

37:095885



AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE
DE SÃO PAULO

**MODELOS APROXIMADOS PARA O CÁLCULO DO
TRANSPORTE DE PARTÍCULAS NEUTRAS
EM DUTOS**

SHIZUCA ONO

Tese apresentada como parte dos
requisitos para obtenção do Grau de
Doutor em Ciências na Área de Reatores
Nucleares de Potência e Tecnologia do
Combustível Nuclear.

Orientador:
Dr. Roberto David Martinez Garcia

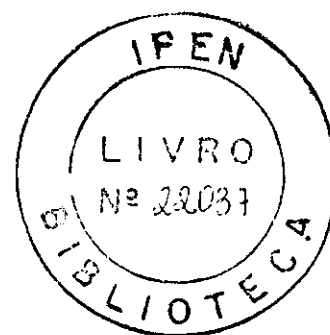
**São Paulo
2000**

INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES

Autarquia associada à Universidade de São Paulo

MODELOS APROXIMADOS PARA O CÁLCULO DO TRANSPORTE
DE PARTÍCULAS NEUTRAS EM DUTOS

SHIZUCA ONO



Tese apresentada como parte dos requisitos para obtenção do grau de Doutor em Ciências na Área de Reatores Nucleares de Potência e Tecnologia do Combustível Nuclear.

Orientador:

Dr. Roberto David Martinez Garcia

SÃO PAULO

2000

Especialmente a meus pais Gozaburo e Yoshiko.

A meus irmãos.

Ao Jamil, Guilherme e Flavio.

AGRADECIMENTOS

★ Ao Dr. Roberto David Martinez Garcia, pela dedicada orientação, assistência e atenção em todo o período de execução da tese.

★ Ao Dr. Wilson José Vieira, pela imensa boa vontade com que forneceu indispensável assistência em Monte Carlo.

★ A todos os demais colegas e amigos, particularmente, ao Ezzat Selim Chalhoub, Renato Matheus e Jair Fernandes, pela ajuda e incentivo.

★ Ao Instituto de Estudos Avançados, do Centro Técnico Aeroespacial, pelo apoio que possibilitou esta etapa de aperfeiçoamento profissional.

★ À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo, pelos equipamentos computacionais cedidos.

★ Ao Centro de Super-Computação da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, pela permissão ao uso de seus computadores.

MODELOS APROXIMADOS PARA O CÁLCULO DO TRANSPORTE DE PARTÍCULAS NEUTRAS EM DUTOS

Shizuca Ono

RESUMO

É estudado o problema de transporte de partículas neutras em dutos vazios de seção transversal arbitrária mas uniforme ao longo do eixo, com reflexão isotrópica na parede interna do duto. Funções de base são utilizadas para representar as dependências transversal e azimutal do fluxo angular de partículas. Para duas funções de base, é implementada uma otimização no método, decompondo o problema em componentes não-colidido e colidido. Um novo conjunto de quadraturas, mais adequado ao problema, é desenvolvido e gerado por meio da teoria construtiva de polinômios ortogonais. É também desenvolvida e implementada a aproximação com três funções de base, para melhorar a precisão dos resultados. Para ambos os modelos, de duas e de três funções de base, é introduzido o problema dependente da energia com o formalismo de multigrupos. Os resultados dos problemas-teste são comparados com resultados publicados e com os obtidos pelo código de Monte Carlo, MCNP.

APPROXIMATE MODELS FOR NEUTRAL PARTICLE TRANSPORT CALCULATIONS IN DUCTS

Shizuca Ono

ABSTRACT

The problem of neutral particle transport in evacuated ducts of arbitrary, but axially uniform, cross-sectional geometry and isotropic reflection at the wall is studied. The model makes use of basis functions to represent the transverse and azimuthal dependences of the particle angular flux in the duct. For the approximation in terms of two basis functions, an improvement in the method is implemented by decomposing the problem into uncollided and collided components. A new quadrature set, more suitable to the problem, is developed and generated by one of the techniques of the constructive theory of orthogonal polynomials. The approximation in terms of three basis functions is developed and implemented to improve the precision of the results. For both models of two and three basis functions, the energy dependence of the problem is introduced through the multigroup formalism. The results of sample problems are compared to literature results and to results of the Monte Carlo code, MCNP.

SUMÁRIO

	Página
1 INTRODUÇÃO	1
1.1 Objetivo do Trabalho	1
1.2 Estrutura do Trabalho	2
1.3 Revisão Bibliográfica	2
2 FORMULAÇÃO GERAL DO PROBLEMA	5
3 MODELO COM DUAS FUNÇÕES DE BASE OTIMIZADO	11
3.1 Desenvolvimento Teórico	11
3.2 Solução do Problema Não-Colidido	12
3.3 Solução do Problema Colidido	15
3.4 Funções de Base e de Ponderação para o Modelo $N = 2$	19
3.5 As Quadraturas de Semi-Intervalo	21
3.5.1 Os Momentos M_l	25
4 MODELO COM TRÊS FUNÇÕES DE BASE	30
4.1 Desenvolvimento Teórico	30
4.2 Implementação Computacional	33
5 MODELO DEPENDENTE DA ENERGIA	35
5.1 Desenvolvimento Teórico	35
5.2 Implementação Computacional	41
6 RESULTADOS NUMÉRICOS	43
6.1 Modelo $N = 2$	43
6.1.1 Efeito da Abordagem por Decomposição	43
6.1.2 Efeito da Utilização de Quadraturas Duplas	45

6.2	Modelo $N = 3$	52
6.3	Modelo Dependente da Energia	58
6.4	Comparação entre o Modelo Aproximado e o Problema Real	72
7	CONSIDERAÇÕES FINAIS	80
7.1	Contribuição do Trabalho	80
7.2	Conclusões	80
7.3	Possíveis Trabalhos Futuros	81
	APÊNDICE A – Determinação dos Coeficientes da Segunda Função de Base	83
	APÊNDICE B – Determinação dos Coeficientes da Terceira Função de Base	86
	APÊNDICE C – Exemplos de Obtenção de Alguns Elementos das Matrizes A e B	91
	APÊNDICE D – Modificação Introduzida no Código MCNP para Simulação do Modelo de Albedo Independente da Energia	98
	APÊNDICE E – Modificação Introduzida no Código MCNP para Simulação do Modelo de Albedo Dependente da Energia	99
	APÊNDICE F – Estruturas de Grupos de Energia e Composição do Con- creto Usado nos Cálculos Monte Carlo	102
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	103

LISTA DE TABELAS

	Página
Tabela 3.1 – Os Nós $\{\xi_i\}$ e Pesos $\{\eta_i\}$ para a Quadratura de Semi-Intervalo de Ordem 10	29
Tabela 3.2 – Os Nós $\{\xi_i\}$ e Pesos $\{\eta_i\}$ para a Quadratura de Semi-Intervalo de Ordem 20	29
Tabela 6.1 – Probabilidades de Reflexão e Transmissão Obtidas de Cálculos de Ordenadas Discretas Usando as Abordagens Padrão e por Decomposição	48
Tabela 6.2 – Probabilidades de Reflexão e Transmissão Obtidas de Cálculos de Ordenadas Discretas Usando Esquemas de Quadratura de Chebyshev e de Quadratura Dupla	49
Tabela 6.3 – Primeiros Coeficientes dos Fluxos Angulares para o Caso $c = 0, 2$ e $Z = 1$ Calculados com 640 Intervalos Espaciais	50
Tabela 6.4 – Primeiros Coeficientes dos Fluxos Angulares para o Caso $c = 0, 2$ e $Z = 20$ Calculados com 2560 Intervalos Espaciais	50
Tabela 6.5 – Probabilidades de Reflexão para os Modelos Aproximados e Monte Carlo	54
Tabela 6.6 – Probabilidades de Transmissão para os Modelos Aproximados e Monte Carlo	55
Tabela 6.7 – Desvios Percentuais dos Modelos Aproximados	56

Tabela 6.8 – Tempos de Processamento (em segundos) dos Modelos Aproximados e Monte Carlo	57
Tabela 6.9 – Albedos $c_{g' \rightarrow g}$ para o Concreto na Faixa Térmica	62
Tabela 6.10 – Albedos $c_{g' \rightarrow g}$ para o Concreto na Faixa Rápida	62
Tabela 6.11 – Albedos $c_{g' \rightarrow g}$ para o Ferro na Faixa Térmica	63
Tabela 6.12 – Albedos $c_{g' \rightarrow g}$ para o Ferro na Faixa Rápida	63
Tabela 6.13 – Probabilidades de Reflexão para um Duto de Concreto com Razão $Z/\rho = 1$ na Faixa Térmica	64
Tabela 6.14 – Probabilidades de Transmissão para um Duto de Concreto com Razão $Z/\rho = 1$ na Faixa Térmica	64
Tabela 6.15 – Probabilidades de Reflexão para um Duto de Concreto com Razão $Z/\rho = 1$ na Faixa Rápida	65
Tabela 6.16 – Probabilidades de Transmissão para um Duto de Concreto com Razão $Z/\rho = 1$ na Faixa Rápida	65
Tabela 6.17 – Probabilidades de Reflexão para um Duto de Ferro com Razão $Z/\rho = 1$ na Faixa Térmica	66
Tabela 6.18 – Probabilidades de Transmissão para um Duto de Ferro com Razão $Z/\rho = 1$ na Faixa Térmica	66
Tabela 6.19 – Probabilidades de Reflexão para um Duto de Ferro com Razão $Z/\rho = 1$ na Faixa Rápida	67
Tabela 6.20 – Probabilidades de Transmissão para um Duto de Ferro com Razão $Z/\rho = 1$ na Faixa Rápida	67
Tabela 6.21 – Probabilidades de Reflexão para um Duto de Concreto com Razão $Z/\rho = 10$ na Faixa Térmica	68
Tabela 6.22 – Probabilidades de Transmissão para um Duto de Concreto com	

Razão $Z/\rho = 10$ na Faixa Térmica	68
Tabela 6.23 – Probabilidades de Reflexão para um Duto de Concreto com Razão $Z/\rho = 10$ na Faixa Rápida	69
Tabela 6.24 – Probabilidades de Transmissão para um Duto de Concreto com Razão $Z/\rho = 10$ na Faixa Rápida	69
Tabela 6.25 – Probabilidades de Reflexão para um Duto de Ferro com Razão $Z/\rho = 10$ na Faixa Térmica	70
Tabela 6.26 – Probabilidades de Transmissão para um Duto de Ferro com Razão $Z/\rho = 10$ na Faixa Térmica	70
Tabela 6.27 – Probabilidades de Reflexão para um Duto de Ferro com Razão $Z/\rho = 10$ na Faixa Rápida	71
Tabela 6.28 – Probabilidades de Transmissão para um Duto de Ferro com Razão $Z/\rho = 10$ na Faixa Rápida	71
Tabela 6.29 – Probabilidades de Reflexão Obtidas para o Modelo Aproximado e para o Problema Real no Caso de um Duto Circular de Concreto de Comprimento $Z = 100$ cm na Faixa Térmica	74
Tabela 6.30 – Probabilidades de Transmissão Obtidas para o Modelo Aproximado e para o Problema Real no Caso de um Duto Circular de Concreto de Comprimento $Z = 100$ cm na Faixa Térmica	74
Tabela 6.31 – Probabilidades de Reflexão Obtidas para o Modelo Aproximado e para o Problema Real no Caso de um Duto Circular de Concreto de Comprimento $Z = 100$ cm na Faixa Rápida	75
Tabela 6.32 – Probabilidades de Transmissão Obtidas para o Modelo Aproximado e para o Problema Real no Caso de um Duto Circular de Concreto de Comprimento $Z = 100$ cm na Faixa Rápida	75
Tabela 6.33 – Probabilidades de Reflexão Obtidas para o Modelo Aproximado	

e para o Problema Real no Caso de um Duto Circular de Ferro de Comprimento $Z = 100$ cm na Faixa Térmica	76
Tabela 6.34 – Probabilidades de Transmissão Obtidas para o Modelo Aproximado e para o Problema Real no Caso de um Duto Circular de Ferro de Comprimento $Z = 100$ cm na Faixa Térmica	76
Tabela 6.35 – Probabilidades de Reflexão Obtidas para o Modelo Aproximado e para o Problema Real no Caso de um Duto Circular de Ferro de Comprimento $Z = 100$ cm na Faixa Rápida	77
Tabela 6.36 – Probabilidades de Transmissão Obtidas para o Modelo Aproximado e para o Problema Real no Caso de um Duto Circular de Ferro de Comprimento $Z = 100$ cm na Faixa Rápida	77
Tabela 6.37 – Probabilidades de Reflexão para um Duto de Concreto na Faixa Térmica e Z/ρ Constante	78
Tabela 6.38 – Probabilidades de Reflexão para um Duto de Concreto na Faixa Rápida e Z/ρ Constante	78
Tabela 6.39 – Probabilidades de Reflexão para um Duto de Ferro na Faixa Térmica e Z/ρ Constante	79
Tabela 6.40 – Probabilidades de Reflexão para um Duto de Ferro na Faixa Rápida e Z/ρ Constante	79
Tabela F.1 – Estruturas de Grupos de Energia	102
Tabela F.2 – Composição do Concreto Usado nos Cálculos Monte Carlo	102

LISTA DE FIGURAS

	Página
Figura 1.1 – Geometria do duto	6
Figura 6.1 – Contribuições não-colidida e colidida para $\Psi_1(Z, \mu)$, $\mu > 0$, para o caso $c = 0,2$ e $Z = 1$	51
Figura 6.2 – Contribuição colidida para $\Psi_1(Z, \mu)$, $\mu > 0$, para dutos com $c = 0,8$	51

1 INTRODUÇÃO

Este trabalho tem como objeto de estudo a equação de transporte de partículas no interior de um duto. A maior ênfase se concentra no método de derivação das equações aproximadas, as quais não tem a forma usualmente encontrada em outros problemas de transporte.

1.1 Objetivo do Trabalho

O objetivo deste trabalho é obter a solução da equação de transporte em dutos visando alcançar resultados mais precisos e introduzir formulações que tornem a descrição do problema mais próxima do problema real do que os modelos já desenvolvidos por outros autores, discutidos na Seção 1.3.

O modelo é desenvolvido utilizando a técnica dos resíduos ponderados, particularmente o método de Galerkin, e a solução numérica é obtida via método de ordenadas discretas.

Uma otimização do modelo aproximado de duas funções de base é efetuada, decompondo o problema em componentes não-colidido e colidido, antes de resolver a equação por ordenadas discretas. É estudado e gerado um novo conjunto de quadraturas, mais adequado ao problema. É também introduzida uma terceira função de base, relevante ao problema, que aumenta a precisão dos resultados. Para os dois modelos, de duas e de três funções de base, é desenvolvido e implementado o modelo de multi-grupos, usando-se albedos dependentes da energia na condição de contorno da parede interna do duto. Os resultados obtidos são comparados com os resultados publicados e os obtidos do código de Monte Carlo, MCNP,² modificado adequadamente.

Por meio dos resultados dos problemas-teste é feita uma comparação e avaliação dos resultados do modelo aproximado e do problema real.

1.2 Estrutura do Trabalho

A apresentação do trabalho é feita da seguinte forma: no Capítulo 1, de Introdução, são apresentados o objetivo do trabalho, a estrutura de apresentação e a revisão bibliográfica. No Capítulo 2 é mostrada a formulação geral do problema e do modelo aproximado; no Capítulo 3 é desenvolvido o modelo de duas funções de base com decomposição da solução em componentes não-colidido e colidido e também a obtenção de novos conjuntos de quadraturas. No Capítulo 4 é apresentado o modelo com três funções de base e no Capítulo 5 as aproximações de duas e de três funções de base com dependência energética. Todos os resultados numéricos obtidos são fornecidos no Capítulo 6. Por fim no Capítulo 7 são apresentadas as considerações finais, destacando as contribuições deste trabalho, as conclusões e possíveis trabalhos futuros.

1.3 Revisão Bibliográfica

O interesse no cálculo do transporte de partículas no interior de dutos está ligado principalmente ao cálculo de fluxo de moléculas de gases em tubos, estudo do transporte de partículas atômicas e moleculares em reatores a fusão e também ao cálculo de transporte de nêutrons em blindagens para reatores nucleares. No caso específico da fusão nuclear, o plasma na região da borda de um tokamak é neutralizado por um dispositivo mecânico e as partículas neutras resultantes são desviadas por dutos vazios de onde são esgotadas por bombeamento. Estas partículas não possuem uma distribuição energética em equilíbrio ao penetrar no duto, portanto se locomovem a uma velocidade maior que a velocidade nominal de bombeamento. Para verificar quão rápido ocorre o estado de equilíbrio, o fenômeno foi simulado com o método Monte Carlo. O fato dos cálculos com aplicação do método Monte Carlo serem muito onerosos, motivou Prinja e Pomraning a propor, em 1984, um modelo aproximado de transporte em dutos²⁷ cuja linha de pesquisa é seguida pelo presente trabalho. Foi desenvolvido um modelo unidimensional para solução de problemas de duto vazio, de seção arbitrária mas uniforme, independente da energia, com distribuições de partículas incidentes nas extremidades. As partículas entram no duto e fluem livremente colidindo

apenas com a parede interna. O problema envolve cinco variáveis, três no espaço e duas na direção. Este modelo permitiu a redução do número de variáveis de cinco para duas (uma espacial e uma direcional). A formulação é baseada na justificativa física de que a média da distância entre colisões na parede do duto, em relação à seção geométrica do duto e ao ângulo azimutal, pode ser interpretada como um livre caminho médio. O livre caminho médio cujo recíproco é a "seção de choque de interação" é função do ângulo polar, cujo co-seno é denotado por μ . A equação de transporte final nas variáveis (z, μ) apresenta uma "seção de choque de interação" angularmente dependente e proporcional a $(1 - \mu^2)^{1/2}$.

Quase que simultaneamente ao trabalho de Prinja e Pomraning, Larsen²¹ desenvolveu o mesmo modelo, porém derivado matematicamente. A equação de transporte, de três variáveis espaciais e duas variáveis angulares, com as condições de contorno associadas, é projetada no subespaço (z, μ) , obtendo-se uma equação de transporte em geometria unidimensional. Nesse trabalho é demonstrado também que o modelo de Prinja e Pomraning corresponde à mais baixa ordem de aproximação (uma função de base) em uma hierarquia de aproximações baseadas no método dos resíduos ponderados, sem contudo tratar das funções de base e de ponderação aplicáveis a modelos de maior ordem.

Em um trabalho seguinte, Larsen, Malvagi e Pomraning²² melhoraram a precisão do modelo, considerando a aproximação de próxima ordem, usando duas funções de base, sendo por este fato, chamado de modelo $N = 2$. Nesse trabalho são descritos detalhes essenciais das funções de base e das funções de ponderação apropriadas ao problema. A forma das funções de base para aproximar a solução foi baseada na análise de uma relação entre a fonte originária na parede, a partir das partículas espalhadas, e o fluxo angular no duto. O problema é resolvido com o método de Galerkin em que as funções de ponderação são escolhidas como sendo as mesmas funções de base e o método variacional em que as funções de ponderação são as funções de base, mas com a variável angular Ω , trocada por $-\Omega$. Entre os dois métodos utilizados, verificou-se que o de Galerkin fornece resultados mais precisos.²² Para a solução da equação de transporte foi utilizado o método das ordenadas discretas com um conjunto de quadraturas baseadas nos polinômios de Chebyshev do segundo tipo. Os autores obtiveram, com este modelo $N = 2$, resultados numéricos de boa precisão quando comparados aos

resultados de referência, com um desvio máximo de cerca de 7% nas probabilidades de reflexão e de transmissão, em vários problemas-teste resolvidos. Em 1996 Prinja²⁵ aperfeiçoou o modelo de transporte unidimensional em dutos, permitindo a migração da partícula na parede do duto, através da introdução de um núcleo de espalhamento não-local, onde a partícula espalhada é reemitida em uma posição espacial diferente do ponto de incidência.

2 FORMULAÇÃO GERAL DO PROBLEMA

A formulação é apresentada considerando o problema de transporte de partículas independente da energia, em estado estacionário, duto vazio, orientado ao longo do eixo z . Partículas incidem nas extremidades do duto e fluem livremente, colidindo somente com a parede interna. Uma geometria típica, com a descrição das coordenadas da partícula, é apresentada na Figura 1.1. A seção transversal uniforme é descrita por $R = [(x, y)|h(x, y) < 0]$ e a parede interna por $\partial R = [(x, y)|h(x, y) = 0]$, onde $h(x, y)$ é a função que define a forma da seção do duto. Por exemplo, para um duto de seção circular com raio ρ , $h(x, y) = x^2 + y^2 - \rho^2$. A área, A , da seção do duto e o perímetro, L , são dados por

$$A = \int_R dx dy \quad (2.1)$$

e

$$L = \int_{\partial R} ds, \quad (2.2)$$

onde ds é um elemento de arco.

