



Implementação computacional de metodologia analítica de solução da equação de transporte de nêutrons em geometria planar utilizando o método P_N

Silva^a A. S., Alves Filho^a H., Barros^a R. C.

^aUniversidade do Estado do Rio de Janeiro/Instituto Politécnico, Caixa Postal 97282,
28610-974, Nova Friburgo, RJ, Brasil
e-mail: alanssilva6@gmail.com

RESUMO

É apresentada neste artigo uma metodologia analítica de solução da equação de transporte de nêutrons em geometria unidimensional utilizando o método P_N . A primeira parte da metodologia proposta neste trabalho consiste em obter uma solução analítica geral local para o sistema de equações P_N para um grau N ímpar arbitrário e grau de anisotropia de espalhamento $L \leq N$. Na segunda parte, a solução local analítica obtida para as equações P_N é utilizada como aproximante sintético nos termos integrais da fonte por espalhamento em uma versão simplificada da equação linear de transporte de Boltzmann: estacionária, unidimensional, monoenergética, azimutalmente simétrica, em meios materiais não-multiplicativos e com fonte interior isotrópica. A metodologia proposta foi implementada em um aplicativo computacional desenvolvido na plataforma MatLab[®] para Windows. Além de gerar resultados numéricos para o fluxo escalar de nêutrons segundo o método P_N , o aplicativo computacional gera resultados numéricos para os fluxos angulares de nêutrons em qualquer posição do domínio e para qualquer direção não perpendicular ao domínio. Para avaliar a aplicabilidade do método P_N e da proposta de solução analítica da equação de transporte, são apresentados resultados numéricos para um problema-modelo característico.

Palavras-chave: Transporte de nêutrons, Método P_N , Equação linear de Boltzmann.

ABSTRACT

Described in this paper is an analytic methodology for the solution of the neutron transport equation in slab-geometry using P_N method. The first part of the present methodology consists of obtaining a local general solution for the P_N equations with arbitrary order N and degree $L \leq N$ of scattering anisotropy. In the second part, the local general solution for the P_N equations was replaced in the scattering source of a simplified version of the linear Boltzmann transport equation, i. e., stationary, slab-geometry, monoenergetic, azimuthally symmetric, for non-multiplying media and isotropic internal source. This methodology has been implemented in a computer code developed on the MatLab[®] platform for Windows. As a result, in addition to generating numerical results for the scalar flux through the P_N method, the computer code generates numerical results for the angular flux at any position in the domain and for any direction not perpendicular to the domain. To evaluate the applicability of the P_N method and the analytic methodology, as described in this paper, numerical results for a model problem are presented.

Keywords: neutron transport, P_N method, Boltzmann linear equation.

1. INTRODUÇÃO

A essência da teoria de transporte de nêutrons fundamenta-se no estudo do balanço entre produção e remoção de partículas que migram em um dado meio material. Este fenômeno é modelado matematicamente pela equação linear de transporte de Boltzmann [1] e possui importantes aplicações, e.g., em proteção radiológica; física de reatores nucleares; na indústria em ensaios não destrutivos; na medicina com as terapias por captura neutrônica pelo boro etc.

A aplicação do método P_N , também conhecido na literatura como método dos harmônicos esféricos, foi introduzida por R. E. Marshak [2] e J. C. Mark [3] no transporte de nêutrons. É um método muito conhecido e descrito com detalhes em [4]. Alguns autores, [5], [6], [7], [8] e [9], desenvolveram e utilizaram metodologias para solução analítica das equações P_N . Tal solução permite implementar a aqui chamada reconstrução angular, também conhecida na literatura científica como técnica de integração da função fonte, proposta inicialmente por [10] e consiste essencialmente em utilizar aproximações no termo integral da fonte por espalhamento na equação de transporte, com o objetivo de simplificar a obtenção de uma solução para esta equação. No presente trabalho, e também nas referências [5], [6], [7], [8] e [9], essa aproximação é feita utilizando uma solução analítica das equações P_N , em uma versão simplificada da equação de transporte.

Apesar de já conhecida, a solução analítica para as equações P_N [4] foi determinada segundo um algoritmo simplificado proposto em [11], para graus ímpares N e graus de anisotropia de espalhamento $L \leq N$ arbitrários. Neste trabalho, a utilização desta solução no termo integral da fonte por espalhamento da equação de transporte, possibilitou a implementação de uma expressão analítica mais simples para o fluxo angular de nêutrons.

A seguir é apresentado um pequeno resumo do conteúdo do trabalho. Na seção 2 é descrita a metodologia de solução das equações P_N no interior de uma região do domínio unidimensional e a reconstrução angular analítica utilizando o método P_N . Na seção 3, são apresentados os resultados numéricos gerados por este aplicativo para um problema-modelo característico. Por fim, inclui-se na seção 4 um breve resumo do que foi realizado, observações a respeito dos resultados obtidos e das possibilidades para trabalhos futuros.

