCE, R. D. Progress in Nodal Methods for the Solution of the Neutron Diffusion and Transport Equations. **Progress in Nuclear Energy**, v. 17, n. 3, p. 271–301, 1986.

LAWRENCE, R. D.; DORNING, J. A discrete nodal integral transport theory method for multidimensional reactor physics and shielding calculations. In: **ANS topical conference. Advances in reactor physics and shielding**. Sun Valley, Idaho: ANS, 1980. p. 840.

LEWIS, E. E. **Fundamentals of nuclear reactor physics**. New York: Elsevier, 2008.

LEWIS, E. E.; MILLER, W. F. **Computational Methods of Neutron Transport**. 1. ed. New York: Jhon Wiley & Sons, 1984. 401 p.

MELLO, J. A. M. de; BARROS, R. C. An exponential spectral nodal method for one-speed X,Y-geometry deep penetration discrete ordinates problems. **Annals of Nuclear Energy**, v. 29, n. 15, p. 1855–1869, oct 2002. ISSN 03064549.

MING, Z.; YINGXIN, L.; SHAOJIE, O.; HUI, S.; CHUNXUE, L. Nuclear energy in the Post-Fukushima Era: Research on the developments of the Chinese and worldwide nuclear power industries. **Renewable and Sustainable Energy Reviews**, v. 58, p. 147–156, 2016. ISSN 13640321.

NASCIMENTO, H. M. **Método Espectro-Nodal de Grades Compostas para Problemas de Atualização de Difusão em Geometria X,Y**. Dissertação (Mestrado) — Universidade Estadual de Santa Cruz, 2012.

NEA-OCDE. **Global Energy Outlook 2014**. Paris, France: International Energy Agency, Organization for Organisation for Economic Co-operation and Development, 2014. 595 p.

OSBORN, R. K.; YIP, S. **The Foundations of Neutron Transport Theory**. New York: Gordon & Breach, 1966. 135 p.

REED, W. H. e. a. A two-dimensional, multigroup, triangular mesh, planar geometry, explicit transport code. **TRIPLET**, 1973.

WALTERS, W.; O'DELL, R. Nodal methods for discrete-ordinates transport problems in (x-y) geometry. In: **ANS topical conference. Advances in mathematical methods for the solution of nuclear engineering problems**. Munich: ANS, 1980. p. 115.

WALTERS, W. F. The relation between finite element methods and nodal methods in transport theory. **Progress in Nuclear Energy**, v. 18, n. 12, p. 21–25, 1986.

ZANI, J. H. **Esquemas Iterativos para solução numérica nodal de problemas de transporte de nêutrons monoenergéticos na formulação Sn em geometria bidimensional Cartesiana**. Tese (Doutorado) — Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Rio de Janeiro-RJ, 2001.

ZIENKIEWICZ, O. C.; TAYLOR, R. L.; ZHU, J. **The Finite Element Method: Its Basis and Fundamentals**. 7. ed. New York: Elsevier Ltd, 2013. ISBN 1856176339.

Apêndices

APÊNDICE A – Cálculo de autovalores pela relação de dispersão

Considere a relação de dispersão utilizada no cálculo do autovalor ϑ dependente de μ

$$\frac{\left(C_0 + \frac{B}{k_{eff}}\right) \vartheta}{4} \sum_{m=1}^M \frac{\omega_m}{\mu_m + \vartheta} = 1, \quad \vartheta \neq -\mu_m. \quad (186)$$

Em quadraturas angulares convencionais para cálculos S_N bidimensionais, existem exatamente N valores distintos de μ_m (e analogamente, N valores distintos de η_m). Portanto, a relação da dispersão (186), obtida para o caso de espalhamento isotrópico, pode ser reformulada em uma equação polinomial de grau N , que apresenta N raízes.

- Quadratura S_2 :

Para este caso, temos $M = 4$; $\mu_1 = \mu_4$, $\mu_2 = \mu_3$ e $\mu_2 = -\mu_1$; e $\omega_1 = \omega_2 = \omega_3 = \omega_4 = 1$.