Considerando as hipóteses descritas, a equação de transporte para a função distribuição de partículas $\Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})$ no interior do duto é dada por

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = 0, \quad h < 0, \quad 0 < z < Z, \quad (2.3)$$

onde $\mathbf{r} = (x, y, z)$ e $\boldsymbol{\Omega}$ denotam, respectivamente, a posição e a direção da partícula no interior do duto e Z é o comprimento do duto. As condições de contorno de distribuição de partículas incidentes nas extremidades são expressas como

$$\Psi(x, y, 0, \boldsymbol{\Omega}) = f(x, y, \boldsymbol{\Omega}), \quad h < 0 \quad \text{e} \quad \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{e} > 0, \quad (2.4a)$$

e

$$\Psi(x, y, Z, \boldsymbol{\Omega}) = g(x, y, \boldsymbol{\Omega}), \quad h < 0 \quad \text{e} \quad \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{e} < 0, \quad (2.4b)$$

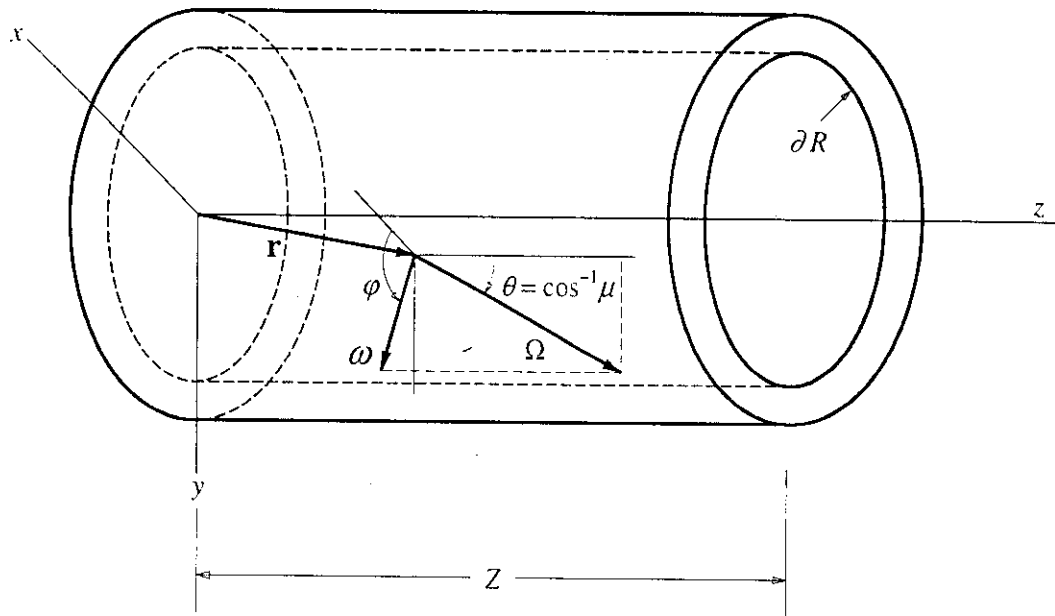


Figura 1.1 Geometria do duto

onde \mathbf{e} é o versor na direção positiva de z . Para descrever a reflexão isotrópica na parede interna do duto é utilizada a condição de contorno na forma padrão^{19,20} expressa como:

$$-\Omega \cdot \mathbf{n} \Psi(\mathbf{r}, \Omega) = \int_{\Omega' \cdot \mathbf{n} > 0} p(\mathbf{r}, \Omega' \rightarrow \Omega) \Psi(\mathbf{r}, \Omega') d\Omega', \quad h = 0, \quad \Omega \cdot \mathbf{n} < 0, \quad (2.5)$$

com

$$p(\mathbf{r}, \Omega' \rightarrow \Omega) = -\frac{c}{\pi} (\Omega \cdot \mathbf{n})(\Omega' \cdot \mathbf{n}), \quad (2.6)$$

onde \mathbf{n} é o vetor normal orientado para fora na parede do duto, c é a probabilidade da partícula ser refletida para dentro do duto e portanto $(1 - c)$ a probabilidade de ser absorvida na parede ou escapar para a região externa do duto.

Escrevendo o vetor direção como

$$\Omega = (\sqrt{1 - \mu^2} \cos \varphi, \sqrt{1 - \mu^2} \sin \varphi, \mu) = \sqrt{1 - \mu^2} \boldsymbol{\omega} + \mu \mathbf{e}, \quad (2.7)$$

onde

$$\boldsymbol{\omega} = (\cos \varphi, \sin \varphi, 0), \quad \mathbf{e} = (0, 0, 1), \quad (2.8)$$

com $-1 \leq \mu \leq 1$ e $0 \leq \varphi \leq 2\pi$, sendo μ definido como o co-seno do ângulo entre Ω e o eixo z , a Eq. (2.3) pode ser expressa como

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \Psi(\mathbf{r}, \Omega) + (1 - \mu^2)^{1/2} \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}, \Omega) = 0. \quad (2.9)$$

Esta equação com as condições de contorno dadas pelas Eqs. (2.4a), (2.4b) e (2.5) descreve o problema tridimensional de transporte de partículas no interior do duto. A redução do problema de cinco variáveis para o modelo unidimensional nas variáveis z e μ é feita utilizando-se o método dos resíduos ponderados. Na formulação geral apresentada por Larsen, Malvagi e Pomraning²² a função distribuição de partículas $\Psi(x, y, z, \mu, \varphi)$ é aproximada como

$$\Psi(x, y, z, \mu, \varphi) \approx \sum_{j=1}^N \alpha_j(x, y, \varphi) \Psi_j(z, \mu) \quad (2.10)$$

onde N é a ordem de aproximação, $\alpha_j(x, y, \varphi)$ são as funções de base escolhidas e $\Psi_j(z, \mu)$ são os coeficientes da expansão a serem determinados. Um conjunto de equações para $\Psi_j(z, \mu)$ é obtido aplicando a técnica dos resíduos ponderados e, neste trabalho, optou-se pelo esquema clássico de Galerkin, onde as funções de ponderação são escolhidas como sendo as mesmas funções de base do problema, pela razão deste esquema ter mostrado fornecer resultados mais precisos do que o esquema variacional.

Sendo a Eq. (2.10) uma aproximação para a distribuição de partículas, Ψ assim definida, não satisfaz a equação de transporte no duto para qualquer escolha de $\Psi_j(z, \mu)$. Portanto substituindo a Eq. (2.10) na Eq. (2.9) e nas condições de contorno, resultam termos de erro, pelo fato da Eq. (2.10) ser uma proposta de solução aproximada. O método dos resíduos ponderados impõe que estes termos de erro sejam ortogonais a certas funções de ponderação $\beta_i(x, y, \varphi)$ para $1 \leq i < N$. Assim, as equações para $\Psi_j(z, \mu)$ são obtidas a partir das seguintes equações:

$$\int_R \int_0^{2\pi} \beta_i(x, y, \varphi) \left[\mu \frac{\partial}{\partial z} \Psi(x, y, z, \Omega) + (1 - \mu^2)^{1/2} \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla \Psi(x, y, z, \Omega) \right] d\varphi dx dy = 0, \quad (2.11)$$

$$\int_{\partial R} \int_{\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} < 0} \beta_i(x, y, \varphi) [\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n} \Psi(x, y, z, \Omega) - \frac{c}{\pi} \int_{\boldsymbol{\Omega}' \cdot \mathbf{n} > 0} (\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n})(\boldsymbol{\Omega}' \cdot \mathbf{n}) \Psi(x, y, z, \Omega') d\Omega'] d\varphi ds = 0, \quad h = 0 \text{ e } \boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n} < 0, \quad (2.12)$$

$$\int_R \int_0^{2\pi} \beta_i(x, y, \varphi) [\Psi(x, y, 0, \Omega) - f(x, y, \Omega)] d\varphi dx dy = 0, \quad \mu > 0, \quad (2.13)$$

$$\int_R \int_0^{2\pi} \beta_i(x, y, \varphi) [\Psi(x, y, Z, \Omega) - g(x, y, \Omega)] d\varphi dx dy = 0, \quad \mu < 0. \quad (2.14)$$

válidas para $1 \leq i \leq N$, onde N é a ordem de aproximação do modelo.

As funções de base α_j e funções de ponderação β_i são escolhidas de modo a satisfazer a condição de ortogonalidade

$$\frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} \alpha_j \beta_i d\varphi dx dy = \delta_{ij}, \quad 1 \leq i, j \leq N. \quad (2.15)$$

Substituindo a aproximação para a função distribuição de partículas dada pela Eq. (2.10) no termo $\frac{\partial}{\partial z} \Psi$ da Eq. (2.11) e utilizando a identidade²²

$$\beta_i \omega \cdot \nabla \Psi = \omega \cdot \nabla (\beta_i \Psi) - \Psi \omega \cdot \nabla \beta_i. \quad (2.16)$$

obtem-se

$$\begin{aligned} & \int_R \int_0^{2\pi} \beta_i(x, y, \varphi) \mu \frac{\partial}{\partial z} \sum_{j=1}^N \alpha_j(x, y, \varphi) \Psi_j(z, \mu) d\varphi dx dy + \int_R \int_0^{2\pi} (1 - \mu^2)^{1/2} \\ & \times \left\{ \omega \cdot \nabla [\beta_i(x, y, \varphi) \Psi(x, y, z, \mu, \varphi)] - \Psi(x, y, z, \mu, \varphi) \omega \cdot \nabla \beta_i(x, y, \varphi) \right\} d\varphi dx dy = 0. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Aplicando o teorema da divergência, expresso pela equação

$$\int_V \nabla \cdot \mathbf{F} dV = \int_S \mathbf{n} \cdot \mathbf{F} dS \quad (2.18)$$

onde \mathbf{F} é uma função contínua, \mathbf{n} é o vetor normal à superfície S e V é a região em três dimensões delimitada pela superfície S e utilizando a equação

$$\Psi_i(z, \mu) = \frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} \Psi(x, y, z, \mu, \varphi) \beta_i(x, y, \varphi) d\varphi dx dy, \quad 1 \leq i \leq N, \quad (2.19)$$

obtida a partir da condição de ortogonalidade, a Eq. (2.17) pode ser expressa como

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial z} \Psi_i(z, \mu) = & -\frac{(1 - \mu^2)^{1/2}}{2\pi A} \left[\int_{\partial R} \int_0^{2\pi} \omega \cdot \mathbf{n} \beta_i(x, y, \varphi) \Psi(x, y, z, \mu, \varphi) d\varphi ds \right. \\ & \left. - \int_R \int_0^{2\pi} \Psi(x, y, z, \mu, \varphi) \omega \cdot \nabla \beta_i(x, y, \varphi) d\varphi dx dy \right]. \end{aligned} \quad (2.20)$$

No primeiro termo do lado direito da equação anterior, a integral em φ pode ser escrita como uma soma das integrais em $\omega \cdot \mathbf{n} > 0$ e $\omega \cdot \mathbf{n} < 0$, fornecendo

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial z} \Psi_i(z, \mu) = & -\frac{(1 - \mu^2)^{1/2}}{2\pi A} \left\{ \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} \beta_i(x, y, \varphi) \Psi(x, y, z, \mu, \varphi) d\varphi ds \right. \\ & + \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} < 0} \omega \cdot \mathbf{n} \beta_i(x, y, \varphi) \Psi(x, y, \mu, \varphi) d\varphi ds \\ & \left. - \int_R \int_0^{2\pi} \Psi(x, y, z, \mu, \varphi) \omega \cdot \nabla \beta_i(x, y, \varphi) d\varphi dx dy \right\}. \quad (2.21) \end{aligned}$$

Usando a Eq. (2.12), a integral sobre $\omega \cdot \mathbf{n} < 0$ nesta equação pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} < 0} \beta_i(x, y, \varphi) \omega \cdot \mathbf{n} \Psi(x, y, z, \mu, \varphi) d\varphi ds = & \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} < 0} \beta_i(x, y, \varphi) \frac{c}{\pi} \omega \cdot \mathbf{n} \\ & \times \left[\int_{\omega' \cdot \mathbf{n} > 0} (\Omega' \cdot \mathbf{n}) \Psi(x, y, z, \Omega') d\Omega' \right] d\varphi ds. \quad (2.22) \end{aligned}$$

Substituindo este resultado na Eq. (2.21) e considerando que

$$\int_{\Omega' \cdot \mathbf{n} > 0} (\Omega' \cdot \mathbf{n}) (\cdot) d\Omega' = \int_{\omega' \cdot \mathbf{n} > 0} \omega' \cdot \mathbf{n} \int_{-1}^1 (1 - \mu'^2)^{1/2} (\cdot) d\mu' d\varphi'. \quad (2.23)$$

tem-se

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial z} \Psi_i(z, \mu) + (1 - \mu^2)^{1/2} \sum_{j=1}^N a_{ij} \Psi_j(z, \mu) = & \frac{2c}{\pi} (1 - \mu^2)^{1/2} \sum_{j=1}^N b_{ij} \\ & \times \int_{-1}^1 (1 - \mu'^2)^{1/2} \Psi_j(z, \mu) d\mu', \quad (2.24) \end{aligned}$$

onde

$$\begin{aligned} a_{ij} = & \frac{1}{2\pi A} \left[\int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} \beta_i(x, y, \varphi) \alpha_j(x, y, \varphi) d\varphi ds \right. \\ & \left. - \int_R \int_0^{2\pi} [\omega \cdot \nabla \beta_i(x, y, \varphi)] \alpha_j(x, y, \varphi) d\varphi dx dy \right] \quad (2.25) \end{aligned}$$

e

$$b_{ij} = \frac{1}{4\pi A} \int_{\partial R} \left[\int_{\omega \cdot \mathbf{n} < 0} |\omega \cdot \mathbf{n}| \beta_i(x, y, \varphi) d\varphi \right] \left[\int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} \alpha_j(x, y, \varphi) d\varphi \right] ds. \quad (2.26)$$

Partindo das Eqs. (2.13) e (2.14), obtém-se as condições de contorno correspondentes. Para $z = 0$ e $\mu > 0$,

$$\int_R \int_0^{2\pi} \beta_i(x, y, \varphi) \Psi(x, y, 0, \Omega) d\varphi dx dy = \int_R \int_0^{2\pi} \beta_i(x, y, \varphi) f(x, y, \Omega) d\varphi dx dy. \quad (2.27)$$

Utilizando a Eq. (2.19), obtém-se

$$\Psi_i(0, \mu) = \frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} \beta_i(x, y, \varphi) f(x, y, \mu, \varphi) d\varphi dx dy = f_i(\mu). \quad (2.28)$$

Analogamente, para $z = Z$ e $\mu < 0$, tem-se

$$\Psi_i(Z, \mu) = \frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} \beta_i(x, y, \varphi) g(x, y, \mu, \varphi) d\varphi dx dy = g_i(\mu). \quad (2.29)$$

Na forma matricial, as equações do modelo aproximado podem ser escritas como

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \Psi(z, \mu) + (1 - \mu^2)^{1/2} \mathbf{A} \Psi(z, \mu) = \frac{2c}{\pi} (1 - \mu^2)^{1/2} \mathbf{B} \int_{-1}^1 (1 - \mu'^2)^{1/2} \Psi(z, \mu') d\mu', \quad (2.30)$$

para $z \in (0, Z)$ e $\mu \in [-1, 1]$, com as condições de contorno

$$\Psi(0, \mu) = \mathbf{F}(\mu), \quad \mu > 0, \quad (2.31a)$$

e

$$\Psi(Z, \mu) = \mathbf{G}(\mu), \quad \mu < 0, \quad (2.31b)$$

onde as matrizes \mathbf{A} e \mathbf{B} têm como elementos $\{a_{ij}\}$ e $\{b_{ij}\}$, definidos pelas Eqs. (2.25) e (2.26) respectivamente, e os vetores $\mathbf{F}(\mu)$ e $\mathbf{G}(\mu)$ têm como componentes $\{f_i(\mu)\}$ e $\{g_i(\mu)\}$, definidos pelas Eqs. (2.28) e (2.29) respectivamente. Estas equações são válidas para um duto com seção geométrica uniforme e qualquer conjunto de N funções de base α_j e N funções de ponderação β_i , adequadas ao problema, que satisfaçam a Eq. (2.15).

A Eq. (2.30) apresenta forma similar à equação de transporte matricial padrão mas com a peculiaridade da matriz $(1 - \mu^2)^{1/2} \mathbf{A}$, correspondente à matriz das seções de choque de remoção, ser cheia e todos os elementos conterem o termo $(1 - \mu^2)^{1/2}$, o que causa uma dependência angular. Esta característica incomum foi uma das motivações dos primeiros trabalhos nesta área.^{21,27}

3 MODELO COM DUAS FUNÇÕES DE BASE OTIMIZADO

3.1 Desenvolvimento Teórico

Neste capítulo é descrito o modelo com duas funções de base, mas antes da discretização da equação de transporte no espaço e no ângulo para a solução por ordenadas discretas, o problema é decomposto em componente não-colidido e componente colidido.¹² A razão para se adotar este procedimento está no fato de que o fluxo não-colidido torna-se dominante distante da entrada do duto e apresenta um pico em torno de $\mu = 1$, sendo este fato mais acentuado quando a absorção predomina sobre o espalhamento na parede do duto. No método padrão usado por Larsen, Malvagi e Pomraning, onde a equação de transporte é discretizada sem a prévia decomposição em problema não-colidido e colidido, há necessidade de um grande número de ordenadas para descrever satisfatoriamente a presença deste pico. A decomposição permite que a solução analítica do problema não-colidido seja feita de uma maneira direta, descrevendo bem este pico, e o problema colidido, tendo um comportamento mais suave do que o problema original, pode ser solucionado por ordenadas discretas, necessitando de um número relativamente pequeno de ordenadas para se obter resultados para as probabilidades de reflexão e transmissão com uma boa precisão numérica.

Partindo das Eqs. (2.30) e (2.31), onde, na aproximação de duas funções de base, $\Psi(z, \mu)$ é um vetor coluna de dois componentes, \mathbf{A} e \mathbf{B} são matrizes cheias 2×2 que dependem da seção geométrica do duto, das funções de base e das funções de ponderação escolhidas, e os vetores $\mathbf{F}(\mu)$ e $\mathbf{G}(\mu)$ são considerados conhecidos, a solução pode ser decomposta em problemas não-colidido e colidido de tal modo que

$$\Psi(z, \mu) = \Psi_0(z, \mu) + \Psi_*(z, \mu). \quad (3.1)$$

O componente não-colidido $\Psi_0(z, \mu)$ satisfaz a Eq. (2.30) para $c = 0$, isto é,

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \Psi_0(z, \mu) + (1 - \mu^2)^{1/2} \mathbf{A} \Psi_0(z, \mu) = \mathbf{0}, \quad z \in (0, Z), \quad \mu \in [-1, 1], \quad (3.2)$$

com

$$\Psi_0(0, \mu) = F(\mu) \quad (3.3a)$$

e

$$\Psi_0(Z, -\mu) = G(\mu), \quad (3.3b)$$

para $\mu > 0$. O componente colidido $\Psi_*(z, \mu)$ por sua vez satisfaz

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial z} \Psi_*(z, \mu) + (1 - \mu^2)^{1/2} \mathbf{A} \Psi_*(z, \mu) = & \frac{2c}{\pi} (1 - \mu^2)^{1/2} \mathbf{B} \\ & \times \int_{-1}^1 (1 - \mu'^2)^{1/2} \Psi_*(z, \mu') d\mu' + \mathbf{Q}(z, \mu), \end{aligned} \quad (3.4)$$

$z \in (0, Z)$ e $\mu \in [-1, 1]$, e as condições de contornos livres

$$\Psi_*(0, \mu) = \mathbf{0} \quad (3.5a)$$

e

$$\Psi_*(Z, -\mu) = \mathbf{0}, \quad (3.5b)$$

para $\mu > 0$. O vetor fonte $\mathbf{Q}(z, \mu)$ na Eq. (3.4) é dado por

$$\mathbf{Q}(z, \mu) = \frac{2c}{\pi} (1 - \mu^2)^{1/2} \mathbf{B} \int_{-1}^1 (1 - \mu'^2)^{1/2} \Psi_0(z, \mu') d\mu' \quad (3.6)$$

e torna-se conhecido uma vez resolvido o problema não-colidido.

3.2 Solução do Problema Não-Colidido

O problema não-colidido definido pelas Eqs. (3.2) e (3.3) é solucionado por um procedimento de diagonalização, obtendo-se uma solução analítica. Neste procedimento é definida uma matriz \mathbf{P} tal que²³

$$\mathbf{P}^{-1} \mathbf{A} \mathbf{P} = \mathbf{\Lambda}, \quad (3.7)$$

onde $\mathbf{\Lambda}$ é uma matriz diagonal com os autovalores λ_1 e λ_2 de \mathbf{A} como elementos. Para que a Eq. (3.7) seja verdadeira, \mathbf{P} deve ter dois autovetores independentes de \mathbf{A} como colunas.