2. O MÉTODO P_N E A RECONSTRUÇÃO ANGULAR

Nesta seção são descritos os modelos matemáticos que são utilizados neste trabalho para representar o fenômeno de migração de nêutrons em meios materiais não multiplicativos. A próxima subseção apresenta o sistema de equações P_N e a solução geral local obtida para um grau N ímpar arbitrário. A subseção 2.2 apresenta a equação linear de transporte de Boltzmann que foi utilizada e descreve a metodologia analítica de solução desta equação utilizando a solução das equações P_N como aproximante sintético nos termos de fonte por espalhamento.

2.1 Método P_N

No método P_N , adotado neste trabalho para a modelagem do fenômeno físico de transporte de nêutrons, considera-se que todas as seções de choque macroscópicas do meio hospedeiro são conhecidas, que o regime é estacionário, o meio hospedeiro é unidimensional e os nêutrons são monoenergéticos, i. e., os nêutrons não variam sua energia cinética ao colidirem com os núcleos dos átomos constituintes do meio material. Efetivamente esta é uma boa aproximação quando os meios hospedeiros espalhadores não multiplicativos são constituídos de átomos pesados. Este fenômeno pode ser modelado matematicamente pelas equações P_N [4] que podem ser escritas como

$$\begin{aligned} (\ell + 1)\phi'_{\ell+1}(x) + \ell\phi'_{\ell-1}(x) + (2\ell + 1)\sigma_{\ell}(x)\phi_{\ell}(x) &= Q(x)\delta_{\ell,0}, \ell = 0:N, \\ \sigma_{\ell}(x) &\equiv \sigma_T(x) - \sigma_{s\ell}(x), 0 \leq x \leq X, 0 \leq \ell \leq N, \end{aligned} \quad (1)$$

onde $\phi_{\ell}(x)$, $\ell = 0:N$, são as variáveis dependentes definidas como momentos angulares de ordem ℓ [4], i. e.,

$$\phi_{\ell}(x) = \int_{-1}^{+1} P_{\ell}(\mu')\psi(x, \mu') d\mu', \ell = 0:N. \quad (2)$$

Na Equação (1), $\sigma_T(x)$ é a seção de choque macroscópica total na posição x ; $\sigma_{s\ell}(x)$ é a ℓ -ésima componente da seção de choque macroscópica de espalhamento diferencial na posição x ; $Q(x)$ é

uma fonte interior isotrópica na posição x ; $\delta_{\ell,0}$ é o delta de Kronecker, i. e., é igual a unidade se $\ell = 0$ e a zero se $\ell \neq 0$; N é o grau da aproximação P_N [4]; X é o comprimento do domínio unidimensional; e $\phi'(x)$ é uma notação simplificada para a derivada ordinária de primeira ordem em relação a x , i. e., $\phi'(x) = \frac{d\phi(x)}{dx}$. Em (2), μ é o cosseno do ângulo θ , que é definido como o ângulo polar; $P_\ell(\mu')$ é o polinômio de Legendre de grau ℓ ; e $\psi(x, \mu')$ é definido como fluxo angular de nêutrons, que migram entre x e $x + dx$ na direção entre μ' e $\mu' + d\mu'$. É importante ressaltar que $\phi_0(x)$ é definido como o fluxo escalar de nêutrons e $\phi_1(x)$ é a corrente total de nêutrons. Os demais momentos angulares não possuem nomenclaturas especiais [4].

Considere neste ponto, por exemplo, um domínio unidimensional heterogêneo com N_R regiões que podem ser constituídas do mesmo material ou de materiais distintos, assim como mostrado na Figura 1.

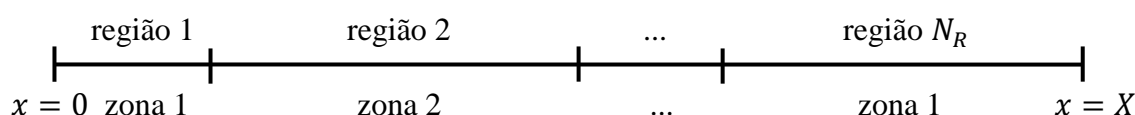


Figura 1: Exemplo de domínio heterogêneo [11].

O número de zonas materiais em um domínio unidimensional é sempre menor ou igual ao número de regiões N_R . A região 1 e a região N_R (Figura 1), neste exemplo, são constituídas do mesmo material e, portanto, constituem uma única zona material. Os parâmetros materiais σ_ℓ , $\ell = 0:N$, e a fonte interior Q são uniformes no interior de cada região constituinte do domínio. Assim, o sistema de equações representado em (1) aparece como

$$\begin{aligned}
 (\ell + 1)\phi'_{\ell+1}(x) + \ell\phi'_{\ell-1}(x) + (2\ell + 1)\sigma_\ell\phi_\ell(x) &= Q\delta_{\ell,0}, \quad \ell = 0:N, \\
 \sigma_\ell &\equiv \sigma_T - \sigma_{s\ell}, \quad x \in [0, h_r], \quad r = 1:N_R.
 \end{aligned}
 \tag{3}$$

Como pode ser observado no sistema de equações apresentado em (3), a posição x pertence ao intervalo $[0, h_r]$, onde h_r representa a espessura da região r . Esta restrição é imposta, pois aqui foi adotada uma técnica, denominada estratégia do zero flutuante [12], que foi utilizada para evitar o

crescimento da abscissa no domínio até o valor X . Esta foi a solução escolhida para remediar algumas possíveis ocorrências de interrupções na execução computacional por *overflow*. Porém, existem outras técnicas mais eficientes para resolver o problema de *overflow*, descritas em [5], [6], [7], [8] e [9]. Mediante a técnica do zero flutuante, a fronteira esquerda da região r é associada à posição $x = 0$ e a fronteira direita é associada à posição $x = h_r$. Em outras palavras, toda interface imediatamente à esquerda de qualquer região é associada à posição $x = 0$.