Multiplicamos a relação de dispersão (186) por $\prod_{m=1}^M (\mu_m + \vartheta)$, $M = 4$ e obtemos um polinômio característico de grau $N = 2$, cujas raízes representam os autovalores ϑ_k , $k = 1 : N$, que aparece como

$$\vartheta^2 - \frac{\mu_1^2}{1 - (C_0 + \frac{B}{k_{eff}})} = 0. \quad (187)$$

A depender dos valores das seções de choque macroscópicas e do coeficiente efetivo de multiplicação podemos obter autovalores ϑ reais e/ou imaginários puro, i. e., $\vartheta = \pm i\gamma$, onde $i = \sqrt{-1}$. Dessa forma, as raízes do polinômio (187) podem admitir duas alternativas:

- Se $(C_0 + \frac{B}{k_{eff}}) \leq 1$, temos

$$\vartheta_{1,2} = \pm \frac{\mu_1}{\sqrt{1 - (C_0 + \frac{B}{k_{eff}})}}; \quad (188)$$

- Se $(C_0 + \frac{B}{k_{eff}}) > 1$, temos

$$\gamma_{1,2} = \pm \frac{\mu_1}{\sqrt{(C_0 + \frac{B}{k_{eff}}) - 1}}. \quad (189)$$

O processo para obtenção dos autovalores ϑ dependentes de η é similar ao anterior, resultando em duas alternativas também:

- Se $(C_0 + \frac{B}{k_{eff}}) \leq 1$, temos

$$\vartheta_{1,2} = \pm \frac{\eta_1}{\sqrt{1 - (C_0 + \frac{B}{k_{eff}})}}; \quad (190)$$

- Se $(C_0 + \frac{B}{k_{eff}}) > 1$, temos

$$\gamma_{1,2} = \pm \frac{\eta_1}{\sqrt{(C_0 + \frac{B}{k_{eff}}) - 1}}. \quad (191)$$

Obtidos os N autovalores através da relação de dispersão, podemos calcular os autovetores correspondentes através da equação (133).

APÊNDICE B – Complemento do espectro das equações

$$S_N$$

Os $M - N$ autovalores e autovetores restantes são obtidos através da equação

$$(\mu_m + \vartheta) a_m(\vartheta) = 0, \quad (192)$$

onde consideramos a seguinte condição de normalização

$$\sum_{n=1}^M a_n(\vartheta) \omega_n = 0. \quad (193)$$

A equação (192) nos leva a duas alternativas

- i. Se $\vartheta = -\mu_m$, então $a_m(\vartheta) \neq 0$;
- ii. Se $\vartheta \neq -\mu_m$, então $a_m(\vartheta) = 0$.

Desde que atendam a exigência da condição de normalização (136), as alternativas (i) e (ii) nos permitem construir os $(M - N)$ autovetores e autovalores restantes.

- Quadratura S_2 :

A quantidade de direções angulares para quadratura S_2 é $M = 4$, conforme mostra a Figura . Os autovalores ϑ_1 e ϑ_2 são obtidos pela relação de dispersão (135) e seus respectivos autovetores são calculados pela Eq. (133). Os autovalores ϑ_3 e ϑ_4 e seus respectivos autovetores são obtidos da seguinte forma

Consideramos, primeiramente, a alternativa (i) em Eq. (192) e obtemos

$$\begin{cases} \vartheta_3 = -\mu_1 \\ \underline{a}(\vartheta_3) = \{1, 0, 0, -1\} \end{cases} \quad \begin{array}{l} \text{logo, } a_1(\vartheta)\omega_1 + a_4(\vartheta)\omega_4 = 0, \quad a_2(\vartheta)\omega_2 = a_3(\vartheta)\omega_3 = 0; \\ \text{autovetor correspondente.} \end{array}$$

Consideramos, agora, a alternativa (ii) em Eq. (192) e obtemos

$$\begin{cases} \vartheta_4 = \mu_1 \\ \underline{a}(\vartheta_4) = \{0, 1, -1, 0\} \end{cases} \quad \begin{array}{l} \text{logo, } a_2(\vartheta)\omega_2 + a_3(\vartheta)\omega_3 = 0, \quad a_1(\vartheta)\omega_1 = a_4(\vartheta)\omega_4 = 0; \\ \text{autovetor correspondente.} \end{array}$$

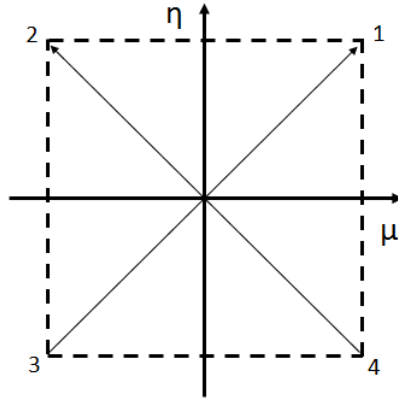


Figura 56 – Representação das direções angulares para a quadratura S_2 .