Multiplicando-se as Eqs. (3.2) e (3.3), pela esquerda, por \mathbf{P}^{-1} tem-se

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \Upsilon(z, \mu) + (1 - \mu^2)^{1/2} \Lambda \Upsilon(z, \mu) = 0, \quad (3.8)$$

para $z \in (0, Z)$ and $\mu \in [-1, 1]$, com

$$\Upsilon(0, \mu) = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{F}(\mu) \quad (3.9a)$$

e

$$\Upsilon(Z, -\mu) = \mathbf{P}^{-1} \mathbf{G}(\mu), \quad (3.9b)$$

para $\mu > 0$, onde

$$\Upsilon(z, \mu) = \mathbf{P}^{-1} \Psi_0(z, \mu). \quad (3.10)$$

Desde que os componentes de $\Upsilon(z, \mu)$ são desacoplados no problema definido pelas Eqs. (3.8) e (3.9), usando a relação dada pela Eq. (3.10), obtém-se a solução das Eqs. (3.2) e (3.3) na forma

$$\Psi_0(z, \mu) = \mathbf{P} \mathbf{E}(z, \mu) \mathbf{P}^{-1} \mathbf{F}(\mu) \quad (3.11a)$$

e

$$\Psi_0(z, -\mu) = \mathbf{P} \mathbf{E}(Z - z, \mu) \mathbf{P}^{-1} \mathbf{G}(\mu), \quad (3.11b)$$

para $z \in [0, Z]$ e $\mu > 0$, onde $\mathbf{E}(z, \mu)$ é uma matriz diagonal 2×2 , definida como

$$\mathbf{E}(z, \mu) = \text{diag} \left\{ e^{-\lambda_1(1-\mu^2)^{1/2}z/\mu}, e^{-\lambda_2(1-\mu^2)^{1/2}z/\mu} \right\}. \quad (3.12)$$

Para se obter a solução do problema expresso pelas Eqs. (3.11a) e (3.11b) devem estar determinados os autovalores da matriz \mathbf{A} e os elementos da matriz \mathbf{P} e de sua inversa. Na Eq. (3.7), \mathbf{P} pode ser escolhida como

$$\mathbf{P} = \begin{pmatrix} \lambda_1 - a_{22} & \lambda_2 - a_{22} \\ a_{21} & a_{21} \end{pmatrix} \quad (3.13)$$

e a sua inversa, neste caso, é

$$\mathbf{P}^{-1} = \frac{1}{\lambda_1 - \lambda_2} \begin{pmatrix} 1 & -(\lambda_2 - a_{22})/a_{21} \\ -1 & (\lambda_1 - a_{22})/a_{21} \end{pmatrix}. \quad (3.14)$$

Para a obtenção dos autovalores de \mathbf{A} tem-se

$$\det(\mathbf{A} - \lambda \mathbf{I}) = 0 \quad (3.15)$$

e para este caso, $N = 2$, os autovalores devem satisfazer a equação

$$\lambda^2 - (\text{tr} \mathbf{A})\lambda + \det \mathbf{A} = 0. \quad (3.16)$$

Portanto para $j = 1$ e 2 ,

$$\lambda_j = \frac{1}{2} \left[(a_{11} + a_{22}) - (-1)^j \sqrt{(a_{11} - a_{22})^2 + 4a_{12}a_{21}} \right]. \quad (3.17)$$

onde a_{ij} são os elementos da matriz \mathbf{A} .

Substituindo as Eqs. (3.13) e (3.14) na Eq. (3.11) tem-se a solução do problema não-colidido expresso pelas equações:

$$\Psi_0(z, \mu) = \left[\mathbf{U}_{12} e^{-\lambda_1(1-\mu^2)^{1/2}z/\mu} + \mathbf{U}_{21} e^{-\lambda_2(1-\mu^2)^{1/2}z/\mu} \right] \mathbf{F}(\mu) \quad (3.18a)$$

e

$$\Psi_0(z, -\mu) = \left[\mathbf{U}_{12} e^{-\lambda_1(1-\mu^2)^{1/2}(Z-z)/\mu} + \mathbf{U}_{21} e^{-\lambda_2(1-\mu^2)^{1/2}(Z-z)/\mu} \right] \mathbf{G}(\mu), \quad (3.18b)$$

para $z \in [0, Z]$ e $\mu > 0$, onde

$$\mathbf{U}_{ij} = \frac{1}{\lambda_i - \lambda_j} \begin{pmatrix} \lambda_i - a_{22} & -(\lambda_i - a_{22})(\lambda_j - a_{22})/a_{21} \\ a_{21} & -(\lambda_j - a_{22}) \end{pmatrix}. \quad (3.19)$$

Desde que nenhuma restrição foi feita para a dedução destas equações nos casos dos autovalores serem reais ou pares complexo-conjugados, a solução dada pela Eq. (3.18) é válida para ambos os casos. No caso de autovalores complexos, para evitar os cálculos no modo complexo, definem-se estes como $\lambda_R \pm i\lambda_I$, onde a parte real é $\lambda_R = \text{tr}(\mathbf{A}/2)$ e a parte imaginária é $\lambda_I = \frac{1}{2} \sqrt{|(a_{11} - a_{22})^2 + 4a_{12}a_{21}|}$. Assim a Eq. (3.18) pode ser escrita como

$$\Psi_0(z, \mu) = \mathbf{T}(z, \mu) \mathbf{F}(\mu) e^{-\lambda_R(1-\mu^2)^{1/2}z/\mu} \quad (3.20a)$$

e

$$\Psi_0(z, -\mu) = \mathbf{T}(Z - z, \mu) \mathbf{G}(\mu) e^{-\lambda_R(1-\mu^2)^{1/2}(Z-z)/\mu}, \quad (3.20b)$$

onde a matriz $\mathbf{T}(z, \mu)$ de ordem 2×2 é dada por

$$\mathbf{T}(z, \mu) = \cos[\lambda_I(1-\mu^2)^{1/2}z/\mu] \mathbf{I} - \frac{1}{\lambda_I} \sin[\lambda_I(1-\mu^2)^{1/2}z/\mu] \mathbf{M}, \quad (3.21)$$

com

$$\mathbf{M} = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(a_{11} - a_{22}) & a_{12} \\ a_{21} & \frac{1}{2}(a_{22} - a_{11}) \end{pmatrix}. \quad (3.22)$$

No caso de um duto circular os autovalores de \mathbf{A} são pares complexo-conjugados; o discriminante da Eq. (3.17) é sempre negativo. Mas nada pode ser concluído em relação a outras formas de seção do duto. Para uma análise mais completa, considera-se também o caso em que os autovalores são iguais. Neste caso a solução pode ser obtida fixando λ_2 na Eq. (3.18), fazendo $\lambda_1 \rightarrow \lambda_2$ e usando a regra de L'Hospital. Obtemos

$$\Psi_0(z, \mu) = \left[\mathbf{I} - \frac{1}{\mu} (1 - \mu^2)^{1/2} z \mathbf{M} \right] \mathbf{F}(\mu) e^{-\text{tr}(\mathbf{A}/2)(1-\mu^2)^{1/2}z/\mu} \quad (3.23a)$$

e

$$\Psi_0(z, -\mu) = \left[\mathbf{I} - \frac{1}{\mu} (1 - \mu^2)^{1/2} (Z - z) \mathbf{M} \right] \mathbf{G}(\mu) e^{-\text{tr}(\mathbf{A}/2)(1-\mu^2)^{1/2}(Z-z)/\mu}. \quad (3.23b)$$

Esta mesma solução pode ser obtida a partir das Eq. (3.20) e (3.21), fazendo $\lambda_I \rightarrow 0$ na Eq. (3.21).

3.3 Solução do Problema Colidido

Uma vez solucionado o problema não-colidido, o vetor fonte expresso pela Eq. (3.6) fica determinado e as equações do problema colidido podem ser resolvidas pelo método das ordenadas discretas.¹ A base principal do método é que a distribuição angular de partículas é calculada em um número discreto de direções. A precisão que

pode ser alcançada com o método depende em grande parte da escolha das direções μ_i e dos pesos associados ω_i . A obtenção destes conjuntos de quadraturas será tratada na próxima seção.

Considerando um conjunto de quadraturas simétricas de ordem M , relativo à função-peso $(1 - \mu^2)^{1/2}$, definidas pelos nós μ_i e pesos ω_i , para $i = 1, 2, \dots, M$, podemos escrever as Eqs. (3.4) como

$$\begin{aligned} \mu_i \frac{d}{dz} \Psi_*(z, \mu_i) + (1 - \mu_i^2)^{1/2} \mathbf{A} \Psi_*(z, \mu_i) &= \frac{2c}{\pi} (1 - \mu_i^2)^{1/2} \mathbf{B} \\ &\times \sum_{j=1}^M \omega_j \Psi_*(z, \mu_j) + \mathbf{Q}(z, \mu_i), \quad z \in (0, Z), \quad i = 1, 2, \dots, M. \end{aligned} \quad (3.24)$$

com as condições de contorno livres

$$\Psi_*(0, \mu_i) = 0 \quad (3.25a)$$

e

$$\Psi_*(Z, -\mu_i) = 0, \quad (3.25b)$$

para $\mu_i > 0$. A variável espacial z é representada por um conjunto de valores discretos, definida pelos pontos $z_k, k = 0, 1, \dots, K$, de tal modo que a condição de contorno à esquerda do duto é em z_0 e do lado direito em z_K . Integrando a Eq. (3.24) no intervalo (z_{k-1}, z_k) , obtém-se a equação de balanço

$$\frac{\mu_i}{\Delta_k} [\Psi_{k,i} - \Psi_{k-1,i}] + (1 - \mu_i^2)^{1/2} \mathbf{A} \bar{\Psi}_{k,i} = \frac{2c}{\pi} (1 - \mu_i^2)^{1/2} \mathbf{B} \sum_{j=1}^M \omega_j \bar{\Psi}_{k,j} + \bar{\mathbf{Q}}_{k,i}. \quad (3.26)$$

onde $\Delta_k = z_k - z_{k-1}$, $\Psi_{k,i} = \Psi_*(z_k, \mu_i)$ é o vetor dos coeficientes para o fluxo angular colidido no ponto z_k e ordenada μ_i ,

$$\bar{\Psi}_{k,i} = \frac{1}{\Delta_k} \int_{z_{k-1}}^{z_k} \Psi_*(z, \mu_i) dz \quad (3.27)$$

é o vetor dos coeficientes médios no intervalo (z_{k-1}, z_k) para o fluxo angular colidido na ordenada μ_i , e

$$\bar{\mathbf{Q}}_{k,i} = \frac{1}{\Delta_k} \int_{z_{k-1}}^{z_k} \mathbf{Q}(z, \mu_i) dz \quad (3.28)$$

é o vetor fonte médio neste intervalo e nesta ordenada. As condições de contorno são dadas como

$$\Psi_{0,i} = 0, \quad \mu_i > 0 \quad (3.29a)$$

e

$$\Psi_{K,i} = 0, \quad \mu_i < 0. \quad (3.29b)$$

O vetor fonte definido pela Eq. (3.6), com a solução do problema não-colidido dado pela Eq. (3.18) pode escrito para $\lambda_1 \neq \lambda_2$ como

$$\bar{Q}_{k,i} = \frac{2c}{\pi \Delta_k} (1 - \mu_i^2)^{1/2} \mathbf{B} \{ \mathbf{U}_{12} [\mathbf{X}_{1,k} + \mathbf{Y}_{1,k}] + \mathbf{U}_{21} [\mathbf{X}_{2,k} + \mathbf{Y}_{2,k}] \}, \quad (3.30)$$

onde

$$\mathbf{X}_{j,k} = \frac{1}{\lambda_j} \int_0^1 \mu e^{-\lambda_j(1-\mu^2)^{1/2} z_{k-1}/\mu} \left[1 - e^{-\lambda_j(1-\mu^2)^{1/2} \Delta_k/\mu} \right] \mathbf{F}(\mu) d\mu \quad (3.31a)$$

e

$$\mathbf{Y}_{j,k} = \frac{1}{\lambda_j} \int_0^1 \mu e^{-\lambda_j(1-\mu^2)^{1/2} (Z-z_k)/\mu} \left[1 - e^{-\lambda_j(1-\mu^2)^{1/2} \Delta_k/\mu} \right] \mathbf{G}(\mu) d\mu, \quad (3.31b)$$

e a matriz \mathbf{U}_{ij} é definida pela Eq. (3.19). A Eq. (3.30) é válida para o caso geral de autovalores reais ou complexo-conjugados. Particularmente para o caso onde os autovalores são complexo-conjugados, escrevendo-os na forma $\lambda_R \pm i\lambda_I$, temos

$$\bar{Q}_{k,i} = \frac{2c\Omega}{\pi \Delta_k} (1 - \mu_i^2)^{1/2} \mathbf{B} [\mathbf{L}_k + \mathbf{R}_k], \quad (3.32)$$

onde $\Omega = 1/\sqrt{\lambda_R^2 + \lambda_I^2}$ e \mathbf{L}_k e \mathbf{R}_k são vetores tais que

$$\mathbf{L}_k = \int_0^1 \mu e^{-\lambda_R(1-\mu^2)^{1/2} z_{k-1}/\mu} \left[\Theta(z_{k-1}, \mu) - e^{-\lambda_R(1-\mu^2)^{1/2} \Delta_k/\mu} \Theta(z_k, \mu) \right] \mathbf{F}(\mu) d\mu \quad (3.33a)$$

e

$$\mathbf{R}_k = \int_0^1 \mu e^{-\lambda_R(1-\mu^2)^{1/2} (Z-z_k)/\mu} \left[\Theta(Z - z_k, \mu) - e^{-\lambda_R(1-\mu^2)^{1/2} \Delta_k/\mu} \Theta(Z - z_{k-1}, \mu) \right] \times \mathbf{G}(\mu) d\mu. \quad (3.33b)$$

Nestas equações, $\Theta(z, \mu)$ é uma matriz 2×2 definida como

$$\Theta(z, \mu) = \cos [\lambda_I(1 - \mu^2)^{1/2} z/\mu + \phi] \mathbf{I} - \frac{1}{\lambda_I} \sin [\lambda_I(1 - \mu^2)^{1/2} z/\mu + \phi] \mathbf{M}, \quad (3.34)$$

onde $\phi = \tan^{-1}(\lambda_I/\lambda_R)$. No caso de autovalores reais $\lambda_1 = \lambda_2$ pode-se obter $\bar{Q}_{k,i}$ pelas Eqs. (3.32) e (3.33) fazendo $\lambda_I \rightarrow 0$ na expressão de $\Theta(z, \mu)$. A equação de transporte discretizada [Eq. (3.26)] com as condições de contorno dadas pelas Eqs. (3.29) representa um sistema de $2KM$ equações algébricas lineares. Com um total de $4KM$ incógnitas, que consistem de $2KM$ incógnitas nas bordas, dadas por $\Psi_{k,i}$, $k = 1, 2, \dots, K$ e $\mu_i > 0$, $\Psi_{k,i}$, $k = 0, 1, \dots, K-1$ e $\mu_i < 0$, e $2KM$ incógnitas nas malhas, dadas por $\bar{\Psi}_{k,i}$, $k = 1, 2, \dots, K$ e $i = 1, 2, \dots, M$, necessita-se $2KM$ equações complementares para se obter a solução do problema. Para isso usou-se o esquema aproximado de "diamond-difference",¹ onde os coeficientes Ψ são tomados como variando linearmente entre z_k adjacentes, o que implica em

$$\bar{\Psi}_{k,i} = \frac{1}{2}(\Psi_{k-1,i} + \Psi_{k,i}), \quad (3.35)$$

para $k = 1, 2, \dots, K$ e $i = 1, 2, \dots, M$. Usando-se esta equação, eliminam-se os vetores coeficientes médios na Eq. (3.26), similarmente ao caso escalar convencional.¹ Assim a equação de balanço pode ser escrita como

$$\begin{aligned} \Psi_{k,i} - \Psi_{k-1,i} + \frac{\Delta_k(1 - \mu_i^2)^{1/2}}{2\mu_i} \mathbf{A} [\Psi_{k-1,i} + \Psi_{k,i}] \\ = \frac{\Delta_k c}{\mu_i \pi} (1 - \mu_i^2)^{1/2} \mathbf{B} \sum_{j=1}^M \omega_j [\Psi_{k-1,j} + \Psi_{k,j}] + \frac{\Delta_k}{\mu_i} \bar{Q}_{k,i}. \end{aligned} \quad (3.36)$$

Definindo

$$s_{ik} = (1 - \mu_i^2)^{1/2} \Delta_k / (2|\mu_i|) \quad (3.37)$$

e

$$\mathbf{S}_{k,i} = \frac{\Delta_k}{|\mu_i|} \left[\frac{c}{\pi} (1 - \mu_i^2)^{1/2} \mathbf{B} \sum_{j=1}^M \omega_j [\Psi_{k-1,j} + \Psi_{k,j}] + \bar{Q}_{k,i} \right], \quad (3.38)$$

tem-se

$$\Psi_{k,i} - \Psi_{k-1,i} + s_{ik} \mathbf{A} [\Psi_{k-1,i} + \Psi_{k,i}] = \mathbf{S}_{k,i}. \quad (3.39)$$

Aplicando um procedimento de diagonalização semelhante ao usado na Seção 3.2, tem-se

$$\Psi_{k,i} = [2\mathbf{C}_{ik} - \mathbf{I}] \Psi_{k-1,i} + \mathbf{C}_{ik} \mathbf{S}_{k,i}, \quad (3.40)$$

para valores de i tais que $\mu_i > 0$; e analogamente para valores de i tais que $\mu_i < 0$,

$$\Psi_{k-1,i} = [2C_{ik} - \mathbf{I}] \Psi_{k,i} + C_{ik} \mathbf{S}_{k,i}, \quad (3.41)$$

onde

$$C_{ik} = \frac{1}{(1 + s_{ik}\lambda_1)(1 + s_{ik}\lambda_2)} \begin{pmatrix} 1 + s_{ik}a_{22} & s_{ik}(\lambda_1 - a_{22})(\lambda_2 - a_{22})/a_{21} \\ -s_{ik}a_{21} & 1 + s_{ik}(\lambda_1 + \lambda_2 - a_{22}) \end{pmatrix}. \quad (3.42)$$

No caso dos autovalores serem pares complexo-conjugados $\lambda_R \pm i\lambda_I$, a matriz C_{ik} pode ser escrita como

$$C_{ik} = \frac{1}{(1 + s_{ik}\lambda_R)^2 + s_{ik}^2\lambda_I^2} \begin{pmatrix} 1 + s_{ik}a_{22} & s_{ik}[(\lambda_R - a_{22})^2 + \lambda_I^2]/a_{21} \\ -s_{ik}a_{21} & 1 + s_{ik}(2\lambda_R - a_{22}) \end{pmatrix}. \quad (3.43)$$

Para solucionar as Eqs. (3.40) e (3.41) foi utilizada a técnica de varredura,¹ iniciando o procedimento com a condição de contorno à esquerda dada pela Eq. (3.29a) para varredura da esquerda para a direita e a Eq. (3.29b) para a direção contrária. Um valor é atribuído ao componente de espalhamento no termo do vetor fonte $\mathbf{S}_{k,i}$ para iniciar o processo iterativo (no presente caso, escolheu-se o valor $\mathbf{0}$), o qual se considera convergido quando os coeficientes $\Psi_{k,i}$ calculados não diferem, em termos relativos, mais do que um valor pré-estabelecido (10^{-8} no caso deste trabalho) em duas varreduras sucessivas para $k = 0, 1, \dots, K$ e $i = 1, 2, \dots, M$.

3.4 Funções de Base e de Ponderação para o Modelo $N = 2$

Larsen, Malvagi e Pomraning, na Ref. 22, apresentam uma análise para a escolha das funções de base e de ponderação. Na aproximação $N = 1$ a função constante e unitária é escolhida para garantir a conservação de partículas no interior do duto. A escolha das funções de base formando combinação linear de 1 e $D(x, y, \omega)$, onde $D(x, y, \omega)$ é a distância, no plano x - y , de um ponto (x, y) à parede do duto na direção $-\omega$, no caso de $N = 2$, é baseada na análise do comportamento de uma distribuição angular, isotrópica, de partículas emitidas pela parede interna do duto.

Esta análise mostra também que, numa primeira aproximação, Ψ pode ser tomado como independente de x , y e φ , justificando a função de base ser constante no caso de $N = 1$. Na aproximação $N = 2$, desenvolvida utilizando o esquema clássico de Galerkin, as funções de base e funções de ponderação escolhidas são:

$$\alpha_1(x, y, \varphi) = \beta_1(x, y, \varphi) = 1 \quad (3.44)$$

e

$$\alpha_2(x, y, \varphi) = \beta_2(x, y, \varphi) = u[D(x, y, \omega) - v], \quad (3.45)$$

onde u e v são constantes a serem determinadas. A função $D(x, y, \omega)$ satisfaz a equação²²

$$\omega \cdot \nabla D(x, y, \omega) = 1, \quad (x, y) \in R, \quad (3.46)$$

e

$$D(x, y, \omega) = 0, \quad (x, y) \in \partial R \quad \text{e} \quad \omega \cdot \mathbf{n} < 0. \quad (3.47)$$

Os coeficientes das funções de base e ponderação devem ser tais que a Eq. (2.15) seja satisfeita. Assim obtém-se

$$u = \left[\frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - v]^2 d\varphi dx dy \right]^{-1/2} \quad (3.48)$$

e

$$v = \frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} D(x, y, \omega) d\varphi dx dy. \quad (3.49)$$

No caso particular de um duto com seção circular de raio ρ ,

$$v = \frac{8\rho}{3\pi} \quad (3.50)$$

e

$$u = \frac{3\pi}{\rho} (9\pi^2 - 64)^{-1/2}. \quad (3.51)$$

Uma dedução detalhada dos coeficientes u e v é apresentada no Apêndice A.

3.5 As Quadraturas de Semi-Intervalo

Neste trabalho, foi desenvolvido e gerado um novo conjunto de quadraturas gaussianas não-clássicas a partir de quadraturas definidas no semi-intervalo $[0, 1]$, associadas à medida $ds(\xi) = w(\xi)d\xi$, onde $w(\xi) = (1 - \xi^2)^{1/2}$ para $\xi \in [0, 1]$ e $w(\xi) = 0$, caso contrário. As quadraturas obtidas para $\xi \in [0, 1]$ são então estendidas, simetricamente, para $\xi \in [-1, 0]$. Esta composição permite, em princípio, representar melhor as discontinuidades do fluxo angular para $\mu = 0$ nas extremidades do duto do que as quadraturas de intervalo completo $[-1, 1]$. Deste modo, a solução do problema por ordenadas discretas, com a nova quadratura, requer um número de ordenadas mais reduzido para se obter resultados, com determinado grau de precisão desejado, para as probabilidades de reflexão e de transmissão. O algoritmo de Chebyshev modificado¹⁷ na teoria construtiva de polinômios ortogonais foi utilizado para a geração destas quadraturas.