A equação (3) constitui um sistema de $N + 1$ equações diferenciais ordinárias lineares de primeira ordem com coeficientes constantes cuja solução geral é composta pela soma de uma componente homogênea com uma componente particular [11]. É importante ressaltar que, neste trabalho, o grau N assume valores naturais ímpares e, para construir o sistema (3), é considerado

$$\phi'_{N+1}(x) = 0, \quad (4)$$

que é a aproximação P_N [4]. Ademais, independentemente do grau N escolhido, admite-se que, por ser uniforme e isotrópica, a fonte Q gera uma componente particular uniforme somente para a solução geral local do momento angular de ordem zero $\phi_0(x)$; i. e., para o fluxo escalar de nêutrons. Esta componente particular pode ser escrita na forma

$$\phi_0^p = \frac{Q}{\sigma_a}, \quad \sigma_a = \sigma_0 \equiv \sigma_T - \sigma_{s0}, \quad (5)$$

onde σ_a é definido como a seção de choque macroscópica de absorção. Para se obter a componente homogênea da solução geral local para $\phi_0(x)$, e também as soluções locais para os demais momentos angulares, faz-se necessário resolver o seguinte sistema homogêneo:

$$\begin{aligned} (\ell + 1)\phi'_{\ell+1}(x) + \ell\phi'_{\ell-1}(x) + (2\ell + 1)\sigma_\ell\phi_\ell(x) &= 0, \quad \ell = 0:N, \\ \sigma_\ell &\equiv \sigma_T - \sigma_{s\ell}, \quad x \in [0, h_r], \quad r = 1:N_R. \end{aligned} \quad (6)$$

Para $N = 1$, considerando a Equação (4) e explicitando as derivadas, o sistema (6) pode ser escrito na forma matricial como

$$\begin{pmatrix} \phi'_0 \\ \phi'_1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & -\frac{(2\ell_1 + 1)}{\ell_1} \sigma_1 \\ -\frac{(2\ell_0 + 1)}{\ell_0 + 1} \sigma_0 & 0 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \phi_0 \\ \phi_1 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Assim, como pode ser observado, os valores para o parâmetro ℓ não foram convenientemente substituídos; ao invés disso, seu valor ficou indicado no índice de ℓ , i. e., $\ell_0 = 0, \ell_1 = 1, \dots, \ell_k = k$. De maneira análoga, o sistema é construído em forma matricial para $N = 3$ e $N = 5$. Assim, foi observado um padrão na matriz de coeficientes associada ao sistema homogêneo das equações diferenciais P_N , dado em (6). Por meio deste padrão, a matriz de coeficientes do sistema homogêneo, definida como \mathbf{A} , pode ser construída computacionalmente para um grau arbitrário ímpar N , segundo um algoritmo descrito em [11].

De forma generalizada, o sistema (6) pode ser colocado em forma matricial como

$$\boldsymbol{\phi}' = \mathbf{A}\boldsymbol{\phi}, \quad (8)$$

onde $\boldsymbol{\phi}'$ representa o vetor coluna com as $N + 1$ derivadas e $\boldsymbol{\phi}$ é o vetor coluna com os $N + 1$ momentos angulares. O sistema homogêneo local (8) é resolvido realizando a decomposição espectral da matriz \mathbf{A} [13]. A solução geral para o sistema local (3), i. e., soma da solução do sistema homogêneo (8) com a componente particular dada em (5), pode ser escrita da seguinte forma:

$$\phi_\ell(x) = \sum_{k=0}^N C_k a_\ell(v_k) e^{v_k x} + \frac{Q}{\sigma_a} \delta_{\ell,0}, \ell = 0:N, x \in [0, h_r], r = 1:N_R, \quad (9)$$

onde $v_k, k = 0:N$, são os $N + 1$ autovalores da matriz \mathbf{A} , $a_\ell(v_k), \ell = 0:N$, é o ℓ -ésimo componente do autovetor da matriz \mathbf{A} associado ao autovalor v_k e $C_k, k = 0:N$, são as $N + 1$ constantes por região. Para determinar as $N + 1$ constantes por região é necessário estabelecer condições de contorno e de interfaces que possibilitem a construção de um sistema com $(N + 1)N_R$ equações algébricas e lineares em $(N + 1)N_R$ incógnitas, que são as constantes que precisam ser

calculadas. Neste trabalho são adotadas apenas condições de contorno do tipo prescritas. Para aproximar condições de contorno de incidência prescrita no método P_N são consideradas as condições de contorno tipo Mark e Marshak [4].