Os autovalores ϑ_3 e ϑ_4 , dependentes de η , e seus respectivos autovetores são obtidos de forma análoga, onde obtemos como resultado

Considerando a alternativa **(i)** em Eq. (192) e substituindo μ por η , obtemos

$$\begin{cases} \vartheta_3 = -\eta_1 & \text{logo, } a_1(\vartheta)\omega_1 + a_2(\vartheta)\omega_2 = 0, \quad a_3(\vartheta)\omega_3 = a_4(\vartheta)\omega_4 = 0; \\ \underline{a}(\vartheta_3) = \{1, -1, 0, 0\} & \text{autovetor correspondente.} \end{cases}$$

Consideramos, agora, a alternativa **(ii)** em Eq. (192) e substituindo μ por η , obtemos

$$\begin{cases} \vartheta_4 = \eta_1 & \text{logo, } a_3(\vartheta)\omega_3 + a_4(\vartheta)\omega_4 = 0, \quad a_1(\vartheta)\omega_1 = a_2(\vartheta)\omega_2 = 0; \\ \underline{a}(\vartheta_4) = \{0, 0, 1, -1\} & \text{autovetor correspondente.} \end{cases}$$

APÊNDICE C – Cálculo da densidade de potência

A densidade de potência no interior de um reator nuclear de fissão pode ser determinada pelo somatório do produto entre a energia produzida por cada evento de fissão nuclear e a densidade da taxa de reação de fissão. A expressão para o cálculo da densidade de potência no interior do reator aparece como

$$P = \sum_k \epsilon_k \int_A \nu \Sigma_{f_k} \phi_A dA \quad (194)$$

onde, ϵ_k é a energia liberada por cada evento de fissão k , ν é o número médio de nêutrons emitidos por cada evento de fissão k , Σ_{f_k} é a seção de choque macroscópica de fissão k e ϕ_A é o fluxo escalar de nêutrons na área A .

A equação (194) pode ser discretizada para o cálculo nodal, onde consideramos um nodo arbitrário $\Gamma_{i,j}$ cujas propriedades físicas permanecem constantes no interior deste nodo arbitrário. A densidade de potência no interior de um nodo arbitrário $\Gamma_{i,j}$ pode ser obtida por

$$P_{i,j} = \epsilon \nu \Sigma_f h_{i,j}^x h_{i,j}^y \bar{\phi}_{i,j} \quad (195)$$

onde, $h_{i,j}^x$ e $h_{i,j}^y$ são as dimensões do nodo arbitrário $\Gamma_{i,j}$ e $\bar{\phi}_{i,j}$ é o fluxo escalar médio neste mesmo nodo arbitrário, representado por

$$\bar{\phi}_{i,j} = \frac{1}{h_{i,j}^x h_{i,j}^y} \int \int_A \phi(x, y) dx dy \quad (196)$$

A densidade de potência para uma dada região arbitrária r do domínio com propriedades físicas constantes, composta por $I_r \times J_r$ nodos espaciais pode ser obtida pela seguinte equação

$$P_r = \epsilon \nu \Sigma_f \sum_i^{I_r} \sum_j^{J_r} h_{i,j}^x h_{i,j}^y \bar{\phi}_{i,j} \quad (197)$$

A densidade de potência estendida para todo o núcleo do reator nuclear de fissão pode ser calculado como

$$P_{Reator} = \sum_r^R P_r = \epsilon \sum_r^R \nu \Sigma_{fr} \sum_i^{I_r} \sum_j^{J_r} h_{i,j}^x h_{i,j}^y \bar{\phi}_{i,j} \quad (198)$$

onde R é a quantidade de regiões existentes no domínio de cálculo.