Para a obtenção dos nós μ_i e pesos ω_i da quadratura de ordem $M = 2m$ para o intervalo $[-1, 1]$, parte-se da determinação de ξ_i e η_i na aproximação

$$\int_0^1 (1 - \xi^2)^{1/2} f(\xi) d\xi = \sum_{i=1}^m \eta_i f(\xi_i), \quad (3.52)$$

que torna-se exata quando $f(\xi)$ é um polinômio de grau inferior ou igual a $2m - 1$. Uma vez obtidos estes nós e pesos, por simetria, é gerado o conjunto completo de quadraturas para todo o intervalo $[-1, 1]$.

Aplicando o algoritmo modificado de Chebyshev, obtém-se os coeficientes α_k e β_k da relação de recorrência para o conjunto de polinômios ortogonais $\Pi_k(\xi)$, com $k = 0, 1, \dots, m$, associados à medida $ds(\xi) = w(\xi)d\xi$. Estes polinômios devem satisfazer a condição de ortogonalidade

$$\int_0^1 (1 - \xi^2)^{1/2} \Pi_k(\xi) \Pi_l(\xi) d\xi \begin{cases} = 0 & \text{se } k \neq l, \\ > 0 & \text{se } k = l, \end{cases} \quad 0 \leq k, l \leq m, \quad (3.53)$$

e a relação de recorrência de três termos

$$\Pi_{k+1}(\xi) = (\xi - \alpha_k) \Pi_k(\xi) - \beta_k \Pi_{k-1}(\xi), \quad k = 0, 1, \dots, m-1, \quad (3.54)$$

com valores iniciais $\Pi_{-1}(\xi) = 0$ e $\Pi_0(\xi) = 1$. Determinando-se os coeficientes α_k e β_k para $k = 0, 1, \dots, m-1$, o conjunto de polinômios $\Pi_k(\xi)$ estará definido. O algoritmo faz uso de polinômios auxiliares $\Gamma_l(\xi)$ para $l = 0, 1, \dots, 2m-1$, que são supostos ortogonais em relação a uma medida $d\rho(\xi)$, não negativa, que pode em princípio ser escolhida arbitrariamente em \mathfrak{R} . Estes polinômios auxiliares devem satisfazer a fórmula de recorrência

$$\Gamma_{l+1}(\xi) = (\xi - a_l)\Gamma_l(\xi) - b_l\Gamma_{l-1}(\xi), \quad l = 0, 1, \dots, 2m-2. \quad (3.55)$$

onde os coeficientes a_l e b_l são conhecidos. Os coeficientes α_k e β_k podem ser obtidos em termos destes coeficientes através dos momentos mistos

$$\sigma_{k,l} = \int_0^1 (1 - \xi^2)^{1/2} \Pi_k(\xi) \Gamma_l(\xi) d\xi. \quad (3.56)$$

onde, por ortogonalidade, $\sigma_{k,l} = 0$ para $k > l$ e dos momentos

$$M_l = \int_0^1 (1 - \xi^2)^{1/2} \Gamma_l(\xi) d\xi. \quad (3.57)$$

Para a inicialização do algoritmo tem-se as seguintes relações:¹⁷

$$\sigma_{-1,l} = 0, \quad l = 1, 2, \dots, 2m-2, \quad (3.58a)$$

$$\sigma_{0,l} = M_l, \quad l = 0, 1, \dots, 2m-1, \quad (3.58b)$$

$$\alpha_0 = a_0 + M_1/M_0, \quad (3.58c)$$

$$\beta_0 = M_0. \quad (3.58d)$$

O cálculo de $\sigma_{k,l}$, α_k e β_k é efetuado, simultaneamente, a partir das seguintes expressões:¹⁷

$$\sigma_{k,l} = \sigma_{k-1,l+1} - (\alpha_{k-1} - a_l)\sigma_{k-1,l} - \beta_{k-1}\sigma_{k-2,l} + b_l\sigma_{k-1,l-1},$$

$$l = k, k+1, \dots, 2m-k-1. \quad (3.59a)$$

$$\alpha_k = a_k + \frac{\sigma_{k,k+1}}{\sigma_{k,k}} - \frac{\sigma_{k-1,k}}{\sigma_{k-1,k-1}}, \quad (3.59b)$$

$$\beta_k = \frac{\sigma_{k,k}}{\sigma_{k-1,k-1}}, \quad (3.59c)$$

para $k = 1, 2, \dots, m-1$.

Gautschi¹⁵⁻¹⁷ fez uma análise de estabilidade do método e forneceu exemplos de implementação do algoritmo com sucesso. Ressaltou, no entanto, que a maior dificuldade está no cálculo preciso dos momentos M_l , apesar da possibilidade de,

em muitos casos, estes poderem ser calculados explicitamente, ou por recorrência ou mesmo aproximados por uma discretização adequada. No presente trabalho foram testados dois conjuntos de polinômios auxiliares. A primeira tentativa foi baseada nos polinômios mônicos proporcionais aos polinômios de Chebyshev do segundo tipo $U_l(\xi)$. A razão para esta escolha foi devido ao fato da medida associada a estes polinômios ter a mesma forma funcional da medida $(1 - \xi^2)^{1/2} d\xi$. Entretanto, no caso dos polinômios $U_l(\xi)$, a medida tem suporte no intervalo $[-1, 1]$, enquanto que a medida deste trabalho tem suporte no semi-intervalo $[0, 1]$. Nesta primeira tentativa, o cálculo de $\sigma_{k,l}$ se torna extremamente mal condicionado conforme a ordem dos polinômios aumenta, apesar dos momentos M_l poderem ser calculados com precisão. A segunda tentativa, em que se obteve sucesso, foi baseada nos polinômios mônicos proporcionais aos polinômios de Legendre de argumento deslocado $P_l(2\xi - 1)$.

$$\Gamma_l(\xi) = \frac{(l!)^2}{(2l)!} P_l(2\xi - 1), \quad (3.60)$$

para $l = 0, 1, \dots, 2m - 1$, associados à medida $d\rho(\xi) = d\xi$ no intervalo $[0, 1]$. A Eq. (3.60) pode ser combinada com a fórmula de recorrência para os polinômios de Legendre de argumento deslocado

$$(l + 1)P_{l+1}(2\xi - 1) = (2l + 1)(2\xi - 1)P_l(2\xi - 1) - lP_{l-1}(2\xi - 1) \quad (3.61)$$

resultando em

$$\Gamma_{l+1}(\xi) = \left(\xi - \frac{1}{2}\right)\Gamma_l(\xi) - \frac{l^2}{4(2l - 1)(2l + 1)}\Gamma_{l-1}(\xi). \quad (3.62)$$

Comparando as Eqs. (3.62) e (3.55) pode-se concluir que, neste caso,

$$a_k = \frac{1}{2}, \quad b_k = \frac{k^2}{4(4k^2 - 1)}. \quad (3.63)$$

O cálculo dos momentos M_l necessários para a determinação dos coeficientes de recorrência, que tem complexidade maior do que no primeiro caso, é apresentado na seção seguinte.

Os nós e pesos das quadraturas de semi-intervalo de ordem m em $[0, 1]$ são obtidos a partir da matriz tridiagonal simétrica de Jacobi,^{16,17} de ordem $m \times m$, cujos elementos são dados em termos dos coeficientes de recorrência α_k e β_k na forma:

$$\mathbf{J} = \begin{pmatrix} \alpha_0 & \sqrt{\beta_1} & & & & & \\ \sqrt{\beta_1} & \alpha_1 & \sqrt{\beta_2} & & & & \\ & \sqrt{\beta_2} & \alpha_2 & \sqrt{\beta_3} & & & \\ & & \ddots & \ddots & \ddots & & \\ & & & \sqrt{\beta_{m-2}} & \alpha_{m-2} & \sqrt{\beta_{m-1}} & \\ & & & & \sqrt{\beta_{m-1}} & \alpha_{m-1} & \end{pmatrix}. \quad (3.64)$$

A cada nó ξ_i , que faz parte do conjunto de autovalores da matriz de Jacobi \mathbf{J} , corresponde um peso η_i dado por

$$\eta_i = M_0 u_{i,1}^2. \quad (3.65)$$

onde M_0 é o primeiro momento dado pela Eq. (3.57), $u_{i,1}$ é o primeiro componente de \mathbf{u}_i , o i -ésimo autovetor normalizado de \mathbf{J} , que deve satisfazer

$$\mathbf{J}\mathbf{u}_i = \xi_i \mathbf{u}_i, \quad \mathbf{u}_i^T \mathbf{u}_i = 1. \quad (3.66)$$

A solução deste auto-sistema pode ser obtida com a sub-rotina *Imtql3*, que é uma versão modificada¹⁰ da sub-rotina *Imtql2* do conjunto de rotinas EISPACK.³⁰ A sub-rotina *Imtql3*, além do cálculo dos autovalores, calcula apenas os primeiros componentes dos autovetores de uma matriz simétrica tridiagonal, com a vantagem de ser muito mais rápida do que a sub-rotina original *Imtql2* que, além dos autovalores, calcula todos os componentes dos respectivos autovetores.

Como exemplos, são mostradas nas Tabelas 3.1 e 3.2 as quadraturas de ordem 10 e 20, respectivamente, obtidas pela aplicação da teoria construtiva dos polinômios ortogonais. São apresentados os nós e pesos de quadraturas de semi-intervalo de ordem 10 e 20, respectivamente, resultantes de cálculos realizados com 16 dígitos decimais no computador e cuja precisão é de ± 1 no último dígito dado. Foi também feita a verificação da exatidão das quadraturas geradas por meio da propriedade da quadratura de ordem m integrar exatamente um polinômio de ordem até $(2m - 1)$ no intervalo $[0, 1]$.

Por sugestão de Siewert,²⁹ foi estudado, alternativamente, o uso do esquema de quadratura dupla baseado na quadratura padrão de Gauss-Legendre mapeada para os intervalos $[-1, 0]$ e $[0, 1]$ na solução do problema colidido do modelo $N = 2$. Em princípio, isto evitaria a necessidade do desenvolvimento e da implementação computacional do algoritmo modificado de Chebyshev para a obtenção das novas

quadraturas. Entretanto os resultados¹¹ mostraram que as novas quadraturas obtidas pela teoria construtiva dos polinômios ortogonais fornecem resultados mais precisos do que as quadraturas de Gauss-Legendre. Apesar disto, estas mostraram ser uma boa opção para a solução do problema, quando comparadas às quadraturas padrão de Gauss-Chebyshev no intervalo $[-1, 1]$, utilizadas na implementação original do método por Larsen, Malvagi e Pomraning.²²

3.5.1 Os Momentos M_l

O cálculo dos momentos M_l dados pela expressão

$$M_l = \frac{(l!)^2}{(2l)!} \int_0^1 (1 - \xi^2)^{1/2} P_l(2\xi - 1) d\xi, \quad (3.67)$$

para $l = 0, 1, \dots, 2m - 1$, inicia-se usando relação diferencial

$$2(2l + 1)P_l(2\xi - 1) = \frac{d}{d\xi} P_{l+1}(2\xi - 1) - (1 - \delta_{0,l}) \frac{d}{d\xi} P_{l-1}(2\xi - 1) \quad (3.68)$$

na equação anterior, obtendo-se

$$M_l = \frac{(l!)^2}{2(2l + 1)(2l)!} \int_0^1 (1 - \xi^2)^{1/2} \left[\frac{d}{d\xi} P_{l+1}(2\xi - 1) - (1 - \delta_{0,l}) \frac{d}{d\xi} P_{l-1}(2\xi - 1) \right] d\xi. \quad (3.69)$$

Usando-se integração por partes e a fórmula de recorrência expressa pela Eq. (3.61), a Eq. (3.69) pode ser expressa como

$$M_l = \frac{1}{2} \delta_{0,l} + \frac{(l!)^2}{4(2l + 1)(2l)!} \left[\frac{l + 2}{2l + 3} \mathcal{I}_{l+2} + \mathcal{I}_{l+1} - \frac{2l + 1}{(2l - 1)(2l + 3)} \mathcal{I}_l - (1 - \delta_{0,l}) \mathcal{I}_{l-1} - (1 - \delta_{0,l}) \frac{l - 1}{2l - 1} \mathcal{I}_{l-2} \right], \quad (3.70)$$

onde

$$\mathcal{I}_l = \int_0^1 (1 - \xi^2)^{-1/2} P_l(2\xi - 1) d\xi. \quad (3.71)$$

Efetuando a mudança de variáveis $x = 1 - 2\xi$, tem-se

$$\mathcal{I}_l = (-1)^l \int_{-1}^1 [(1+x)(3-x)]^{-1/2} P_l(x) dx. \quad (3.72)$$

Para resolver esta integral, é conveniente considerar a integral da função associada de Legendre do primeiro tipo $P_\nu^\mu(x)$,

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_\nu^\mu(z) &\doteq \int_{-1}^1 (1-x)^{-\frac{1}{2}\mu} (1+x)^{\frac{1}{2}\mu - \frac{1}{2}} (z+x)^{\mu - \frac{1}{2}} P_\nu^\mu(x) dx \\ &= \frac{2e^{-2\mu\pi i} \Gamma\left(\frac{1}{2} + \mu\right)}{\Gamma\left(\frac{1}{2}\right) \Gamma(\mu - \nu) \Gamma(\mu + \nu + 1)} (z-1)^\mu Q_\nu^\mu\left(\sqrt{\frac{1+z}{2}}\right) Q_{-\nu-1}^\mu\left(\sqrt{\frac{1+z}{2}}\right), \end{aligned} \quad (3.73)$$

que está tabelada num dos volumes do "Bateman Manuscript Project".⁹ Nesta expressão, μ deve ser tal que $-1/2 < \Re\mu < 1$, z está no plano complexo, exceto o intervalo de -1 a 1 ao longo do eixo real, e $Q_\nu^\mu(\zeta)$ é a função associada de Legendre do segundo tipo. Comparando a Eq. (3.72) com a Eq. (3.73) para $\mu = 0$ e $z = -3$, conclui-se que \mathcal{I}_l pode ser expresso como

$$\mathcal{I}_l = (-1)^l \lim_{\nu \rightarrow l} i \mathcal{J}_\nu^0(-3) = (-1)^l \lim_{\nu \rightarrow l} \frac{2i}{\Gamma(-\nu) \Gamma(\nu + 1)} Q_\nu(i) Q_{-\nu-1}(i). \quad (3.74)$$

Usando a relação⁸

$$Q_{-\nu-1}^\mu(\zeta) = Q_\nu^\mu(\zeta) + e^{\mu\pi i} \cos(\nu\pi) \Gamma(\mu - \nu) \Gamma(\nu + \mu + 1) P_\nu^{-\mu}(\zeta) \quad (3.75)$$

para $\mu = 0$ e calculando-se o limite na Eq. (3.74) tem-se

$$\mathcal{I}_l = 2i P_l(i) Q_l(i). \quad (3.76)$$

A fim de evitar o uso de aritmética complexa nos cálculos, define-se as quantidades reais

$$\mathcal{F}_l = \begin{cases} P_l(i) & , l \text{ par,} \\ iP_l(i) & , l \text{ ímpar,} \end{cases} \quad (3.77)$$

e

$$\mathcal{G}_l = \begin{cases} iQ_l(i) & , l \text{ par,} \\ Q_l(i) & , l \text{ ímpar.} \end{cases} \quad (3.78)$$

Assim a Eq. (3.76) é reescrita como

$$\mathcal{I}_l = 2\mathcal{F}_l\mathcal{G}_l. \quad (3.79)$$

Esta é a expressão utilizada para calcular as integrais \mathcal{I}_l , para $l = 0, 1, \dots, 2m+1$, que são necessárias para a determinação dos momentos M_l com a Eq. (3.70). Os valores de $\{\mathcal{F}_l\}$ podem ser avaliados precisamente com o valor inicial $\mathcal{F}_0 = 1$ e

$$\mathcal{F}_{l+1} = \frac{2l+1}{l+1}(-1)^{l+1}\mathcal{F}_l - \frac{l}{l+1}\mathcal{F}_{l-1} \quad (3.80)$$

para $l = 0, 1, \dots, 2m$. Os valores de $\{\mathcal{G}_l\}$ devem ser calculados por recorrência na direção decrescente de l a fim de evitar o acúmulo de erros de arredondamento. A razão de se adotar este procedimento é que as grandezas $\{\mathcal{G}_l\}$ são proporcionais às funções de Legendre do segundo tipo $\{Q_l(i)\}$ e estas funções se aproximam assintoticamente de zero em valor absoluto conforme $l \rightarrow \infty$, quando o argumento não está no segmento real $[-1, 1]$. Como discutido por Gautschi,¹⁴ o acúmulo do erro torna a recorrência na direção de l crescente instável, neste caso. Para o propósito deste trabalho, pode-se usar a fórmula de recorrência que é satisfeita pelas funções de Legendre do segundo tipo,

$$(2l+1)\zeta Q_l(\zeta) = (l+1)Q_{l+1}(\zeta) + lQ_{l-1}(\zeta) + \delta_{0,l}. \quad (3.81)$$

para mostrar que a relação $\mathcal{R}_{l+1} \doteq \mathcal{G}_{l+1}/\mathcal{G}_l$ deve satisfazer

$$\mathcal{R}_l = l [(-1)^l(2l+1) - (l+1)\mathcal{R}_{l+1}]^{-1}, \quad l > 0. \quad (3.82)$$

Com um valor inicial preciso de \mathcal{R}_{2m+2} , a Eq. (3.82) pode ser usada na direção decrescente de l , para calcular precisamente \mathcal{R}_l , $l = 2m+1, 2m, \dots, 1$. Obtidas estas relações, os valores de \mathcal{G}_l necessários podem ser calculados por

$$\mathcal{G}_{l+1} = \mathcal{R}_{l+1}\mathcal{G}_l \quad (3.83)$$

para $l = 0, 1, \dots, 2m$, com o valor inicial $\mathcal{G}_0 = \pi/4$.

Por fim, é necessário determinar \mathcal{R}_{2m+2} para inicializar a recorrência da Eq. (3.82) na direção decrescente de l . Desde que $Q_l(\zeta) \neq 0$ quando $\zeta \notin [-1, 1]$, a Eq. (3.81) pode ser dividida por $(2l+1)Q_l(\zeta)$, impondo $\zeta = i$ e tomando o limite de $l \rightarrow \infty$, para concluir que

$$\lim_{l \rightarrow \infty} \mathcal{R}_{l+1} = (-1)^{l+1} (\sqrt{2} - 1). \quad (3.84)$$

Seleciona-se, então, um inteiro $\mathcal{N} > 1$, aproxima-se $\mathcal{R}_{2m+\mathcal{N}+1}$ com o lado direito da Eq. (3.84) para $l = 2m+\mathcal{N}$ e usa-se a Eq. (3.82) para $l = 2m+\mathcal{N}, 2m+\mathcal{N}-1, \dots, 2m+2$ para calcular uma primeira aproximação de \mathcal{R}_{2m+2} . Em seguida, aumenta-se o valor de \mathcal{N} e este procedimento é repetido tantas vezes quantas forem necessárias até que duas sucessivas aproximações de \mathcal{R}_{2m+2} tenham uma diferença menor do que um valor pré-estabelecido em termos relativos. Para se ter uma idéia de quão rápido este procedimento pode convergir, usando-se 10 como valor inicial de \mathcal{N} e incrementando \mathcal{N} de 5 em 5 em cada iteração, obtém-se \mathcal{R}_{2m+2} convergido dentro da precisão de $\pm 3 \times 10^{-16}$ em 3 iterações, para $m = 100$.

TABELA 3.1: Os Nós $\{\xi_i\}$ e Pesos $\{\eta_i\}$ para a Quadratura de Semi-Intervalo de Ordem 10

i	ξ_i	η_i
1	1,269558596704(-2) ^a	3,243079967132(-2)
2	6,561384117603(-2)	7,246757466162(-2)
3	1,557746231688(-1)	1,050506418258(-1)
4	2,751830932298(-1)	1,256729789013(-1)
5	4,134470538000(-1)	1,309540129045(-1)
6	5,587499278309(-1)	1,200263908814(-1)
7	6,988436091408(-1)	9,548667453426(-2)
8	8,220316901219(-1)	6,330067902700(-2)
9	9,180941188472(-1)	3,156179819135(-2)
10	9,790931102588(-1)	8,446612798860(-3)

^aLeia-se $1,269558596704 \times 10^{-2}$.