Para utilização das condições de contorno do tipo Mark, inicialmente são obtidas as raízes do polinômio de Legendre de grau $N + 1$, que aparecem aos pares positivas e negativas e apresentam o seguinte formato: $(N + 1)/2$ raízes positivas iguais aos módulos das outras $(N + 1)/2$ raízes negativas. Na extremidade esquerda do domínio, i. e., em $x = 0$, é utilizado o seguinte conjunto de equações [11]:

$$\sum_{k=0}^N \sum_{\ell=0}^N \frac{2\ell + 1}{2} P_{\ell}(\mu_n) a_{\ell}(v_k) C_k = I_E - \frac{Q}{2\sigma_a}, \quad \mu_n > 0, \quad n = 1: \frac{N + 1}{2}, \quad (10)$$

onde I_E é o fluxo prescrito isotrópico incidente no contorno esquerdo e μ_n é a n -ésima raiz positiva. Para a extremidade direita do domínio, i. e., em $x = h_{NR}$, o conjunto de equações utilizado é dado por [11]

$$\sum_{k=0}^N \sum_{\ell=0}^N \frac{2\ell + 1}{2} P_{\ell}(\mu_n) a_{\ell}(v_k) e^{v_k h_{NR}} C_k = I_D - \frac{Q}{2\sigma_a}, \quad \mu_n < 0, \quad n = 1: \frac{N + 1}{2}, \quad (11)$$

onde I_D é o fluxo prescrito isotrópico incidente no contorno direito e, neste caso, μ_n é a n -ésima raiz negativa. Desta forma, é obtido um total de $N + 1$ equações de contorno: $(N + 1)/2$ no contorno esquerdo e $(N + 1)/2$ no contorno direito. Neste ponto é importante ressaltar que, devido à estratégia do zero flutuante, a abscissa x na Equação (11) foi substituída pela espessura da última região h_{NR} ao invés de se substituir pelo comprimento total do domínio dado por X .

No caso da condição de contorno do tipo Marshak, o conjunto de equações para o contorno esquerdo pode ser escrito como [11]

$$\sum_{k=0}^N \sum_{\ell=0}^N \frac{2\ell + 1}{2} a_{\ell}(v_k) \left(\int_0^1 P_n(\mu) P_{\ell}(\mu) d\mu \right) C_k = \left(I_E - \frac{Q}{2\sigma_a} \right) \int_0^1 P_n(\mu) d\mu, \quad n = 1, 3, 5, \dots, N. \quad (12)$$

Para o contorno direito o conjunto de equações aparece como

$$\sum_{k=0}^N \sum_{\ell=0}^N \frac{2\ell+1}{2} a_{\ell}(v_k) e^{v_k h_{NR}} \left(\int_{-1}^0 P_n(\mu) P_{\ell}(\mu) d\mu \right) C_k = \left(I_D - \frac{Q}{2\sigma_a} \right) \int_{-1}^0 P_n(\mu) d\mu, \quad (13)$$

$$n = 1, 3, 5, \dots, N.$$

Assim, é construído um total de $N + 1$ equações de contorno considerando $(N + 1)/2$ no contorno esquerdo e $(N + 1)/2$ no contorno direito. As condições de Mark e Marshak são formas de aproximar às condições de contorno prescritas.

Para um domínio heterogêneo, i. e., constituído por mais de uma região, é necessário completar o sistema com mais $(N + 1)(N_R - 1)$ equações, que são obtidas a partir da continuidade de todos os momentos angulares nas $N_R - 1$ interfaces do domínio unidimensional, i. e.,

$$\phi_{\ell}^r(h_r) = \phi_{\ell}^{r+1}(0), \quad r = 1: (N_R - 1), \quad \ell = 0: N. \quad (14)$$

A solução geral local (9) é substituída na Equação (14) e então são obtidas $(N + 1)(N_R - 1)$ equações. Assim como nas equações de contorno, a estratégia do zero flutuante também é adotada nas equações de continuidade, conforme Equação (14).

Portanto, por meio da metodologia descrita anteriormente, é construído um sistema com $(N + 1)N_R$ equações algébricas e lineares em $(N + 1)N_R$ incógnitas. Uma vez determinadas estas constantes, os momentos angulares podem ser calculados em qualquer posição do domínio utilizando a Equação (9).

2.2 . Equação linear de transporte de Boltzmann e a reconstrução angular

Neste trabalho, na realização da modelagem matemática, é adotada uma versão simplificada da equação linear de transporte de Boltzmann [14], considerando as seguintes hipóteses simplificadoras: modelo estacionário, monoenergético, azimutalmente simétrico, unidimensional e

em meio material não multiplicativo. Admitindo estas hipóteses simplificadoras, a equação linear de transporte de Boltzmann no interior de uma região r de um domínio unidimensional aparece como

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, \mu) + \sigma_T \psi(x, \mu) = \sum_{\ell=0}^L \frac{2\ell+1}{2} \sigma_{s\ell} P_\ell(\mu) \int_{-1}^{+1} P_\ell(\mu') \psi(x, \mu') d\mu' + \frac{Q}{2}, \quad (15)$$

$$x \in [0, h_r], r = 1:N_R, -1 \leq \mu \leq 1, \mu \neq 0.$$

Aqui L é o grau de anisotropia de espalhamento θ e o fluxo angular de nêutrons $\psi(x, \mu)$ é a variável dependente. Os termos integrais na fonte por espalhamento da Equação (15) são as definições dos momentos angulares, de acordo com a Equação (2). Para se implementar a metodologia analítica de solução da Equação (15) é utilizada a solução geral local das equações P_N , dada na Equação (9). Logo, substituindo (9) em (15) obtém-se