A energia liberada por evento de fissão ϵ para quantificar a densidade de potência produzida em um nodo, região ou núcleo do reator tem o seguinte valor e unidade de medida

$$\epsilon \approx 200 MeV = 2 \cdot 10^8 \cdot 1,6 \cdot 10^{-19} J = 3,2 \cdot 10^{-11} J.$$

Uma vez que, a unidade de medida da seção de choque macroscópica de fissão é cm^{-1} , a unidade de medida do fluxo escalar de nêutrons médio é $n/cm^2 \cdot s$, e a unidade de medida das dimensões do nodo espacial é cm^2 , temos que a unidade de medida da densidade de potência gerada no interior do reator é J/s o que equivale a *Watts*.

O *Fator de Potência* ou *Fator de Normalização*, que corresponde à razão entre a Potência Nominal ($P_{Nominal}$) do reator e a Potência Gerada (P_{Nucleo}) pela reações de fissão na área do núcleo, aparece como

$$FP = \frac{P_{Nominal}}{P_{Nucleo}}.$$

APÊNDICE D – Cálculo do livre caminho médio do nêutron

As seções de choque microscópica transversais σ podem ser utilizadas para caracterizar a probabilidade de ocorrência de algum tipo de reação nêutron-núcleo para um determinado núcleo, esta probabilidade está associada à interação com um único núcleo (considera as características do núcleo) (DUDERSTADT, 1976). As seções de choque transversais macroscópicas de interação Σ caracterizam a interação nêutron-núcleo em um meio material de determinada densidade, i. e., é a probabilidade de interação com uma região macroscópica da matéria (considera a densidade do meio + o núcleo). A seção de choque macroscópica é definida como o produto entre a seção de choque microscópica do isótopo para que uma determinada reação ocorra com nêutrons de certa energia e a densidade volumétrica do número de isótopos que está presente no meio hospedeiro.

$$\Sigma [cm^{-1}] = \sigma [cm^2] N \left[\frac{\#}{cm^3} \right].$$

A seção de choque macroscópica está relacionada com a probabilidade de um nêutron migrar num meio hospedeiro com uma determinada população de isótopos e sofrer um determinado tipo de reação. Quanto maior for a seção de choque macroscópica do meio hospedeiro, menor será a distância percorrida pelo nêutron até que a interação nêutron-núcleo ocorra.

A seção transversal macroscópica total Σ_t que caracteriza a probabilidade de algum tipo de reação nêutron-nuclear ocorrer, engloba, além de outras seções transversais macroscópicas, as probabilidades de absorção Σ_a , de fissão Σ_f e de espalhamento Σ_s .

A probabilidade $p(x)dx$ de que um nêutron incidente em $x = 0$, sofra sua primeira colisão entre x e $x + dx$ pode ser representada como

$$p(x)dx = \Sigma_t e^{-\Sigma_t x} dx.$$

Portanto, a distância média que um nêutron migra livremente antes de interagir com um núcleo na amostra, é definido como

$$\bar{x} = \int_0^{\infty} x p(x) dx = \int_0^{\infty} x \Sigma_t e^{-\Sigma_t x} dx \quad (199)$$

Resolvendo a integral, usando a fórmula de integração por partes: $\int u dv = uv - \int v du$, temos

$$\begin{aligned}
 & \Sigma_t \int_0^\infty x e^{-\Sigma_t x} dx \\
 & u = x, dv = e^{-\Sigma_t x} dx \\
 & du = dx, v = -\frac{1}{\Sigma_t} e^{-\Sigma_t x} dx \\
 & = \Sigma_t \left\{ -\frac{x}{\Sigma_t} e^{-\Sigma_t x} \Big|_0^\infty + \frac{1}{\Sigma_t} \int_0^\infty e^{-\Sigma_t x} dx \right\} \\
 & = -x e^{-\Sigma_t x} \Big|_0^\infty + \int_0^\infty e^{-\Sigma_t x} dx \\
 & = -\frac{1}{\Sigma_t} e^{-\Sigma_t x} \Big|_0^\infty \\
 & = -\frac{1}{\Sigma_t} [0 - 1] \\
 & = \frac{1}{\Sigma_t} \tag{200}
 \end{aligned}$$

Como a unidade de medida da seção transversal total é cm^{-1} , tem-se que o inverso desta seção transversal, resulta em uma medida de comprimento, a qual representa fisicamente a distância média percorrida pelo nêutron entre as interações (Mean Free Path - (M.F.P)) ([DUDERSTADT, 1976](#)). Portanto, $\bar{x} = \frac{1}{\Sigma_t} = \lambda$ é o livre caminho médio do nêutron: distância média antes de sofrer uma colisão (unidades cm).