TABELA 3.2: Os Nós $\{\xi_i\}$ e Pesos $\{\eta_i\}$ para a Quadratura de Semi-Intervalo de Ordem 20

i	ξ_i	η_i
1	3,387566948666(-3) ^a	8,683376399093(-3)
2	1,776002883935(-2)	2,000908797290(-2)
3	4,325743257142(-2)	3,085295834977(-2)
4	7,928001766240(-2)	4,089200951997(-2)
5	1,249772617726(-1)	4,980045876834(-2)
6	1,792758500662(-1)	5,724861052650(-2)
7	2,409081624456(-1)	6,292478953608(-2)
8	3,084439163746(-1)	6,656492785344(-2)
9	3,803243776428(-1)	6,798438409790(-2)
10	4,548984920615(-1)	6,710686366394(-2)
11	5,304603381849(-1)	6,398596249816(-2)
12	6,052872930711(-1)	5,881599773159(-2)
13	6,776782583993(-1)	5,193019228965(-2)
14	7,459912444704(-1)	4,378575726143(-2)
15	8,086795757840(-1)	3,493682462112(-2)
16	8,643259736753(-1)	2,599741714120(-2)
17	9,116737909755(-1)	1,759761826614(-2)
18	9,496547190218(-1)	1,033675884838(-2)
19	9,774123551966(-1)	4,737729148857(-3)
20	9,943211057243(-1)	1,206438902998(-3)

^aLeia-se $3,387566948666 \times 10^{-3}$.

4 MODELO COM TRÊS FUNÇÕES DE BASE

4.1 Desenvolvimento Teórico

Nesta seção é apresentado o desenvolvimento do modelo $N = 3$ com três funções de base¹³ para aproximação do fluxo angular. É utilizado o esquema clássico de Galerkin, e o método de ordenadas discretas padrão sem a decomposição em problema não-colidido e colidido, para a solução da equação. Segue-se a idéia apresentada na Ref. 22, onde é sugerido que uma combinação linear de $D(x, y, \omega)$ e $D^2(x, y, \omega)$ pode ser uma escolha razoável para compor as funções de base no modelo $N = 3$.

Na aproximação de $\Psi(x, y, z, \mu, \varphi)$ com três funções de base,

$$\Psi(x, y, z, \mu, \varphi) \approx \sum_{j=1}^3 \alpha_j(x, y, \varphi) \Psi_j(z, \mu) \quad (4.1)$$

$$= \alpha_1(x, y, \varphi) \Psi_1(z, \mu) + \alpha_2(x, y, \varphi) \Psi_2(z, \mu) + \alpha_3(x, y, \varphi) \Psi_3(z, \mu), \quad (4.2)$$

foram escolhidas as mesmas funções de base do modelo $N = 2$ para $j = 1$ e para $j = 2$, isto é,

$$\alpha_1(x, y, \varphi) = 1, \quad (4.3)$$

$$\alpha_2(x, y, \varphi) = u[D(x, y, \omega) - v], \quad (4.4)$$

onde u e v são constantes, dadas na Sec. 3.4. A terceira função de base proposta é

$$\alpha_3(x, y, \varphi) = r [D(x, y, \omega) - s] [D(x, y, \omega) - t], \quad (4.5)$$

onde r , s e t são constantes a serem determinadas. Aplicando-se a condição de ortogonalidade expressa pela Eq. (2.15) para $i = j = 3$, obtém-se

$$r = \left\{ \frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - s]^2 [D(x, y, \omega) - t]^2 d\varphi dx dy \right\}^{-1/2}. \quad (4.6)$$

Pode-se mostrar (Apêndice B), com auxílio da Eq. (2.15) para os valores de $i = 1$ e $j = 3$ e $i = 2$ e $j = 3$, que as constantes s e t são tais que satisfazem as seguintes relações

$$(v - s)(v - t) = -\frac{1}{u^2} \quad (4.7)$$

e

$$s = -t + 2v + q, \quad (4.8)$$

onde

$$q = \frac{u^2}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - v]^3 d\varphi dx dy. \quad (4.9)$$

Assim s e t podem ser escritas em função de u , v e q como

$$s = v + \frac{1}{2} \left(q + \sqrt{q^2 + \frac{4}{u^2}} \right), \quad (4.10)$$

$$t = v + \frac{1}{2} \left(q - \sqrt{q^2 + \frac{4}{u^2}} \right). \quad (4.11)$$

Substituindo as Eqs. (4.10) e (4.11) na Eq. (4.5), pode-se escrever a terceira função de base como:

$$\alpha_3(x, y, \varphi) = r \{ [D(x, y, \omega) - v][D(x, y, \omega) - v - q] - 1/u^2 \}. \quad (4.12)$$

Uma vez determinadas as constantes u e v , para a definição da terceira função de base é necessária a determinação da constante r , qual seja

$$r = \left\{ \frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - v]^4 d\varphi dx dy - \frac{1}{u^2} \left(q^2 + \frac{1}{u^2} \right) \right\}^{-1/2}, \quad (4.13)$$

e também da constante q expressa pela Eq. (4.9).

Particularmente para um duto de seção circular de raio ρ ,

$$q = 8\rho \left[\frac{9\pi}{5(9\pi^2 - 64)} - \frac{2}{3\pi} \right] \quad (4.14)$$

e

$$r = \rho^{-2} \left\{ \left[1 + \frac{24}{5(9\pi^2 - 64)^{1/2}} \right] \left[1 - \frac{24}{5(9\pi^2 - 64)^{1/2}} \right] \right\}^{-1/2}. \quad (4.15)$$

Obtida a terceira função de base, os elementos a_{ij} e b_{ij} das matrizes \mathbf{A} e \mathbf{B} na equação de transporte aproximada [Eq. (2.30)] são definidos pelas expressões dadas pelas Eqs. (2.25) e (2.26), obtendo-se para um duto de seção transversal de área A e perímetro L os seguintes elementos:

$$a_{11} = b_{11} = L/(\pi A), \quad (4.16a)$$

$$a_{12} = b_{12} = u - uvL/(\pi A), \quad (4.16b)$$

$$a_{21} = b_{21} = -uvL/(\pi A), \quad (4.16c)$$

$$a_{22} = u^2v^2L/(\pi A), \quad (4.16d)$$

$$b_{22} = -uv[u - uvL/(\pi A)], \quad (4.16e)$$

$$a_{13} = b_{13} = -qr + (v^2 + qv - 1/u^2)rL/(\pi A), \quad (4.16f)$$

$$a_{31} = b_{31} = (v^2 + qv - 1/u^2)rL/(\pi A), \quad (4.16g)$$

$$a_{23} = (2r/u) - (v^2 + qv - 1/u^2)uvrL/(\pi A), \quad (4.16h)$$

$$b_{23} = uv[qr - (v^2 + qv - 1/u^2)rL/(\pi A)], \quad (4.16i)$$

$$a_{32} = -(v^2 + qv - 1/u^2)uvrL/(\pi A), \quad (4.16j)$$

$$b_{32} = r(v^2 + qv - 1/u^2)[u - uvL/(\pi A)], \quad (4.16k)$$

$$a_{33} = (v^2 + qv - 1/u^2)^2r^2L/(\pi A), \quad (4.16l)$$

$$b_{33} = -r(v^2 + qv - 1/u^2)[qr - (v^2 + qv - 1/u^2)rL/(\pi A)]. \quad (4.16m)$$

Exemplos de obtenção destes coeficientes são mostrados no Apêndice C.

Da forma dos elementos das matrizes \mathbf{A} e \mathbf{B} pode-se verificar que da aproximação $N = 2$ para $N = 3$ foram acrescentados somente mais dois parâmetros (r e q). Nota-se ainda que o modelo $N = 1$ depende de dois parâmetros (A e L), o modelo $N = 2$ é função de quatro parâmetros (A , L , u e v) e o modelo $N = 3$ é dado em função de seis parâmetros (A , L , u , v , q e r).

4.2 Implementação Computacional

Como o principal objetivo do desenvolvimento do modelo $N = 3$ é verificar o ganho em precisão obtido com a introdução de uma função de base adicional, a solução da Eq. (2.24) é feita, por simplicidade, diretamente pelo método das ordenadas discretas para os três casos: $N = 1$, $N = 2$ e $N = 3$, sem usar a decomposição em componente não-colidido e componente colidido que é mais elaborada. É usado o esquema de quadraturas gaussianas de ordem M , gerado pela medida $(1 - \mu)^{1/2} d\mu$ no intervalo $[-1, 1]$ para a aproximação da integral do lado direito da Eq. (2.24). Este esquema tem os zeros dos polinômios de Chebyshev do segundo tipo $U_m(\mu)$ (Ref. 6) como nós, isto é,

$$\mu_i = \cos[i\pi/(M + 1)], \quad i = 1, 2, \dots, M \quad (4.17)$$

e os pesos

$$\omega_i = \frac{\pi}{M + 1} \text{sen}^2[i\pi/(M + 1)], \quad i = 1, 2, \dots, M. \quad (4.18)$$

Aplicando a aproximação de ordenadas discretas, similar à apresentada na Seção 3.3, na Eq. (2.24) obtém-se as equações finais para os valores de i tais que, para $\mu_i > 0$.

$$\mathbf{M}_{k,i}^+ \Psi_{k,i} = \mathbf{M}_{k,i}^- \Psi_{k-1,i} + \mathbf{S}_{k,i} \quad (4.19a)$$

e para os valores de i tais que, para $\mu_i < 0$,

$$\mathbf{M}_{k,i}^+ \Psi_{k-1,i} = \mathbf{M}_{k,i}^- \Psi_{k,i} + \mathbf{S}_{k,i}, \quad (4.19b)$$

onde

$$\mathbf{M}_{k,i}^\pm = \mathbf{I} \pm \frac{1}{2|\mu_i|} (1 - \mu_i^2)^{1/2} \Delta_k \mathbf{A} \quad (4.20)$$

e

$$\mathbf{S}_{k,i} = \frac{c}{\pi|\mu_i|} (1 - \mu_i^2)^{1/2} \Delta_k \mathbf{B} \sum_{j=1}^M \omega_j (\Psi_{k-1,j} + \Psi_{k,j}). \quad (4.21)$$

As condições de contorno são dadas por

$$\Psi_{0,i} = F_i, \quad (4.22a)$$

para valores de i tais que $\mu_i > 0$, e

$$\Psi_{K,i} = G_i, \quad (4.22b)$$

para valores de i tais que $\mu_i < 0$.

A solução das Eqs. (4.19), com as condições de contorno dadas pelas Eqs. (4.22), é feita pela técnica de varredura, como explicado na Seção 3.3.

5 MODELO DEPENDENTE DA ENERGIA

5.1 Desenvolvimento Teórico

Neste capítulo é desenvolvido o formalismo do problema de transporte de partículas com dependência energética, em dutos com as mesmas características geométricas utilizadas nos modelos aproximados apresentados anteriormente. Nos modelos $N = 2$ e $N = 3$ é introduzido o albedo dependente da energia para descrever a probabilidade de reflexão na parede interna do duto.

O transporte de partículas com energia $E \in [E_{min}, E_{max}]$, no interior do duto, pode ser representado pela equação

$$\Omega \cdot \nabla \Psi(\mathbf{r}, \Omega, E) = 0, \quad (5.1)$$

sendo $\Psi(\mathbf{r}, \Omega, E)$ o fluxo angular de partículas de energia E e direção Ω na posição \mathbf{r} . As condições de contorno nas extremidades são definidas como

$$\Psi(x, y, 0, \mu, \varphi, E) = F(x, y, \mu, \varphi, E), \quad \mu > 0, \quad (5.2a)$$

e

$$\Psi(x, y, Z, \mu, \varphi, E) = G(x, y, \mu, \varphi, E), \quad \mu < 0, \quad (5.2b)$$

onde F e G são funções conhecidas. Em ∂R a condição de contorno é descrita por

$$-\Omega \cdot \mathbf{n} \Psi(\mathbf{r}, \Omega, E) = \int_{E_{min}}^{E_{max}} \int_{\Omega' \cdot \mathbf{n} > 0} p(\mathbf{r}, \Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E) \Psi(\mathbf{r}, \Omega', E') d\Omega' dE',$$
$$h = 0 \quad \text{e} \quad \Omega \cdot \mathbf{n} < 0, \quad (5.3)$$

onde

$$p(\mathbf{r}, \Omega' \rightarrow \Omega, E' \rightarrow E) = -\frac{1}{\pi} (\Omega \cdot \mathbf{n})(\Omega' \cdot \mathbf{n}) c(E' \rightarrow E) \quad (5.4)$$

é a probabilidade de uma partícula que colide com a parede em \mathbf{r} , com direção Ω' e energia E' , ser refletida em \mathbf{r} com direção Ω e energia E , e, na Eq. (5.4), foi admitida,

por hipótese, a separabilidade ângulo-energia. Substituindo a Eq. (5.4) na Eq. (5.3) obtém-se

$$\Omega \cdot \mathbf{n} \Psi(\mathbf{r}, \Omega, E) = \frac{1}{\pi} \int_{\Omega' \cdot \mathbf{n} > 0} (\Omega \cdot \mathbf{n})(\Omega' \cdot \mathbf{n}) \int_{E_{\min}}^{E_{\max}} c(E' \rightarrow E) \Psi(\mathbf{r}, \Omega', E) dE' d\Omega'. \quad (5.5)$$

A variável energia é discretizada pelo método de multigrupos, onde a faixa de energia de interesse é dividida em um número finito de intervalos chamados de grupos de energia.¹

Definindo para cada grupo g , onde $E_g < E < E_{g-1}$, as quantidades

$$\Psi_g(\mathbf{r}, \Omega) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \Psi(\mathbf{r}, \Omega, E) dE, \quad (5.6)$$

$$F_g(x, y, \mu, \varphi) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} F(x, y, \mu, \varphi, E) dE, \quad (5.7)$$

$$G_g(x, y, \mu, \varphi) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} G(x, y, \mu, \varphi, E) dE \quad (5.8)$$

e

$$c_{g' \rightarrow g} = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} c(E' \rightarrow E) \Psi(\mathbf{r}, \Omega', E') dE' dE}{\int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \Psi(\mathbf{r}, \Omega', E') dE'}, \quad (5.9)$$

as Eqs. (5.1), (5.2) e (5.3) podem ser integradas sobre $E_g < E < E_{g-1}$, fornecendo

$$\Omega \cdot \nabla \Psi_g(\mathbf{r}, \Omega) = 0, \quad (5.10)$$

$$\Psi_g(x, y, 0, \mu, \varphi) = F_g(x, y, \mu, \varphi), \quad \mu > 0, \quad (5.11)$$

$$\Psi_g(x, y, Z, \mu, \varphi) = G_g(x, y, \mu, \varphi), \quad \mu < 0, \quad (5.12)$$

e

$$\Omega \cdot \mathbf{n} \Psi_g(\mathbf{r}, \Omega) = \frac{1}{\pi} \sum_{g'=1}^G c_{g' \rightarrow g} \int_{\Omega' \cdot \mathbf{n} > 0} (\Omega \cdot \mathbf{n})(\Omega' \cdot \mathbf{n}) \Psi_{g'}(\mathbf{r}, \Omega') d\Omega',$$

$$\mathbf{r} \in \partial R \quad \text{e} \quad \Omega \cdot \mathbf{n} < 0, \quad (5.13)$$

onde G indica o número total de grupos de energia.

Como mostrado no Capítulo 2, a Eq. (5.10) pode ser escrita na forma

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \Psi_g(x, y, z, \mu, \varphi) + (1 - \mu^2)^{1/2} \omega \cdot \nabla \Psi_g(x, y, z, \mu, \varphi) = 0. \quad (5.14)$$

Introduzindo $\Psi_g(x, y, z, \mu, \varphi)$ aproximado por funções de base como

$$\Psi_g(x, y, z, \mu, \varphi) \approx \sum_{j=1}^N \alpha_{j,g}(x, y, \varphi) \Psi_{j,g}(z, \mu) \quad (5.15)$$

no primeiro termo da equação anterior, tem-se

$$\mu \sum_{j=1}^N \alpha_{j,g}(x, y, \varphi) \frac{\partial}{\partial z} \Psi_{j,g}(z, \mu) + (1 - \mu^2)^{1/2} \omega \cdot \nabla \Psi_g(x, y, z, \mu, \varphi) = 0. \quad (5.16)$$

Aplicando a método dos resíduos ponderados, tem-se

$$\int_R \int_0^{2\pi} \left[\beta_{i,g}(x, y, \varphi) \mu \sum_{j=1}^N \alpha_{j,g}(x, y, \varphi) \frac{\partial}{\partial z} \Psi_{j,g}(z, \mu) \right] d\varphi dx dy + \int_R \int_0^{2\pi} \left[\beta_{i,g}(x, y, \varphi) (1 - \mu^2)^{1/2} \omega \cdot \nabla \Psi_g(x, y, z, \mu, \varphi) \right] d\varphi dx dy = 0, \quad (5.17)$$

onde $\beta_{i,g}(x, y, \varphi)$, $i = 1, 2, \dots, N$, são as funções de ponderação para o grupo g , tomadas iguais às funções de base $\alpha_{j,g}(x, y, \varphi)$, $j = 1, 2, \dots, N$, para o grupo g . Da condição de ortogonalidade entre as funções de ponderação e as funções de base, tem-se

$$\Psi_{i,g}(z, \mu) = \frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} \Psi_g(x, y, z, \mu, \varphi) \beta_{i,g}(x, y, \varphi) d\varphi dx dy, \quad 1 \leq i \leq N. \quad (5.18)$$

Utilizando-a na equação anterior resulta

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \Psi_{i,g}(z, \mu) = - \frac{(1 - \mu^2)^{1/2}}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} \beta_{i,g}(x, y, \varphi) \omega \cdot \nabla \Psi_g(x, y, z, \mu, \varphi) d\varphi dx dy, \quad (5.19)$$

a qual, usando a identidade dada pela Eq. (2.16), pode ser escrita como

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \Psi_{i,g}(z, \mu) = - \frac{(1 - \mu^2)^{1/2}}{2\pi A} \left\{ \int_R \int_0^{2\pi} \omega \cdot \nabla [\beta_{i,g}(x, y, \varphi) \Psi_g(x, y, z, \mu, \varphi)] d\varphi dx dy - \int_R \int_0^{2\pi} \Psi_g(x, y, z, \mu, \varphi) \omega \cdot \nabla \beta_{i,g}(x, y, \varphi) d\varphi dx dy \right\}. \quad (5.20)$$

Aplicando o teorema da divergência, tem-se

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \Psi_{i,g}(z, \mu) = -\frac{(1-\mu^2)^{1/2}}{2\pi A} \left\{ \int_{\partial R} \int_0^{2\pi} \omega \cdot \mathbf{n} \beta_{i,g}(x, y, \varphi) \Psi_g(x, y, z, \mu, \varphi) d\varphi ds \right. \\ \left. - \int_R \int_0^{2\pi} \Psi_g(x, y, z, \mu, \varphi) \omega \cdot \nabla \beta_{i,g}(x, y, \varphi) d\varphi dx dy \right\}. \quad (5.21)$$

No primeiro termo do lado direito da equação anterior, a integral sobre φ é escrita, separadamente, para as partes $\omega \cdot \mathbf{n} < 0$ e $\omega \cdot \mathbf{n} > 0$. Usando a Eq. (5.13) no termo em $\omega \cdot \mathbf{n} < 0$ obtém-se

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \Psi_{i,g}(z, \mu) = -\frac{(1-\mu^2)^{1/2}}{2\pi A} \left\{ \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} \beta_{i,g}(x, y, \varphi) \Psi_g(x, y, z, \mu, \varphi) d\varphi ds \right. \\ \left. + \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} < 0} \omega \cdot \mathbf{n} \beta_{i,g}(x, y, \varphi) \left[\frac{1}{\pi} \sum_{g'=1}^G c_{g'-g} \int_{\Omega' \cdot \mathbf{n} > 0} \Omega' \cdot \mathbf{n} \Psi_{g'}(x, y, z, \Omega') d\Omega' \right] d\varphi ds \right. \\ \left. - \int_R \int_0^{2\pi} \Psi_g(x, y, z, \mu, \varphi) \omega \cdot \nabla \beta_{i,g}(x, y, \varphi) d\varphi dx dy \right\}. \quad (5.22)$$

Usando a relação definida pela Eq. (2.23) na integral sobre $\Omega' \cdot \mathbf{n} > 0$ e a aproximação de Ψ_g em termos das funções de base, obtém-se

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \Psi_{i,g}(z, \mu) = -\frac{(1-\mu^2)^{1/2}}{2\pi A} \\ \times \left\{ \sum_{j=1}^N \Psi_{j,g}(z, \mu) \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} \beta_{i,g}(x, y, \varphi) \alpha_{j,g}(x, y, \varphi) d\varphi ds \right. \\ \left. + \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} < 0} \omega \cdot \mathbf{n} \beta_{i,g}(x, y, \varphi) \left[\frac{1}{\pi} \sum_{g'=1}^G c_{g'-g} \int_{\omega' \cdot \mathbf{n} > 0} \omega' \cdot \mathbf{n} \sum_{j=1}^N \alpha_{j,g'}(x, y, \varphi') \right. \right. \\ \left. \left. \times \int_{-1}^1 (1-\mu'^2)^{1/2} \Psi_{j,g'}(z, \mu') d\mu' d\varphi' \right] d\varphi ds \right. \\ \left. - \sum_{j=1}^N \Psi_{j,g}(z, \mu) \int_R \int_0^{2\pi} [\omega \cdot \nabla \beta_{i,g}(x, y, \varphi)] \alpha_{j,g}(x, y, \varphi) d\varphi dx dy \right\}. \quad (5.23)$$

Definindo-se

$$a_{i,j}^g = \frac{1}{2\pi A} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} \beta_{i,g}(x, y, \varphi) \alpha_{j,g}(x, y, \varphi) d\varphi ds \\ - \int_R \int_0^{2\pi} [\omega \cdot \nabla \beta_{i,g}(x, y, \varphi)] \alpha_{j,g}(x, y, \varphi) d\varphi dx dy \quad (5.24)$$

e

$$b_{i,j}^{gg'} = \frac{1}{4\pi A} \int_{\partial R} \left(\int_{\omega \cdot \mathbf{n} < 0} |\omega \cdot \mathbf{n}| \beta_{i,g}(x, y, \varphi) d\varphi \right) \left(\int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} \alpha_{j,g'}(x, y, \varphi) d\varphi \right) ds, \quad (5.25)$$

a Eq. (5.23) pode ser expressa na forma

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial z} \Psi_{i,g}(z, \mu) + (1 - \mu^2)^{1/2} \sum_{j=1}^N a_{i,j}^g \Psi_{j,g}(z, \mu) &= \frac{2}{\pi} (1 - \mu^2)^{1/2} \\ &\times \sum_{g'=1}^G c_{g' \rightarrow g} \sum_{j=1}^N b_{i,j}^{gg'} \int_{-1}^1 (1 - \mu'^2)^{1/2} \Psi_{j,g'}(z, \mu') d\mu'. \end{aligned} \quad (5.26)$$

e está sujeita às condições de contorno

$$\Psi_{i,g}(0, \mu) = \frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} \beta_{i,g}(x, y, \varphi) F_g(x, y, \mu, \varphi) d\varphi dx dy = F_{i,g}(\mu) \quad (5.27a)$$

e

$$\Psi_{i,g}(Z, -\mu) = \frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} \beta_{i,g}(x, y, \varphi) G_g(x, y, \mu, \varphi) d\varphi dx dy = G_{i,g}(\mu), \quad (5.27b)$$

para $\mu > 0$.