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, \mu) + \sigma_T \psi(x, \mu) = \sum_{\ell=0}^L \frac{2\ell+1}{2} \sigma_{s\ell} P_\ell(\mu) \left[\sum_{k=0}^N C_k a_\ell(v_k) e^{v_k x} + \frac{Q}{\sigma_a} \delta_{\ell,0} \right] + \frac{Q}{2}, \quad (16)$$

$$x \in [0, h_r], r = 1:N_R, -1 \leq \mu \leq 1, \mu \neq 0, L \leq N.$$

Aplicando a técnica do fator integrante [11] na Equação (16) e integrando o resultado de zero a x , para valores positivos de μ , obtém-se a seguinte expressão analítica para o fluxo angular de partículas neutras que migram da esquerda para a direita no interior de uma região r do domínio:

$$\psi(x, \mu) = \psi(0, \mu) e^{-\frac{\sigma_T}{\mu} x} + \sum_{k=0}^N \frac{\sum_{\ell=0}^L \frac{2\ell+1}{2\mu} \sigma_{s\ell} P_\ell(\mu) a_\ell(v_k) C_k}{v_k + \frac{\sigma_T}{\mu}} \left(e^{v_k x} - e^{-\frac{\sigma_T}{\mu} x} \right) \quad (17)$$

$$+ \frac{Q}{2\sigma_a} \left(1 - e^{-\frac{\sigma_T}{\mu} x} \right),$$

$$x \in [0, h_r], r = 1:N_R, \mu > 0, L \leq N.$$

Aqui $\psi(0, \mu)$ é o fluxo angular de nêutrons com direção μ , incidente na fronteira à esquerda da região r , para $r = 2:N_R$. Quando $r = 1$, tem-se $\psi(0, \mu) = I_E$, pois na primeira região, a posição

$x = 0$ coincide com o contorno esquerdo do domínio. A partir do fluxo prescrito isotrópico I_E incidente no contorno esquerdo, determinam-se utilizando (17), os fluxos emergentes das regiões à esquerda que são, por continuidade, os fluxos incidentes nas regiões contíguas à direita. A técnica do fator integrante foi aplicada na Equação (16), de forma semelhante, para o caso em que $\mu < 0$; porém os limites de integração, inferior e superior, foram substituídos por x e h_r , respectivamente. O resultado dessa integração é o fluxo angular de partículas que migram da direita para a esquerda

$$\psi(x, \mu) = \psi(h_r, \mu) e^{\frac{\sigma_T}{\mu}(h_r-x)} - \sum_{k=0}^N \frac{\sum_{\ell=0}^L \frac{2\ell+1}{2\mu} \sigma_{s\ell} P_\ell(\mu) a_\ell(v_k) C_k}{v_k + \frac{\sigma_T}{\mu}} \left[e^{v_k h_r} e^{\frac{\sigma_T}{\mu}(h_r-x)} - e^{v_k x} \right] \quad (18)$$

$$+ \frac{Q}{2\sigma_a} \left[e^{\frac{\sigma_T}{\mu}(h_r-x)} - 1 \right], \quad x \in [0, h_r], r = 1: N_R, \mu < 0, L \leq N.$$

Neste caso, $\psi(h_r, \mu)$ representa o fluxo angular de nêutrons que migram na direção μ , incidentes na fronteira à direita da região r , com r variando de forma decrescente entre $(N_R - 1)$ e 1. Para $r = N_R$, tem-se $\psi(h_{N_R}, \mu) = I_D$, pois na última região a posição $x = h_{N_R}$ coincide com o contorno direito do domínio. A partir do fluxo prescrito isotrópico I_D incidente no contorno direito, determinam-se, utilizando (18), os fluxos emergentes das regiões à direita que são, por continuidade, os fluxos incidentes nas regiões contíguas à esquerda. É importante enfatizar neste ponto, que as Equações (17) e (18) podem ser utilizadas para o cálculo do fluxo angular $\psi(x, \mu)$ em qualquer posição x do domínio e para qualquer direção μ pertencente ao intervalo $[-1, 0) \cup (0, +1]$. Neste trabalho, estas equações são utilizadas para determinar $\psi(x, \mu)$ somente em problemas com condições de contorno do tipo prescrita.

Um aplicativo computacional foi desenvolvido na plataforma MatLab[®] para Windows [11] para gerar resultados para o fluxo escalar de nêutrons, segundo a metodologia P_N descrita na subseção 2.1, e para fluxo angular de nêutrons, segundo a metodologia descrita nesta subseção. Além do método P_N e da reconstrução angular proposta neste trabalho, o aplicativo oferece também os métodos: S_N analítico (AS_N) para L arbitrário, que é uma extensão do método descrito em [15] e que é também uma das contribuições deste trabalho; e o tradicional método numérico de malha fina *Diamond Difference*, (DD) [1] que também foram implementados com o objetivo de gerar

resultados de referência. Os métodos AS_N e DD são metodologias de solução da equação de transporte, segundo o convencional método das ordenadas discretas (S_N), que usa neste aplicativo a quadratura angular de Gauss-Legendre. O grau da quadratura de Gauss-Legendre deve ser um número par arbitrário escolhido pelo usuário. Os dados de entrada de um problema são inseridos pelo usuário por meio de uma janela de interface e, a partir destes dados, o aplicativo oferece ao usuário recursos como resultado em um ponto do domínio, tabelas e gráficos.

3. RESULTADOS NUMÉRICOS E DISCUSSÃO

Nesta seção é apresentado um problema-modelo com grau de anisotropia de espalhamento $L = 10$, adaptado de [16], para ilustrar a precisão do método P_N , descrito na subseção 2.1, e da metodologia analítica de solução da equação de transporte, descrita na subseção 2.2. As configurações do sistema onde o código computacional foi executado, podem ser listadas como: processador intel CORE i3 1,80 GHz, 2GB de memória RAM e sistema operacional Windows 8.1 - 64 bits.

Considere um domínio unidimensional heterogêneo com cinco regiões de comprimentos $h_j = j + 1, j = 1:5$, conforme a Figura 2. Cada região é constituída de uma zona material diferente e os parâmetros são determinados, em cm^{-1} , segundo as equações

$$\sigma_T^j = 0,1 \left(\frac{j+20}{21} \right)^5, j = 1:5 \quad \text{e} \quad \sigma_{s\ell}^j = 0,69^\ell \left(\frac{j+20}{2100} \right), j = 1:5, \ell = 0:10. \quad (19)$$

Foram inseridas fontes interiores de nêutrons apenas nas regiões 2 e 4, $Q_2 = 2 \text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$ e $Q_4 = 4 \text{ cm}^{-3}\text{s}^{-1}$, além de uma incidência de nêutrons unitária e isotrópica prescrita em $x = 0$ e condição de contorno do tipo vácuo em $x = 20 \text{ cm}$.

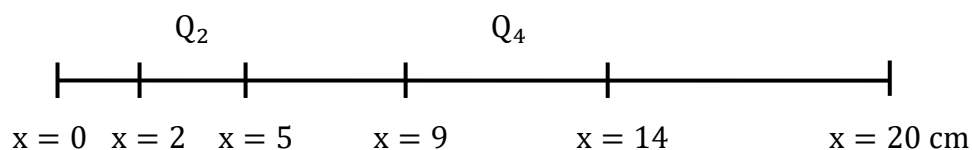


Figura 2: Domínio unidimensional heterogêneo com cinco regiões [11].

A Tabela 1 apresenta os resultados numéricos gerados para os fluxos escalares ($\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$) em duas posições do domínio utilizando o método P_N para $N = 63$ e $N = 127$. As condições de contorno do tipo prescrita do problema foram aproximadas utilizando a condição do tipo Mark e também a condição do tipo Marshak. Estes resultados foram comparados com aqueles obtidos por meio dos métodos AS_N e DD nas formulações S_{64} e S_{128} de Gauss-Legendre.

Tabela 1: Fluxos escalares no problema-modelo ($\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$).

x (cm)	DD (18) ^a	DD (200)	AS_N	Mark	Marshak
	S_{64}	S_{64}	S_{64}	P_{63}	P_{63}
	2 s ^b	4 s	840 s	2 s	181 s
10	1,420119E1 ^c	1,374662E1	1,374481E1	1,374481E1	1,374481E1
				(0) ^d	(0)
20	7,414615E-1	7,121013E-1	7,122591E-1	7,122591E-1	7,122877E-1
				(0)	(4,0E-3)
	S_{128}	S_{128}	S_{128}	P_{127}	P_{127}
	9 s	11 s	55 m	10 s	16 m
10	1,413980E1	1,374692E1	1,374503E1	1,374503E1	1,374503E1
				(0)	(0)
20	7,905667E-1	7,120991E-1	7,122569E-1	7,122569E-1	7,122711E-1
				(0)	(2,0E-3)

Legenda: (a) – Nodalização; (b) – Tempo médio de execução; (c) – Lê-se $1,420119 \times 10^1$; (d) – Desvio relativo percentual em relação ao resultado gerado pelo método AS_N .

Ao analisar a segunda e a terceira colunas da Tabela 1, da esquerda para a direita, nota-se que o refinamento da malha de discretização espacial aumentou a precisão dos resultados gerados pelo método DD em relação aos resultados listados na quarta coluna, gerados pelo método AS_N . Este fato é esperado, pois o DD é um clássico método numérico de malha fina [1], enquanto que o método AS_N [15] é um método numérico analítico que gera resultados livres de erros de truncamento espacial, apresentando apenas os erros de arredondamento da aritmética computacional finita. A

equivalência observada na Tabela 1 entre o método P_N , com condições de contorno do tipo Mark, e os métodos S_N com quadraturas de Gauss-Legendre de ordem $N + 1$ ocorre por conta da utilização das $N + 1$ direções discretas nas equações de contorno do tipo Mark. Desta forma foi verificada a equivalência existente entre os métodos S_N e P_{N-1} com condições de contorno do tipo Mark [4]. Em relação à metodologia P_N com condições de contorno do tipo Marshak, os desvios relativos percentuais em relação ao AS_N não foram nulos. No caso da condição de contorno do tipo Marshak são realizadas integrações nas equações de contorno, logo os resultados deixam de ser equivalentes aos do método AS_N . Em relação aos tempos médios de execução, pode-se observar que a condição de contorno do tipo Marshak gerou resultados com tempos médios de execução bem superiores aos do Mark devido ao custo computacional na determinação das integrais nas Equações (12) e (13). Neste trabalho, estas integrais foram obtidas utilizando funções disponíveis do MatLab[®] para cálculo analítico da integração do produto de polinômios de Legendre de graus arbitrários.