As funções de base $\alpha_{i,g}$ e as funções de ponderação $\beta_{i,g}$, como definidas, só dependem da geometria do duto através de $D(x, y, \omega)$. Portanto podem ser consideradas independentes da energia, assim como as constantes $a_{i,j}^g$ e $b_{i,j}^{gg'}$, que só dependem da geometria do duto, das funções de base e das funções de ponderação.

Definindo

$$\Psi_g(z, \mu) = \begin{pmatrix} \Psi_{1,g}(z, \mu) \\ \Psi_{2,g}(z, \mu) \\ \vdots \\ \Psi_{N,g}(z, \mu) \end{pmatrix}, \quad (5.28)$$

$$\mathbf{F}_g(\mu) = \begin{pmatrix} F_{1,g}(\mu) \\ F_{2,g}(\mu) \\ \vdots \\ F_{N,g}(\mu) \end{pmatrix} \quad (5.29)$$

$$\mathbf{G}_g(\mu) = \begin{pmatrix} G_{1,g}(\mu) \\ G_{2,g}(\mu) \\ \vdots \\ G_{N,g}(\mu) \end{pmatrix}, \quad (5.30)$$

tem-se para o grupo g

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial z} \Psi_g(z, \mu) + (1 - \mu^2)^{1/2} \mathbf{A} \Psi_g(z, \mu) \\ = \frac{2}{\pi} (1 - \mu^2)^{1/2} \sum_{g'=1}^G c_{g' \rightarrow g} \mathbf{B} \int_{-1}^1 (1 - \mu'^2)^{1/2} \Psi_{g'}(z, \mu') d\mu', \end{aligned} \quad (5.31)$$

com as condições de contorno

$$\Psi_g(0, \mu) = \mathbf{F}_g(\mu) \quad (5.32a)$$

e

$$\Psi_g(Z, -\mu) = \mathbf{G}_g(\mu), \quad (5.32b)$$

para $\mu > 0$. Definindo

$$\Psi(z, \mu) = \begin{pmatrix} \Psi_1(z, \mu) \\ \Psi_2(z, \mu) \\ \vdots \\ \Psi_G(z, \mu) \end{pmatrix}, \quad (5.33)$$

$$\hat{\mathbf{A}} = \begin{pmatrix} \mathbf{A} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{0} \\ \mathbf{0} & \mathbf{A} & \dots & \mathbf{0} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \mathbf{0} & \mathbf{0} & \dots & \mathbf{A} \end{pmatrix}, \quad (5.34)$$

$$\hat{\mathbf{B}} = \begin{pmatrix} c_{1 \rightarrow 1} \mathbf{B} & c_{2 \rightarrow 1} \mathbf{B} & \dots & c_{G \rightarrow 1} \mathbf{B} \\ c_{1 \rightarrow 2} \mathbf{B} & c_{2 \rightarrow 2} \mathbf{B} & \dots & c_{G \rightarrow 2} \mathbf{B} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ c_{1 \rightarrow G} \mathbf{B} & c_{2 \rightarrow G} \mathbf{B} & \dots & c_{G \rightarrow G} \mathbf{B} \end{pmatrix}, \quad (5.35)$$

$$\mathbf{F}(\mu) = \begin{pmatrix} \mathbf{F}_1(\mu) \\ \mathbf{F}_2(\mu) \\ \vdots \\ \mathbf{F}_G(\mu) \end{pmatrix} \quad (5.36)$$

e

$$\mathbf{G}(\mu) = \begin{pmatrix} \mathbf{G}_1(\mu) \\ \mathbf{G}_2(\mu) \\ \vdots \\ \mathbf{G}_G(\mu) \end{pmatrix}, \quad (5.37)$$

pode-se escrever a equação matricial de ordem $N \times G$ para todos os grupos de energia, ao mesmo tempo, como

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial z} \Psi(z, \mu) + (1 - \mu^2)^{1/2} \hat{\mathbf{A}} \Psi(z, \mu) \\ = \frac{2}{\pi} (1 - \mu^2)^{1/2} \hat{\mathbf{B}} \int_{-1}^1 (1 - \mu'^2)^{1/2} \Psi(z, \mu') d\mu', \end{aligned} \quad (5.38)$$

sujeita às condições de contorno

$$\Psi(0, \mu) = \mathbf{F}(\mu) \quad (5.39a)$$

e

$$\Psi(Z, -\mu) = \mathbf{G}(\mu), \quad (5.39b)$$

para $\mu > 0$.

5.2 Implementação Computacional

A implementação do modelo dependente da energia também foi feita aplicando-se diretamente o método das ordenadas discretas, sem utilizar a decomposição em componente não-colidido e colidido. Assim, a Eq. (5.38) pode ser expressa no intervalo $\Delta_k = z_k - z_{k-1}$, como

$$\frac{\mu_i}{\Delta_k} [\Psi_{k,i} - \Psi_{k-1,i}] + (1 - \mu_i^2)^{1/2} \hat{\mathbf{A}} \bar{\Psi}_{k,i} = \frac{2}{\pi} (1 - \mu_i^2)^{1/2} \hat{\mathbf{B}} \sum_{j=1}^M \omega_j \bar{\Psi}_{k,j}, \quad (5.40)$$

onde foram utilizadas definições de $\Psi_{k,i}$ e $\bar{\Psi}_{k,i}$ análogas às apresentadas na Seção 3.3 do Capítulo 3, para o caso monoenergético. Utilizando o esquema de "diamond difference", as equações resultantes, para valores de i tais que $\mu_i > 0$, podem ser escritas como

$$\mathbf{M}_{k,i}^+ \Psi_{k,i} = \mathbf{M}_{k,i}^- \Psi_{k-1,i} + \mathbf{S}_{k,i} \quad (5.41a)$$

e para valores de i tais que $\mu_i < 0$, como

$$\mathbf{M}_{k,i}^+ \Psi_{k-1,i} = \mathbf{M}_{k,i}^- \Psi_{k,i} + \mathbf{S}_{k,i}, \quad (5.41b)$$

onde

$$\mathbf{M}_{k,i}^\pm = \mathbf{I} \pm \frac{1}{2|\mu_i|} (1 - \mu_i^2)^{1/2} \Delta_k \hat{\mathbf{A}}, \quad (5.42)$$

e

$$\mathbf{S}_{k,i} = \frac{\Delta_k}{\pi|\mu_i|} (1 - \mu_i^2)^{1/2} \hat{\mathbf{B}} \sum_{j=1}^M \omega_j (\Psi_{k-1,j} + \Psi_{k,j}), \quad (5.43)$$

e $\Psi_{k,i}$ e $\Psi_{k-1,i}$ são vetores coluna com $N \times G$ componentes, que são os coeficientes $\Psi_{j,g}(z, \mu)$ na Eq. (5.15), a serem determinados.

As condições de contorno são dadas por

$$\Psi_{0,i} = \mathbf{F}_i, \quad (5.44a)$$

para valores de i tais que $\mu_i > 0$, e

$$\Psi_{K,i} = \mathbf{G}_i, \quad (5.44b)$$

para valores de i tais que $\mu_i < 0$.

Similarmente à Seção 3.3, é usada a técnica de varredura e o sistema de equações definido pela Eq. (5.41) é solucionado por meio das rotinas do sistema LINPACK.⁷

6 RESULTADOS NUMÉRICOS

Todos os resultados numéricos do trabalho foram obtidos por meio de um computador pessoal equipado com um processador Pentium de 166 MHz e 32 Mbytes de memória RAM.

6.1 Modelo $N = 2$

Nesta seção são analisados os resultados da abordagem por decomposição em componentes não-colidido e colidido para o modelo $N = 2$, comparados com os resultados da implementação direta do método das ordenadas discretas. São apresentados também, os resultados da utilização da aproximação dupla de ordenadas discretas com as quadraturas de ordem $M = 2m$, baseadas nas quadraturas não-clássicas de semi-intervalo de ordem m . Estes resultados são comparados com os das quadraturas baseadas nos polinômios de Chebyshev do segundo tipo $U_M(\mu)$, cujos nós e pesos são dados pelas Eqs. (4.17) e (4.18)

Em todos os problemas resolvidos, é considerado um duto finito de seção circular com uma distribuição isotrópica e uniforme de partículas incidentes na extremidade $z = 0$, especificada como $\mathbf{F}(\mu) = (1 \ 0)^T$, e $\mathbf{G}(\mu) = \mathbf{0}$ na outra extremidade ($z = Z$). O comprimento do duto (Z) é tomado em múltiplos do raio do duto (ρ).

6.1.1 Efeito da Abordagem por Decomposição

Com a finalidade de verificar as vantagens da decomposição do problema, os resultados numéricos, tanto para a abordagem padrão quanto para a abordagem por decomposição, foram obtidos usando as quadraturas gaussianas de ordem M baseadas

nos polinômios de Chebyshev.

Na Tabela 6.1 são apresentados os resultados numéricos para as probabilidades de reflexão (R) e de transmissão (T), dadas por

$$R = 2 \int_0^1 \mu \Psi_1(0, -\mu) d\mu \quad (6.1)$$

$$T = 2 \int_0^1 \mu \Psi_1(Z, \mu) d\mu, \quad (6.2)$$

em função da probabilidade de reflexão na parede, c , e do comprimento do duto, Z , com os respectivos tempos de processamento, em segundos. Utilizou-se discretização espacial uniforme com 80 intervalos para $Z = 1$ e 320 intervalos para $Z = 20$.

Na aproximação padrão de ordenadas discretas com quadratura de Gauss-Chebyshev as probabilidades de reflexão e transmissão são calculadas como

$$R = 2 \sum_{i=m+1}^M \omega_i |\mu_i| (1 - \mu_i^2)^{-1/2} \Psi_1(0, \mu_i) \quad (6.3)$$

$$T = 2 \sum_{i=1}^m \omega_i \mu_i (1 - \mu_i^2)^{-1/2} \Psi_1(Z, \mu_i), \quad (6.4)$$

onde $m = M/2$ e $\Psi_1(0, \mu_i)$, $i = m + 1, m + 2, \dots, M$, e $\Psi_1(Z, \mu_i)$, $i = 1, 2, \dots, m$, são os resultados de ordenadas discretas do primeiro componente dos vetores de coeficientes $\Psi(0, \mu_i)$, $\mu_i < 0$, e $\Psi(Z, \mu_i)$, $\mu_i > 0$, respectivamente.

Na abordagem por decomposição, R e T são calculadas como

$$R = 2 \sum_{i=m+1}^M \omega_i |\mu_i| (1 - \mu_i^2)^{-1/2} \Psi_{*1}(0, \mu_i) \quad (6.5)$$

$$T = 2 \int_0^1 \mu T_{11}(Z, \mu) e^{-\lambda_R(1-\mu^2)^{1/2}Z/\mu} + 2 \sum_{i=1}^m \omega_i \mu_i (1 - \mu_i^2)^{-1/2} \Psi_{*1}(Z, \mu_i), \quad (6.6)$$

onde $\Psi_{*1}(0, \mu_i)$, $i = m + 1, m + 2, \dots, M$, e $\Psi_{*1}(Z, \mu_i)$, $i = 1, 2, \dots, m$, são os resultados do cálculo de ordenadas discretas para o primeiro componente dos vetores de coeficientes $\Psi_*(0, \mu_i)$, $\mu_i < 0$, e $\Psi_*(Z, \mu_i)$, $\mu_i > 0$, respectivamente e $T_{11}(Z, \mu)$ é o elemento (1, 1) da

matriz $\mathbf{T}(z, \mu)$ definida pela Eq. (3.21) para $z = Z$. Foi verificado que a contribuição do componente não-colidido, representada pelo termo integral na Eq. (6.6), pode ser calculada precisamente com uma quadratura de Gauss-Legendre de ordem 200, deslocada para $[0, 1]$, sendo a mesma quadratura usada para calcular os vetores \mathbf{L}_k da Eq. (3.33), que são utilizados para definir os vetores de fonte média $\{\bar{\mathbf{Q}}_{k,i}\}$ definidos pela Eq. (3.32).

Dos resultados da Tabela 6.1 conclui-se que a abordagem por decomposição resulta em uma pequena melhora sobre a abordagem padrão nas probabilidades de reflexão. Mas, por outro lado, obtém-se uma melhora substancial nas probabilidades de transmissão, especialmente no caso de dutos longos. Ainda na abordagem por decomposição, esta necessita de uma ordem de quadratura muito menor do que na abordagem padrão, para se obter resultados precisos para as probabilidades de reflexão e transmissão.

Como ilustração, são apresentadas na Figura 6.1, para $c = 0,2$ e $Z = 1$, as contribuições não-colidida e colidida de $\Psi_1(Z, \mu)$, $\mu > 0$, o primeiro componente do vetor de coeficientes $\Psi(z, \mu)$, $\mu > 0$. O pico da contribuição não-colidida praticamente coincide com a contribuição total ao redor de $\mu = 1$ e a contribuição colidida é suave para todo μ . Nota-se também que $\Psi_1(Z, \mu)$ é levemente negativa entre $\mu = 0,2$ e $\mu = 0,4$, devido ao modelo ser aproximado, como citado na Ref. 22.

6.1.2 Efeito da Utilização de Quadraturas Duplas

Na Tabela 6.2 são apresentados resultados para as probabilidades de reflexão e transmissão, calculadas com as quadraturas de Chebyshev e com as quadraturas duplas de ordem $M = 2m$, baseadas nas quadraturas de semi-intervalo geradas na Seção 3.5 e os respectivos tempos de processamento, em segundos. Nos dois casos foi utilizada a aproximação por decomposição, com o mesmo esquema de discretização espacial utilizado na Sub-Seção 6.1.1. Na probabilidade de transmissão, o termo integral da Eq. (6.6), correspondente à parte não-colidida, foi calculado utilizando uma quadratura de Gauss-Legendre de ordem 200, deslocada para $[0, 1]$. As probabilidades de reflexão convergem muito mais rapidamente para o esquema de quadraturas duplas

do que para o esquema de Chebyshev, quando a ordem de quadratura aumenta. As probabilidades de transmissão convergem mais rápido somente para dutos mais curtos ($Z = 1$); para dutos longos ($Z = 20$) a convergência é aproximadamente da mesma ordem para ambos os esquemas.

A razão para estes resultados pode ser entendida com a ajuda dos resultados nas Tabelas 6.3 e 6.4, que são os primeiros coeficientes dos fluxos angulares nas bordas dos dutos, com precisão dentro de ± 1 no último algarismo dado, para dois casos da Tabela 6.2. Estes resultados foram obtidos com o uso das quadraturas duplas de ordem $M = 128$, com discretização espacial de 640 intervalos para o caso da Tabela 6.3 e 2560 intervalos para o caso da Tabela 6.4. Para se obter estes resultados, foram adicionados valores de μ e seus respectivos valores negativos ao esquema das quadraturas duplas como nós mudos, isto é, nós com pesos correspondentes zero. Considerando os resultados para $\mu \approx 0$ na Tabela 6.3, e levando-se em conta as condições de contorno, a descontinuidade para $\mu = 0$ no primeiro coeficiente do fluxo angular em $z = 0$ tem uma magnitude $|\Psi_1(0, 0^+) - \Psi_1(0, 0^-)| \simeq 0.895$ para $c = 0,2$ e $Z = 1$. Similarmente, a descontinuidade para $\mu = 0$ no primeiro coeficiente do fluxo angular em $z = Z$ tem magnitude $|\Psi_1(Z, 0^+) - \Psi_1(Z, 0^-)| \simeq 0.037$. Por outro lado, considerando os resultados para $\mu \approx 0$ na Tabela 6.4, para $c = 0,2$ e $Z = 20$, temos para a descontinuidade em $z = 0$ uma magnitude de $\sim 0,894$ e para a descontinuidade em $z = Z$ uma magnitude de somente $\sim 0,000029$. A vantagem de utilizar uma quadratura separada para cada intervalo $[-1, 0]$ e $[0, 1]$, no lugar da quadratura simples para a aproximação do termo integral na equação de transporte, é a melhor capacidade da primeira para representar descontinuidades no fluxo angular para $\mu = 0$ nas extremidades do duto. Entretanto, verifica-se que o grau de melhoramento obtido nos resultados das probabilidades de reflexão e transmissão é proporcional à magnitude das descontinuidades no primeiro coeficiente do fluxo angular, nas extremidades correspondentes do duto.

Ainda pelos resultados da Tabela 6.2, nota-se que, enquanto as probabilidades de reflexão para as quadraturas duplas são sempre mais precisas do que as das quadraturas de Chebyshev, as probabilidades de transmissão para baixas ordens ($M \leq 32$), calculadas com as quadraturas duplas, são um pouco menos precisas que as calculadas com o esquema de Chebyshev, no caso de dutos longos ($Z = 20$). Isto pode ser explicado com auxílio da Figura 6.2. Quando o valor de Z cresce, a contribuição

da parte colidida no primeiro coeficiente do fluxo angular em $z = Z$ também apresenta um pico próximo de $\mu = 1,0$, apesar de não ser tão pronunciado como no caso do pico do componente não-colidido. Observando que os nós das quadraturas de Chebyshev são sempre mais deslocadas para a direção $\mu = 1,0$, quando comparados aos nós das quadraturas duplas de mesma ordem, conclui-se que o esquema de Chebyshev é capaz de descrever o efeito deste pico com maior eficiência, em baixa ordem e para dutos longos, do que o esquema de quadraturas duplas. O desenvolvimento de soluções explícitas para partículas de uma colisão, duas colisões, etc., do mesmo modo que foi feito para o problema não-colidido, pode melhorar os resultados da probabilidade de transmissão para baixas ordens de aproximação, provavelmente com comprometimento da eficiência computacional.