Para verificar a precisão da metodologia analítica de solução da equação de transporte proposta neste trabalho na subseção 2.2, foram gerados resultados numéricos para os fluxos angulares de nêutrons nas direções definidas pelas ordenadas discretas do método S_N . Dada uma ordem de quadratura, foi escolhida uma das direções como entrada no aplicativo para gerar o fluxo angular correspondente. Na Tabela 2 estão listados os resultados obtidos para os fluxos angulares em direções associadas aos métodos de ordenadas discretas S_{64} e S_{128} , respectivamente, em duas diferentes posições do domínio.

Tabela 2: Fluxos angulares para o problema-modelo ($cm^{-2}s^{-1}$).

x (cm)	DD (18) ^a	DD (200)	AS_N	Reconstrução Angular	
				Mark	Marshak
S_{64} e $\mu = -0,6489654712$				P_{63}	P_{63}
5	3,314574	3,317563	3,317592	3,317592 (0) ^b	3,317592 (0)
10	7,460111	7,432293	7,432018	7,432018 (0)	7,432018 (0)
S_{128} e $\mu = 0,3471177286$				P_{127}	P_{127}

5	5,741659	5,713278	5,712995	5,712995 (0)	5,712995 (0)
10	5,219650	5,157773	5,157159	5,157159 (0)	5,157159 (0)

Legenda: (a) – Nodalização; (b) – Desvio relativo percentual em relação ao resultado gerado pelo método AS_N .

A equivalência entre o método P_N , com condições de contorno do tipo Mark, e os métodos S_N , com quadratura de Gauss-Legendre de ordem $N + 1$, também pode ser observada ao analisar a Tabela 2. É importante ressaltar que os fluxos angulares foram calculados em direções associadas às ordenadas discretas tão somente para verificar a precisão dos resultados em relação aos métodos AS_N e DD. Diferentemente do método clássico de ordenadas discretas, que reproduz os fluxos angulares apenas em direções discretas, a técnica de reconstrução angular apresentada neste trabalho pode ser utilizada para calcular o fluxo angular em qualquer direção $\mu \in [-1,1]$, com exceção da direção $\mu = 0$, correspondente ao ângulo polar de 90° .

Neste ponto é realizado um experimento numérico de reconstruir fluxos angulares de quadraturas mais altas a partir de métodos P_N de ordens mais baixas. Como exemplos, observando a Tabela 2, os fluxos angulares nas direções de S_{64} e S_{128} foram reconstruídos a partir das aproximações P_{31} Mark e Marshak. Os resultados estão listados na Tabela 3 e, para este experimento numérico, conclui-se que os fluxos angulares nas direções de S_{64} e S_{128} reconstruídos utilizando o método P_{31} apresentaram boa precisão em relação aos fluxos angulares gerados pelo método AS_N .

Tabela 3: Reconstrução angular utilizando o método P_{31} ($cm^{-2}s^{-1}$).

x (cm)	DD (200) ^a	AS_N	Reconstrução Angular	
			Mark	Marshak
S_{64} e $\mu = -0,6489654712$				
5	3,317563	3,317592	3,317669 (2,3E-3) ^b	3,317669 (2,3E-3) ^c
10	7,432293	7,432018	7,432023 (6,7E-5)	7,432023 (6,7E-5)
S_{128} e $\mu = 0,3471177286$				

5	5,713278	5,712995	5,712655 (5,9E-3)	5,712645 (6,1E-3)
10	5,157773	5,157159	5,157178 (3,7E-4)	5,157177 (3,5E-4)

Legenda: (a) – Nodalização; (b) – Lê-se $2,3 \times 10^{-3}$; (c) – Desvio relativo percentual em relação ao resultado gerado pelo método AS_N .

4. CONCLUSÕES E SUGESTÕES PARA TRABALHOS FUTUROS

A equação linear de transporte de Boltzmann, apresentada na subseção 2.2 deste trabalho, é utilizada para modelar matematicamente o fenômeno de migração de nêutrons em um dado meio material hospedeiro. Mesmo considerando um modelo de transporte estacionário, unidimensional, azimutalmente simétrico, monoenergético e com fonte interior isotrópica e de valor conhecido, esta equação apresenta um alto grau de complexidade. Para que seja obtida uma solução aproximada para esta equação utilizou-se a solução geral local das equações P_N , apresentada na seção 2.1, com uma aproximação nos termos de fonte por espalhamento da equação de transporte. A metodologia de solução proposta, denominada reconstrução angular, gera resultados aproximados para os fluxos angulares em pontos e direções arbitrárias do domínio, desde que $\mu \neq 0$. A seção 3 apresenta resultados numéricos para um problema-modelo. As precisões dos resultados numéricos gerados pelo método P_N e pela reconstrução angular foram avaliadas comparando-se estes resultados com aqueles obtidos por meio dos métodos AS_N e DD .

Como podem ser observados na Tabela 1, os intervalos de tempo aproximados de execução do código P_N , com condições de contorno do tipo Mark, foram bem inferiores quando comparados com os tempos de execução dos outros métodos. Ademais, a técnica de reconstrução angular descrita neste trabalho pode também ser utilizada para reconstruir os fluxos angulares nas direções dos métodos S_N de mais altas ordens utilizando métodos P_N de mais baixa ordem. Como pode ser visto na Tabela 3, para o problema-modelo proposto, a reconstrução de fluxos angulares nas direções de S_{64} e S_{128} , utilizando o método P_{31} , gerou resultados com baixos desvios relativos percentuais em relação aos fluxos angulares gerados pelo método AS_N . Como sugestões para trabalhos futuros, propõem-se implementação de uma metodologia para as condições de contorno do tipo Marshak, que seja mais eficiente, como descrita na referência [5] e extensão da metodologia

proposta para a formulação multigrupo de energia. A implementação mais eficiente da metodologia para as condições de contorno Marshak é claramente necessária, conforme se observa na Tabela 1, pois o tempo de execução computacional para esse tipo de condições de contorno resultou em várias ordens de grandeza superior ao tempo de execução com as condições de contorno Mark, e é essencial que isto seja remediado. Ademais, pode-se utilizar a metodologia analítica de solução das equações P_N , descrita neste trabalho, para generalizar a técnica de aceleração baseada na estimativa inicial dos momentos angulares no convencional esquema iterativo de fonte de espalhamento [12].

AGRADECIMENTOS

Agradecemos ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq) e à Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ) pelo suporte financeiro para a realização deste trabalho. Agradeço ao LABTRAN por permitir o acesso à plataforma MatLab®.

REFERÊNCIAS

- [1] LEWIS, E. E., MILLER, W. F., Jr. **Computational Methods of Neutron Transport**. Illinois: American Nuclear Society, 1993.
- [2] MARSHAK, R. E. Note on the Spherical Harmonics Method as Applied to the Milne Problem for a Sphere, **Phys. Rev.**, vol. 71, pp. 443–446, 1947.
- [3] MARK, J. C. The Spherical Harmonic Method, II. (Application to Problems with Plane & Spherical Symmetry), **Technical Report MT-97**, National Research Council, Montreal Laboratory, 1945.
- [4] DAVISON, B. **Neutron Transport Theory**. London: Oxford University Press, 1957.
- [5] BENASSI, M., COTTA, R. M., SIEWERT, C. E. The P_N method for radiative transfer problems with reflective boundary conditions, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 30, pp. 547-553, 1983.

- [6] BENASSI, M., GARCIA, R. D. M., KARP, A. H., SIEWERT, C. E. A high-order spherical harmonics solution to the standard problem in radiative transfer, **Astrophysical Journal**, vol. 280, pp. 853-864, 1984.
- [7] BARICHELLO, L. B., GARCIA, R. D. M., SIEWERT, C. E. A spherical-harmonics solution for radiative-transfer problems with reflecting boundaries and internal sources, **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 60, pp. 247- 260, 1998.
- [8] KARP, A. H. Recent advances in the spherical harmonics method, **International Journal of Engineering Science**, vol. 36, pp. 1551-1568, 1998.
- [9] DIAS, A. F., GARCIA, R. D. M. Coupled scalar and vector P_N methods for solving multigroup transport problems in multislabs geometry, **Annals of Nuclear Energy**, vol. 27, pp. 1607-1626, 2000.
- [10] Kourganoff, V. **Basic Methods in Transfer Problems**. New York: Dove Publications, 1952.
- [11] SILVA, A. S. **Métodos sintéticos analíticos de solução da equação de transporte de nêutrons com aproximações da teoria P_N** . 61 f. Dissertação (Mestrado em Modelagem Computacional) - Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2019.
- [12] GUIDA, M. R. **Aceleração de esquemas iterativos para cálculos de transporte de partículas neutras na formulação unidimensional de ordenadas discretas com base em estimativas iniciais geradas por aproximações sintéticas P_N** . 77f. Tese (Doutorado em Modelagem Computacional) – Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2016.
- [13] STRANG, G. **Differential Equations and Linear Algebra**. Wellesley : Wellesley-Cambridge Press, 2014.
- [14] DUDERSTADT, J. J., MARTIN, W. R. **Transport Theory**. New York, USA: Wiley-Interscience, 1979.
- [15] MORAES, F. J. H. **Um modelo analítico unidimensional para transporte de nêutrons monoenergéticos com espalhamento linearmente anisotrópico na formulação de ordenadas discretas**. 39 f. Monografia (Graduação em Engenharia Mecânica) - Instituto Politécnico, Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Nova Friburgo, 2014.

- [16] GARCIA, R. D. M., SIEWERT, C. E. Multislab multigroup transport theory with L'th order anisotropic scattering. **Journal of Computational Physics**, v. 50, p. 181-192, 1983.