Tabela 6.1: Probabilidades de Reflexão e Transmissão Obtidas de Cálculos de Ordenadas Discretas Usando as Abordagens Padrão e por Decomposição

Parâmetros do Duto		Ordem da Quadratura	Abordagem Padrão			Abordagem por Decomposição		
c	Z	M	R	T	t (s)	R	T	t (s)
0,2	1	10	4,8364(-2) ^a	4,0392(-1)	<0,1	4,7222(-2)	4,1451(-1)	0,4
		20	4,7050(-2)	4,1147(-1)	<0,1	4,6749(-2)	4,1436(-1)	0,4
		40	4,6694(-2)	4,1356(-1)	0,1	4,6617(-2)	4,1432(-1)	0,6
		80	4,6603(-2)	4,1411(-1)	0,3	4,6583(-2)	4,1431(-1)	0,8
		160	4,6579(-2)	4,1425(-1)	0,7	4,6574(-2)	4,1431(-1)	1,4
		320	4,6574(-2)	4,1429(-1)	1,4	4,6572(-2)	4,1431(-1)	2,6
		640	4,6572(-2)	4,1430(-1)	3,0	4,6571(-2)	4,1431(-1)	6,0
0,2	20	10	5,5915(-2)	-1,6039(-4)	0,2	5,4694(-2)	2,4464(-3)	1,5
		20	5,4531(-2)	-4,4006(-4)	0,4	5,4204(-2)	2,4847(-3)	1,9
		40	5,4160(-2)	1,5101(-3)	1,1	5,4070(-2)	2,5009(-3)	3,0
		80	5,4065(-2)	2,2482(-3)	2,8	5,4034(-2)	2,5011(-3)	5,0
		160	5,4040(-2)	2,4379(-3)	6,0	5,4025(-2)	2,5011(-3)	10,0
		320	5,4034(-2)	2,4855(-3)	15,8	5,4023(-2)	2,5011(-3)	20,3
		640	5,4033(-2)	2,4975(-3)	26,7	5,4022(-2)	2,5011(-3)	43,6
0,5	1	10	1,3538(-1)	4,7588(-1)	<0,1	1,3234(-1)	4,8546(-1)	0,4
		20	1,3222(-1)	4,8262(-1)	0,1	1,3141(-1)	4,8524(-1)	0,5
		40	1,3135(-1)	4,8449(-1)	0,2	1,3114(-1)	4,8519(-1)	0,7
		80	1,3113(-1)	4,8499(-1)	0,5	1,3107(-1)	4,8517(-1)	1,0
		160	1,3107(-1)	4,8511(-1)	1,1	1,3105(-1)	4,8516(-1)	1,9
		320	1,3105(-1)	4,8515(-1)	2,2	1,3105(-1)	4,8516(-1)	3,4
		640	1,3105(-1)	4,8515(-1)	5,1	1,3105(-1)	4,8516(-1)	8,1
0,5	20	10	1,7019(-1)	-2,4968(-4)	0,4	1,6679(-1)	2,5045(-3)	1,9
		20	1,6668(-1)	-2,9632(-4)	0,9	1,6576(-1)	2,6684(-3)	2,7
		40	1,6573(-1)	1,7312(-3)	2,3	1,6547(-1)	2,7224(-3)	5,0
		80	1,6548(-1)	2,4701(-3)	5,4	1,6540(-1)	2,7229(-3)	9,1
		160	1,6542(-1)	2,6597(-3)	12,4	1,6538(-1)	2,7229(-3)	18,5
		320	1,6540(-1)	2,7073(-3)	26,9	1,6537(-1)	2,7229(-3)	41,2
		640	1,6540(-1)	2,7192(-3)	52,4	1,6537(-1)	2,7229(-3)	91,1
0,8	1	10	2,4727(-1)	5,7267(-1)	<0,1	2,4199(-1)	5,8091(-1)	0,4
		20	2,4247(-1)	5,7869(-1)	0,1	2,4104(-1)	5,8095(-1)	0,5
		40	2,4114(-1)	5,8036(-1)	0,3	2,4077(-1)	5,8096(-1)	0,7
		80	2,4079(-1)	5,8080(-1)	0,6	2,4070(-1)	5,8096(-1)	1,3
		160	2,4070(-1)	5,8092(-1)	1,3	2,4068(-1)	5,8096(-1)	2,3
		320	2,4068(-1)	5,8095(-1)	2,8	2,4067(-1)	5,8096(-1)	4,5
		640	2,4067(-1)	5,8095(-1)	6,2	2,4067(-1)	5,8096(-1)	10,1
0,8	20	10	3,7543(-1)	-2,5481(-4)	1,3	3,6887(-1)	2,9990(-3)	2,8
		20	3,6954(-1)	6,2302(-4)	2,7	3,6773(-1)	3,6861(-3)	4,8
		40	3,6790(-1)	2,8305(-3)	7,1	3,6740(-1)	3,8218(-3)	9,7
		80	3,6747(-1)	3,5701(-3)	13,9	3,6731(-1)	3,8227(-3)	19,4
		160	3,6736(-1)	3,7592(-3)	32,5	3,6729(-1)	3,8225(-3)	40,8
		320	3,6733(-1)	3,8067(-3)	74,4	3,6728(-1)	3,8224(-3)	83,9
		640	3,6733(-1)	3,8187(-3)	161,5	3,6728(-1)	3,8224(-3)	177,4

^aLeia-se $4,8364 \times 10^{-2}$.

Tabela 6.2: Probabilidades de Reflexão e Transmissão Obtidas de Cálculos de Ordenadas Discretas Usando Esquemas de Quadratura de Chebyshev e de Quadratura Dupla

Parâmetros do Duto		Ordem da Quadratura	Quadratura de Chebyshev			Quadratura Dupla		
c	Z		M	R	T	t (s)	R	T
0,2	1	2	5,6861(-2) ^a	4,2400(-1)	0,4	5,2615(-2)	4,1724(-1)	0,4
		4	5,0042(-2)	4,1530(-1)	0,4	4,6349(-2)	4,1333(-1)	0,4
		8	4,7511(-2)	4,1445(-1)	0,4	4,6583(-2)	4,1430(-1)	0,4
		16	4,6848(-2)	4,1440(-1)	0,4	4,6571(-2)	4,1431(-1)	0,4
		32	4,6643(-2)	4,1433(-1)	0,5	4,6571(-2)	4,1431(-1)	0,5
		64	4,6589(-2)	4,1431(-1)	0,8	4,6571(-2)	4,1431(-1)	0,8
		128	4,6576(-2)	4,1431(-1)	1,2	4,6571(-2)	4,1431(-1)	1,2
0,2	20	2	6,2028(-2)	2,4539(-3)	1,3	5,5233(-2)	2,4483(-3)	1,3
		4	5,7201(-2)	2,4584(-3)	1,4	5,3885(-2)	2,4555(-3)	1,4
		8	5,5027(-2)	2,4566(-3)	1,5	5,4010(-2)	2,4599(-3)	1,5
		16	5,4301(-2)	2,4651(-3)	1,8	5,4024(-2)	2,4436(-3)	1,8
		32	5,4095(-2)	2,4999(-3)	2,6	5,4023(-2)	2,4921(-3)	2,5
		64	5,4041(-2)	2,5011(-3)	4,2	5,4022(-2)	2,5011(-3)	4,4
		128	5,4027(-2)	2,5011(-3)	7,7	5,4022(-2)	2,5011(-3)	7,7
0,5	1	2	1,4988(-1)	5,0425(-1)	0,4	1,4272(-1)	4,9120(-1)	0,4
		4	1,3796(-1)	4,8720(-1)	0,4	1,3058(-1)	4,8281(-1)	0,4
		8	1,3293(-1)	4,8530(-1)	0,4	1,3108(-1)	4,8515(-1)	0,4
		16	1,3160(-1)	4,8531(-1)	0,4	1,3105(-1)	4,8516(-1)	0,4
		32	1,3119(-1)	4,8520(-1)	0,6	1,3105(-1)	4,8516(-1)	0,6
		64	1,3108(-1)	4,8517(-1)	0,9	1,3105(-1)	4,8516(-1)	0,9
		128	1,3106(-1)	4,8517(-1)	1,6	1,3105(-1)	4,8516(-1)	1,6
0,5	20	2	1,7989(-1)	2,5224(-3)	1,4	1,6217(-1)	2,5021(-3)	1,4
		4	1,7176(-1)	2,5444(-3)	1,5	1,6429(-1)	2,5333(-3)	1,5
		8	1,6747(-1)	2,5334(-3)	1,8	1,6530(-1)	2,5501(-3)	1,7
		16	1,6597(-1)	2,5985(-3)	2,3	1,6537(-1)	2,5050(-3)	2,4
		32	1,6553(-1)	2,7191(-3)	4,0	1,6537(-1)	2,6934(-3)	4,1
		64	1,6541(-1)	2,7230(-3)	7,3	1,6537(-1)	2,7228(-3)	7,5
		128	1,6538(-1)	2,7229(-3)	14,8	1,6537(-1)	2,7229(-3)	15,2
0,8	1	2	2,5435(-1)	5,9749(-1)	0,4	2,5105(-1)	5,8536(-1)	0,4
		4	2,4740(-1)	5,8184(-1)	0,4	2,4080(-1)	5,7808(-1)	0,4
		8	2,4267(-1)	5,8056(-1)	0,4	2,4070(-1)	5,8096(-1)	0,4
		16	2,4123(-1)	5,8097(-1)	0,5	2,4067(-1)	5,8096(-1)	0,5
		32	2,4082(-1)	5,8096(-1)	0,7	2,4067(-1)	5,8096(-1)	0,7
		64	2,4071(-1)	5,8096(-1)	1,1	2,4067(-1)	5,8096(-1)	1,1
		128	2,4068(-1)	5,8096(-1)	1,9	2,4067(-1)	5,8096(-1)	1,9
0,8	20	2	3,7569(-1)	2,7304(-3)	1,6	3,4616(-1)	2,6577(-3)	1,6
		4	3,7331(-1)	2,8746(-3)	1,9	3,6300(-1)	2,8099(-3)	1,9
		8	3,6958(-1)	2,9565(-3)	2,5	3,6686(-1)	2,9363(-3)	2,5
		16	3,6797(-1)	3,4845(-3)	3,8	3,6727(-1)	3,0945(-3)	3,9
		32	3,6746(-1)	3,8145(-3)	7,6	3,6728(-1)	3,7517(-3)	7,7
		64	3,6733(-1)	3,8229(-3)	15,2	3,6728(-1)	3,8228(-3)	15,4
		128	3,6729(-1)	3,8225(-3)	32,1	3,6728(-1)	3,8226(-3)	32,2

^aLeia-se $5,6861 \times 10^{-2}$.

Tabela 6.3: Primeiros Coeficientes dos Fluxos Angulares para o Caso
 $c = 0,2$ e $Z = 1$ Calculados com 640 Intervalos Espaciais

μ	Refletido em $z = 0$	Transmitido em $z = Z$		
	Total (= Colidido) $\Psi_1(0, -\mu)$	Não-Colidido $\Psi_{01}(Z, \mu)$	Colidido $\Psi_{*1}(Z, \mu)$	Total $\Psi_1(Z, \mu)$
0,001	1,051(-01) ^a	0,0	3,671(-02)	3,671(-02)
0,01	1,058(-01)	-3,230(-50)	3,696(-02)	3,696(-02)
0,1	1,009(-01)	6,523(-06)	4,020(-02)	4,021(-02)
0,2	9,283(-02)	-4,368(-03)	4,510(-02)	4,073(-02)
0,3	8,475(-02)	-1,242(-02)	5,221(-02)	3,979(-02)
0,4	7,546(-02)	2,610(-02)	5,566(-02)	8,175(-02)
0,5	6,526(-02)	1,122(-01)	5,413(-02)	1,663(-01)
0,6	5,482(-02)	2,269(-01)	4,914(-02)	2,761(-01)
0,7	4,439(-02)	3,581(-01)	4,196(-02)	4,000(-01)
0,8	3,379(-02)	5,026(-01)	3,316(-02)	5,358(-01)
0,9	2,213(-02)	6,702(-01)	2,228(-02)	6,925(-01)
1,0	0,0	1,0	0,0	1,0

^aLeia-se $1,051 \times 10^{-01}$.

Tabela 6.4: Primeiros Coeficientes dos Fluxos Angulares para o Caso
 $c = 0,2$ e $Z = 20$ Calculados com 2560 Intervalos Espaciais

μ	Refletido em $z = 0$	Transmitido em $z = Z$		
	Total (= Colidido) $\Psi_1(0, -\mu)$	Não-Colidido $\Psi_{01}(Z, \mu)$	Colidido $\Psi_{*1}(Z, \mu)$	Total $\Psi_1(Z, \mu)$
0,001	1,060(-01) ^a	0,0	2,862(-05)	2,862(-05)
0,01	1,066(-01)	0,0	2,863(-05)	2,863(-05)
0,1	1,018(-01)	1,990(-99)	2,913(-05)	2,913(-05)
0,2	9,362(-02)	-2,406(-49)	2,980(-05)	2,980(-05)
0,3	8,554(-02)	4,125(-32)	3,050(-05)	3,050(-05)
0,4	7,777(-02)	-3,397(-24)	3,127(-05)	3,127(-05)
0,5	7,017(-02)	-3,130(-18)	3,213(-05)	3,213(-05)
0,6	6,249(-02)	-2,188(-14)	3,317(-05)	3,317(-05)
0,7	5,436(-02)	-9,560(-11)	3,454(-05)	3,454(-05)
0,8	4,510(-02)	1,788(-08)	3,663(-05)	3,665(-05)
0,9	3,301(-02)	1,215(-05)	4,259(-05)	5,474(-05)
1,0	0,0	1,0	0,0	1,0

^aLeia-se $1,060 \times 10^{-01}$.

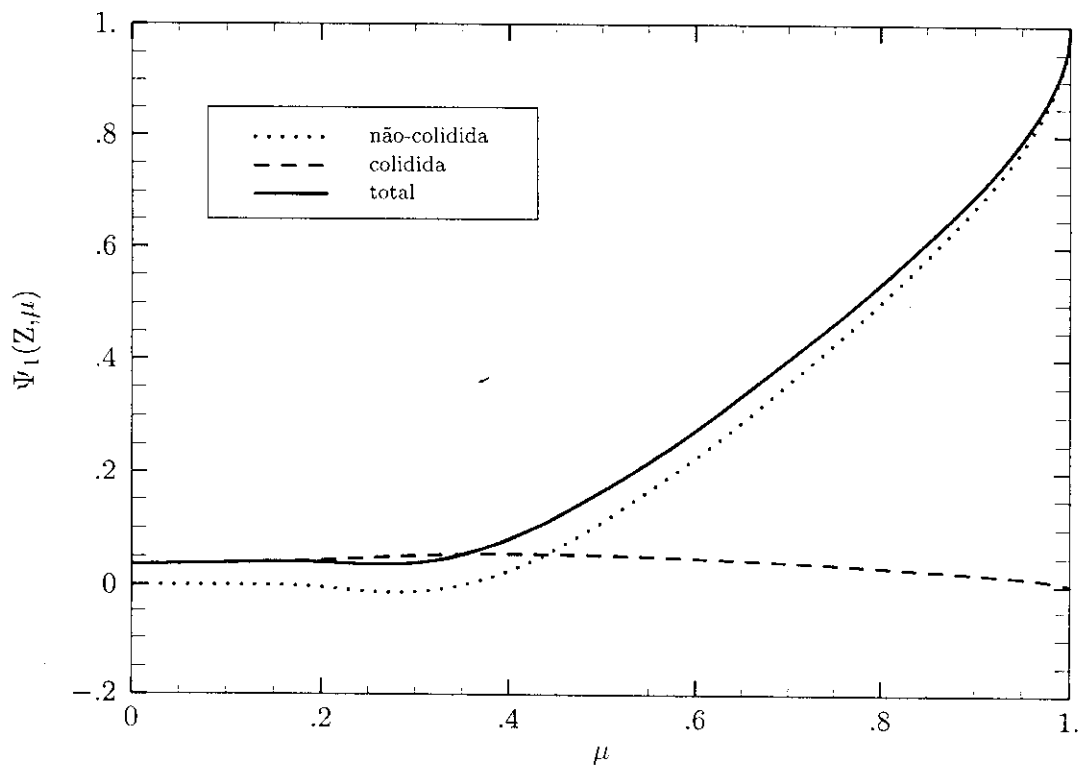


Figura 6.1 Contribuições não-colidida e colidida para $\Psi_1(Z, \mu)$, $\mu > 0$, para o caso $c = 0.2$ e $Z = 1$

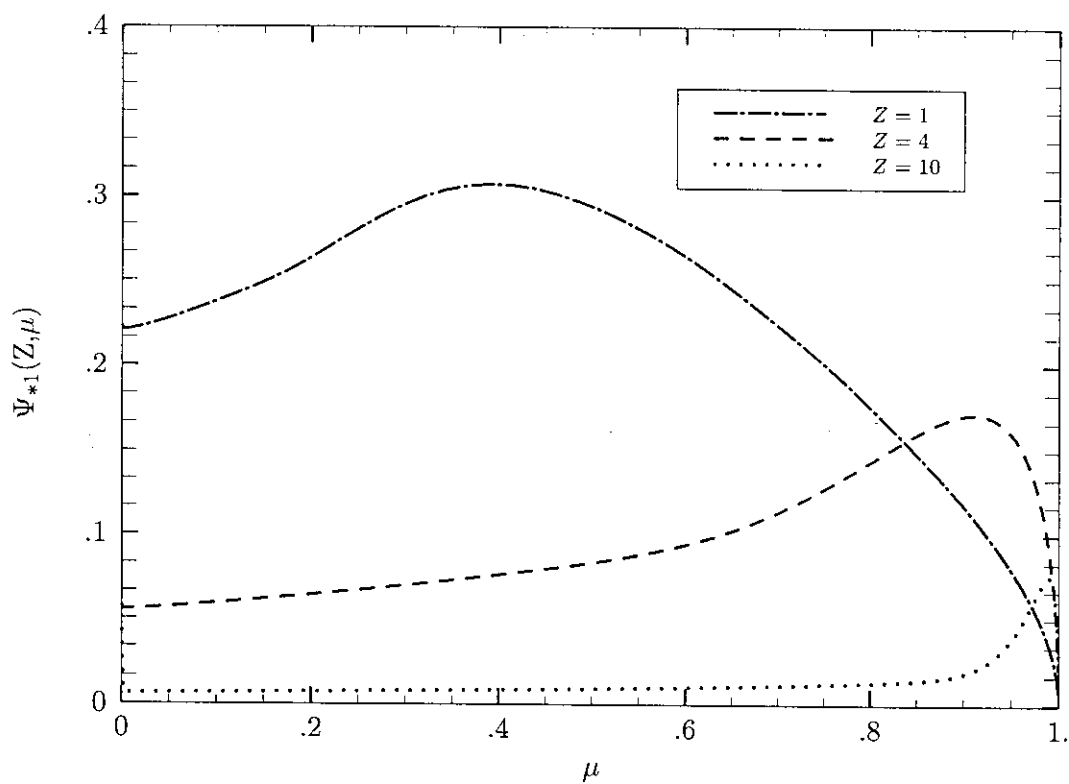


Figura 6.2 Contribuição colidida para $\Psi_1(Z, \mu)$, $\mu > 0$, para dutos com $c = 0,8$

6.2 Modelo $N = 3$

O problema-teste considerado é de um duto de comprimento finito, seção circular, com uma distribuição isotrópica e uniforme de partículas incidindo na extremidade $z = 0$. Nas Tabelas 6.5 e 6.6 são apresentados os resultados das aproximações $N = 1$, $N = 2$, $N = 3$ e os resultados Monte Carlo para as probabilidades de reflexão e de transmissão definidas pelas Eqs. (6.1) e (6.2), respectivamente, em função da probabilidade de reflexão na parede, c , e do comprimento do duto, Z , em múltiplos do raio. Nas três aproximações, os dutos de comprimento $Z = 0,1$ e $Z = 1,0$ são discretizados uniformemente em 80 intervalos e o de $Z = 10$ em 160 intervalos espaciais. Em todos os casos, para discretização angular do modelo aproximado, utilizou-se 640 nós da quadratura de Chebyshev do segundo tipo. Os resultados de referência foram obtidos com o código MCNP, modificado como descrito no Apêndice D e processado com 10^7 histórias. Para uma quadratura de ordem M , as probabilidades de reflexão e de transmissão são aproximadas conforme as Eqs. (6.3) e (6.4), respectivamente.

Na Tabela 6.7 são apresentados os desvios dos resultados dos modelos aproximados relativos ao resultado Monte Carlo, definidos como

$$\text{desvio percentual em } R = \frac{R_{ma} - R_{MC}}{R_{MC}} \times 100 \quad (6.7a)$$

e

$$\text{desvio percentual em } T = \frac{T_{ma} - T_{MC}}{T_{MC}} \times 100, \quad (6.7b)$$

onde os índices ma e MC representam, respectivamente, *modelo aproximado* e *Monte Carlo*. Analisando estes desvios percentuais, pode-se notar, como era esperado, que o modelo $N = 3$ é o mais preciso dos modelos aproximados. Existem apenas dois casos, para $c = 0,2$ e $Z = 10$ e $c = 0,3$ e $Z = 10$, nas probabilidades de transmissão, onde o modelo $N = 2$ apresenta desvio levemente menor do que o modelo $N = 3$. Isto ocorreu pelo fato das probabilidades de transmissão serem muito próximas dos valores corretos e os correspondentes desvios padrão do Monte Carlo serem relativamente altos, fazendo com que seja difícil determinar qual destes resultados é o melhor com o grau de discretização e o número de histórias utilizados. Refinando a discretização com 720 direções e 320 intervalos espaciais obteve-se, para os cálculos das aproximações $N = 2$,

$T = 0,010520$ para $c = 0,2$ e $Z = 10$ e $T = 0,011075$ para $c = 0,3$ e $Z = 10$. No caso da aproximação $N = 3$, obteve-se $T = 0,010511$ para $c = 0,2$ e $Z = 10$ e $T = 0,011047$ para $c = 0,3$ e $Z = 10$. e aumentando o número de histórias no processamento do MCNP para 10^9 obteve-se $T = 0,010515$ para $c = 0,2$ e $Z = 10$ e $T = 0,011051$ para $c = 0,3$ e $Z = 10$. Portanto, para ambos os casos, observou-se que os resultados da aproximação $N = 3$ são, de fato, mais próximos dos resultados Monte Carlo do que os correspondentes resultados da aproximação $N = 2$.

Analisando, ainda, os resultados dos desvios das probabilidades de reflexão e transmissão conclui-se que, para dutos de pequeno comprimento ($Z < 1$), o modelo $N = 3$ não descreve tão bem as probabilidades de reflexão quanto nos dutos de comprimento maior ($Z \geq 1$). Para estes dutos mais longos, os desvios são menores que 0,4%, tanto para as probabilidades de reflexão quanto transmissão. Os desvios maiores (3 – 5%) observados nas probabilidades de reflexão, calculadas com o modelo $N = 3$ para $Z = 0,1$, são atribuídos ao fato das funções de base escolhidas serem mais adequadas para dutos longos. o que faz com que o modelo aproximado não consiga representar, adequadamente, os efeitos de borda nas extremidades do duto.

A Tabela 6.8 apresenta os tempos de execução dos três modelos aproximados e os do código MCNP para o cálculo das probabilidades de reflexão e de transmissão apresentados nas Tabelas 6.6 e 6.7. Nos modelos aproximados, implementados com o método das ordenadas discretas, não é utilizado nenhum método de aceleração de convergência. O tempo de processamento do modelo $N = 3$ é cerca de 2 – 3,5 vezes maior do que o do modelo $N = 2$, mas é cerca de uma a duas ordens de magnitude menor do que o do correspondente processamento Monte Carlo com 10^7 histórias. O tempo de processamento do modelo $N = 3$ também é inferior ao de Monte Carlo com 10^5 histórias, exceto para dutos longos com alta probabilidade de reflexão na parede. Para estes casos, a introdução de técnicas de aceleração no método das ordenadas discretas usado na implementação dos modelos, poderia reduzir os tempos de processamento destes modelos. O procedimento de decomposição em componente não-colidido e colidido, com o novo esquema de quadraturas apresentado no Capítulo 3, pode também reduzir o tempo de processamento, uma vez que, neste caso, o cálculo de ordenadas discretas requer menor número de ordenadas.

Tabela 6.5: Probabilidades de Reflexão para os Modelos Aproximados e Monte Carlo

Parâmetros do Duto		Modelo Aproximado			Monte Carlo	
c	Z	$N = 1$	$N = 2$	$N = 3$	10^7 histórias	10^5 histórias
0,1	0,1	0,003847	0,004958	0,004317	$0,0045453 \pm 0,0000064$	$0,0044950 \pm 0,0000652$
	1,0	0,01457	0,02246	0,02162	$0,021682 \pm 0,000013$	$0,021752 \pm 0,000128$
	10,0	0,01773	0,02559	0,02495	$0,025031 \pm 0,000012$	$0,025124 \pm 0,000133$
0,2	0,1	0,007796	0,009920	0,008698	$0,0091350 \pm 0,0000128$	$0,0090301 \pm 0,0001309$
	1,0	0,03064	0,04657	0,04491	$0,045023 \pm 0,000027$	$0,045165 \pm 0,000253$
	10,0	0,03797	0,05403	0,05283	$0,052979 \pm 0,000026$	$0,053169 \pm 0,000260$
0,3	0,1	0,01185	0,01489	0,01315	$0,013770 \pm 0,000019$	$0,013606 \pm 0,000196$
	1,0	0,04847	0,07253	0,07008	$0,070236 \pm 0,000035$	$0,070455 \pm 0,000380$
	10,0	0,06138	0,08605	0,08436	$0,084568 \pm 0,000042$	$0,084859 \pm 0,000390$
0,4	0,1	0,01602	0,01986	0,01766	$0,018450 \pm 0,000026$	$0,018222 \pm 0,000262$
	1,0	0,06838	0,1006	0,09737	$0,097574 \pm 0,000049$	$0,097876 \pm 0,000509$
	10,0	0,08897	0,1227	0,1206	$0,12083 \pm 0,00005$	$0,12123 \pm 0,00052$
0,5	0,1	0,02030	0,02483	0,02225	$0,023177 \pm 0,000032$	$0,022880 \pm 0,000329$
	1,0	0,09080	0,1310	0,1271	$0,12733 \pm 0,00006$	$0,12773 \pm 0,00064$
	10,0	0,1223	0,1654	0,1630	$0,16332 \pm 0,00006$	$0,16381 \pm 0,00064$
0,6	0,1	0,02471	0,02981	0,02691	$0,027951 \pm 0,000039$	$0,027579 \pm 0,000394$
	1,0	0,1162	0,1642	0,1596	$0,15987 \pm 0,00008$	$0,16038 \pm 0,00079$
	10,0	0,1637	0,2167	0,2142	$0,21452 \pm 0,00009$	$0,21509 \pm 0,00077$
0,7	0,1	0,02924	0,03480	0,03164	$0,032773 \pm 0,000046$	$0,032321 \pm 0,000462$
	1,0	0,1455	0,2006	0,1953	$0,19563 \pm 0,00010$	$0,19627 \pm 0,00092$
	10,0	0,2179	0,2810	0,2785	$0,27883 \pm 0,00008$	$0,27943 \pm 0,00089$
0,8	0,1	0,03390	0,03979	0,03645	$0,037643 \pm 0,000053$	$0,037104 \pm 0,000531$
	1,0	0,1794	0,2407	0,2347	$0,23513 \pm 0,00012$	$0,23593 \pm 0,00108$
	10,0	0,2943	0,3672	0,3650	$0,36531 \pm 0,00011$	$0,36579 \pm 0,00102$
0,9	0,1	0,03870	0,04478	0,04134	$0,042563 \pm 0,000060$	$0,041931 \pm 0,000600$
	1,0	0,2193	0,2850	0,2786	$0,27902 \pm 0,00014$	$0,28003 \pm 0,00126$
	10,0	0,4189	0,4997	0,4983	$0,49847 \pm 0,00010$	$0,49842 \pm 0,00115$
0,99	0,1	0,04315	0,04928	0,04580	$0,047034 \pm 0,000066$	$0,046311 \pm 0,000662$
	1,0	0,2618	0,3293	0,3224	$0,32296 \pm 0,00016$	$0,32417 \pm 0,00146$
	10,0	0,6706	0,7543	0,7540	$0,75401 \pm 0,00015$	$0,75268 \pm 0,00120$
1,0	0,1	0,04365	0,04978	0,04630	$0,047533 \pm 0,000066$	$0,046800 \pm 0,000669$
	1,0	0,2670	0,3345	0,3276	$0,32813 \pm 0,00016$	$0,32937 \pm 0,00148$
	10,0	0,7244	0,8092	0,8090	$0,80900 \pm 0,00016$	$0,80756 \pm 0,00121$

Tabela 6.6: Probabilidades de Transmissão para os Modelos Aproximados e Monte Carlo

Parâmetros do Duto		Modelo Aproximado			Monte Carlo	
c	Z	$N = 1$	$N = 2$	$N = 3$	10^7 histórias	10^5 histórias
0,1	0,1	0,9169	0,9054	0,9118	0,90945 ± 0,00000	0,90982 ± 0,00091
	1,0	0,5162	0,3947	0,3989	0,39999 ± 0,00016	0,40090 ± 0,00148
	10,0	0,04099	0,01010	0,01011	0,010132 ± 0,000031	0,010962 ± 0,000326
0,2	0,1	0,9208	0,9104	0,9162	0,91404 ± 0,00000	0,91445 ± 0,00082
	1,0	0,5290	0,4143	0,4188	0,41970 ± 0,00013	0,42041 ± 0,00147
	10,0	0,04223	0,01052	0,01051	0,010530 ± 0,000032	0,011339 ± 0,000327
0,3	0,1	0,9248	0,9153	0,9206	0,91868 ± 0,00000	0,91912 ± 0,00083
	1,0	0,5434	0,4357	0,4405	0,44123 ± 0,00013	0,44173 ± 0,00141
	10,0	0,04383	0,01107	0,01104	0,011064 ± 0,000032	0,011848 ± 0,000328
0,4	0,1	0,9289	0,9203	0,9251	0,92337 ± 0,00000	0,92384 ± 0,00073
	1,0	0,5598	0,4593	0,4643	0,46484 ± 0,00014	0,46512 ± 0,00139
	10,0	0,04599	0,01185	0,01180	0,011818 ± 0,000032	0,012575 ± 0,000332
0,5	0,1	0,9332	0,9253	0,9297	0,92810 ± 0,00000	0,92861 ± 0,00074
	1,0	0,5785	0,4851	0,4905	0,49082 ± 0,00015	0,49086 ± 0,00137
	10,0	0,04902	0,01303	0,01294	0,012959 ± 0,000032	0,013689 ± 0,000337
0,6	0,1	0,9375	0,9303	0,9343	0,93288 ± 0,00000	0,93342 ± 0,00075
	1,0	0,6001	0,5138	0,5194	0,51952 ± 0,00016	0,51933 ± 0,00135
	10,0	0,05359	0,01496	0,01483	0,014851 ± 0,000034	0,015559 ± 0,000347
0,7	0,1	0,9420	0,9352	0,9391	0,93770 ± 0,00000	0,93829 ± 0,00066
	1,0	0,6252	0,5455	0,5514	0,55138 ± 0,00011	0,55094 ± 0,00138
	10,0	0,06120	0,01858	0,01839	0,018409 ± 0,000035	0,019112 ± 0,000363
0,8	0,1	0,9466	0,9402	0,9439	0,94257 ± 0,00000	0,94321 ± 0,00066
	1,0	0,6547	0,5809	0,5872	0,58693 ± 0,00012	0,58624 ± 0,00135
	10,0	0,07587	0,02666	0,02643	0,026446 ± 0,000040	0,027166 ± 0,000399
0,9	0,1	0,9514	0,9452	0,9487	0,94750 ± 0,00000	0,94818 ± 0,00066
	1,0	0,6900	0,6207	0,6272	0,62683 ± 0,00012	0,62587 ± 0,00138
	10,0	0,1124	0,05095	0,05076	0,050776 ± 0,000051	0,051550 ± 0,000510
0,99	0,1	0,9558	0,9497	0,9532	0,95197 ± 0,00000	0,95270 ± 0,00067
	1,0	0,7282	0,6607	0,6676	0,66711 ± 0,00013	0,66590 ± 0,00146
	10,0	0,2401	0,1574	0,1576	0,15761 ± 0,00011	0,15892 ± 0,00105
1,0	0,1	0,9563	0,9502	0,9537	0,95247 ± 0,00000	0,95320 ± 0,00067
	1,0	0,7329	0,6655	0,6724	0,67187 ± 0,00013	0,67063 ± 0,00147
	10,0	0,2756	0,1908	0,1910	0,19100 ± 0,00013	0,19244 ± 0,00125

Tabela 6.7: Desvios Percentuais dos Modelos Aproximados

Parâmetros do Duto		N = 1		N = 2		N = 3	
c	Z	R	T	R	T	R	T
0,1	0,1	-15,36	0,82	9,08	-0,44	-5,02	0,26
	1,0	-32,80	29,05	3,59	-1,32	-0,29	-0,27
	10,0	-29,17	304,56	2,23	-0,32	-0,32	-0,22
0,2	0,1	-14,66	0,74	8,59	-0,40	-4,78	0,24
	1,0	-31,95	26,04	3,44	-1,29	-0,25	-0,21
	10,0	-28,33	301,04	1,98	-0,09	-0,28	-0,19
0,3	0,1	-13,94	0,67	8,13	-0,37	-4,50	0,21
	1,0	-30,99	23,16	3,27	-1,25	-0,22	-0,16
	10,0	-27,42	296,15	1,75	0,05	-0,25	-0,22
0,4	0,1	-13,17	0,60	7,64	-0,33	-4,28	0,19
	1,0	-29,92	20,43	3,10	-1,19	-0,21	-0,12
	10,0	-26,37	289,15	1,55	-0,27	-0,19	-0,15
0,5	0,1	-12,41	0,55	7,13	-0,30	-4,00	0,17
	1,0	-28,69	17,86	2,88	-1,16	-0,18	-0,065
	10,0	-25,11	278,27	1,27	0,55	-0,20	-0,15
0,6	0,1	-11,59	0,49	6,65	-0,28	-3,72	0,15
	1,0	-27,32	15,51	2,71	-1,10	-0,17	-0,023
	10,0	-23,69	260,85	1,02	0,73	-0,15	-0,14
0,7	0,1	-10,78	0,46	6,18	-0,27	-3,46	0,15
	1,0	-25,62	13,39	2,54	-1,07	-0,17	0,0036
	10,0	-21,85	232,45	0,78	0,93	-0,12	-0,10
0,8	0,1	-9,94	0,43	5,70	-0,25	-3,17	0,14
	1,0	-23,70	11,55	2,37	-1,03	-0,18	0,046
	10,0	-19,44	186,89	0,52	0,81	-0,085	-0,060
0,9	0,1	-9,08	0,41	5,21	-0,24	-2,87	0,13
	1,0	-21,40	10,08	2,14	-0,98	-0,15	0,059
	10,0	-15,96	121,36	0,25	0,34	-0,034	-0,031
0,99	0,1	-8,26	0,40	4,77	-0,24	-2,62	0,13
	1,0	-18,94	9,16	1,96	-0,96	-0,17	0,073
	10,0	-11,06	52,34	0,038	-0,13	-0,0013	-0,0063
1,0	0,1	-8,17	0,40	4,73	-0,24	-2,59	0,13
	1,0	-18,63	9,08	1,94	-0,95	-0,16	0,079
	10,0	-10,46	44,29	0,025	-0,10	0,00	0,00

Tabela 6.8: Tempos de Processamento (em segundos) dos Modelos Aproximados e Monte Carlo

Parâmetros do Duto		Modelo Aproximado			Monte Carlo	
c	Z	$N = 1$	$N = 2$	$N = 3$	10^7 histórias	10^5 histórias
0,1	0,1	1,3	1,5	4,3	1935,0	66,6
	1,0	1,7	2,4	6,4	2224,2	72,0
	10,0	4,5	8,5	17,0	4982,4	94,8
0,2	0,1	1,3	1,8	5,0	1932,6	68,4
	1,0	2,1	3,2	6,9	2249,4	72,0
	10,0	6,0	10,9	23,4	4885,2	99,6
0,3	0,1	1,5	1,7	5,0	1909,8	75,6
	1,0	2,4	3,3	8,4	2296,2	74,4
	10,0	7,6	13,9	32,4	5406,0	99,6
0,4	0,1	1,6	1,8	5,7	2068,2	73,2
	1,0	2,9	3,6	9,0	2216,4	74,4
	10,0	9,5	18,8	38,7	4957,2	102,6
0,5	0,1	1,7	1,8	5,7	1931,4	69,6
	1,0	3,1	4,2	9,5	2311,8	73,2
	10,0	11,2	22,4	46,2	5029,2	107,4
0,6	0,1	1,9	1,8	5,6	1906,8	66,0
	1,0	3,5	4,8	11,2	2249,4	66,6
	10,0	14,1	31,0	49,0	4822,2	110,4
0,7	0,1	1,9	2,1	6,6	1916,4	71,4
	1,0	3,8	5,4	11,6	2223,6	70,2
	10,0	18,9	31,0	61,8	4857,0	105,6
0,8	0,1	1,9	2,1	6,5	1953,6	67,2
	1,0	4,2	5,4	12,6	2319,0	72,0
	10,0	25,8	41,5	90,2	4812,6	102,0
0,9	0,1	2,1	2,1	6,9	1972,2	69,6
	1,0	4,7	6,1	13,5	2273,4	77,4
	10,0	39,1	64,5	135,7	4898,4	100,8
0,99	0,1	2,2	2,2	7,5	1993,2	64,8
	1,0	5,3	6,4	14,9	2214,6	72,0
	10,0	57,3	133,3	284,9	4813,2	100,8
1,0	0,1	2,0	2,1	7,1	1997,4	69,6
	1,0	5,0	6,4	15,1	2234,4	72,0
	10,0	55,5	150,6	340,8	4900,2	96,0

6.3 Modelo Dependente da Energia

Nesta seção são apresentados os resultados obtidos da implementação do modelo aproximado, dependente da energia, comparados com os obtidos do método Monte Carlo. Os dutos considerados nos problemas-teste têm as mesmas características geométricas dos problemas resolvidos nas seções anteriores.

Conforme o desenvolvimento teórico apresentado no Capítulo 5, o modelo dependente da energia utiliza albedos em multigrupo para descrever a reflexão na parede interna do duto. Estes coeficientes podem ser obtidos de cálculos de transporte que utilizam métodos como o de harmônicos esféricos, ordenadas discretas ou Monte Carlo. Neste trabalho, todos os resultados foram obtidos utilizando albedos calculados por Monte Carlo através do código MCNP. Para esse cálculo, foi feita uma simulação de um problema equivalente ao problema de um fluxo angular isotrópico incidindo uniformemente em uma placa plana infinita. O problema equivalente⁵ é definido com uma fonte pontual, com distribuição cossenoidal, incidindo no centro de uma das faces planas de um disco de 100 cm de raio e 40 cm de espessura. Estas dimensões são suficientes para uma boa representação de uma placa infinita. Utilizando um detector de superfície com raio de 100 cm obtém-se uma solução equivalente ao problema de albedo.

São apresentados resultados para o concreto de densidade 2,26 g/cm³ e para o ferro de densidade 7,86 g/cm³. Para ambos os materiais, foram efetuados cálculos para a região térmica e rápida, separadamente, com estruturas de grupos de energia definidas arbitrariamente. A composição do concreto e as estruturas de grupos de energia são fornecidas no Apêndice F. Foi utilizada a biblioteca de seções de choque contínuas em energia do MCNP, que é baseada nos dados avaliados da ENDF/B-6.²⁸ Todos os cálculos para determinação dos albedos $c_{g' \rightarrow g}$ foram feitos com 10^7 histórias e são apresentados nas Tabelas 6.9 e 6.10 para o concreto, e nas Tabelas 6.11 e 6.12 para o ferro, nas faixas térmica e rápida, respectivamente.

Obtidos os albedos, efetuou-se o cálculo de transporte de partículas no duto com as aproximações $N = 2$ e $N = 3$ e quadraturas de Gauss-Chebyshev. Para a faixa rápida utilizou-se como condição de contorno, na entrada do duto em $z = 0$, uma distribuição de partículas isotrópica incidente uniformemente, no grupo de maior

energia. Para a faixa térmica considerou-se uma fonte com distribuição maxwelliana, calculada pelo programa ACES,³ correspondendo a uma fração de 0,005869652 nêutrons no grupo 1, 0,1446582 no grupo 2 e 0,8494722 no grupo 3, tanto para o concreto quanto para o ferro.

As probabilidades de reflexão e de transmissão dependentes da energia, dadas, respectivamente, por

$$R(E) = \frac{\int_0^1 \mu \Psi_1(0, -\mu, E) d\mu}{\int_{E_{min}}^{E_{max}} \int_0^1 \mu \Psi_1(0, \mu, E) d\mu dE} \quad (6.8)$$

e

$$T(E) = \frac{\int_0^1 \mu \Psi_1(Z, \mu, E) d\mu}{\int_{E_{min}}^{E_{max}} \int_0^1 \mu \Psi_1(0, \mu, E) d\mu dE} \quad (6.9)$$

onde

$$\Psi_1(z, \mu, E) = \frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} \Psi(x, y, z, \mu, \varphi, E) d\varphi dx dy \quad (6.10)$$

são obtidas para o modelo multigrupo aproximado como

$$R_g = \frac{\sum_{i=m+1}^M \omega_i |\mu_i| (1 - \mu_i^2)^{-1/2} \Psi_{1,g}(0, \mu_i)}{\sum_{g=1}^G \sum_{i=1}^m \omega_i \mu_i (1 - \mu_i^2)^{-1/2} \Psi_{1,g}(0, \mu_i)} \quad (6.11)$$

e

$$T_g = \frac{\sum_{i=1}^m \omega_i \mu_i (1 - \mu_i^2)^{-1/2} \Psi_{1,g}(Z, \mu_i)}{\sum_{g=1}^G \sum_{i=1}^m \omega_i \mu_i (1 - \mu_i^2)^{-1/2} \Psi_{1,g}(0, \mu_i)} \quad (6.12)$$

onde $m = M/2$ e $\Psi_{1,g}(0, \mu_i)$, $i = m+1, m+2, \dots, M$, e $\Psi_{1,g}(Z, \mu_i)$, $i = 1, 2, \dots, m$, com $g = 1, 2, \dots, G$, são os resultados de ordenadas discretas dos primeiros componentes dos vetores de coeficientes $\Psi_g(0, \mu_i)$, $\mu_i < 0$, e $\Psi_g(Z, \mu_i)$, $\mu_i > 0$, definidos pela Eq. (5.28).

Para uma avaliação do método implementado, a comparação dos resultados foi feita com resultados obtidos do código MCNP modificado, descrito no Apêndice E, onde o cálculo de transporte em duto vazio é feito utilizando os albedos calculados

previamente. Nas Tabelas 6.13 e 6.14 são apresentados os resultados para as probabilidades de reflexão e de transmissão, respectivamente, em função do grupo de energia, para um duto de concreto com razão $Z/\rho = 1$ na faixa de energia térmica. Nas Tabelas 6.15 e 6.16 são mostrados os resultados correspondentes para a faixa de energia rápida. Nas Tabelas 6.17, 6.18, 6.19 e 6.20 são apresentados os resultados correspondentes para dutos de ferro com a mesma razão comprimento/raio. Nas Tabelas 6.21, 6.22, 6.23 e 6.24 são apresentados os resultados para as probabilidades de reflexão e de transmissão nas faixas térmicas e rápidas para um duto de concreto com razão $Z/\rho = 10$, e os resultados correspondentes para o duto de ferro são dados nas Tabelas 6.25, 6.26, 6.27 e 6.28. O resultado indicado por "Total" corresponde à soma dos valores de todos os grupos. O código MCNP foi processado com 10^6 e 10^7 histórias. Em ambas as aproximações, $N = 2$ e $N = 3$, foram utilizados 80 intervalos espaciais para o duto com razão $Z/\rho = 1$ e 160 intervalos para o duto com razão $Z/\rho = 10$ e discretização da variável angular com 640 nós da quadratura de Gauss-Chebyshev. Os desvios percentuais dos modelos aproximados $N = 2$ e $N = 3$ foram calculados em relação aos resultados Monte Carlo processado com 10^7 histórias, como

$$\text{desvio percentual em } R = \frac{R_{ma} - R_{MC}}{R_{MC}} \times 100, \quad (6.13)$$

para a probabilidade de reflexão, e

$$\text{desvio percentual em } T = \frac{T_{ma} - T_{MC}}{T_{MC}} \times 100, \quad (6.14)$$

para a probabilidade de transmissão. Como era esperado, em geral, a aproximação com três funções de base apresentou desvios menores do que os do modelo com duas funções de base. Nas Tabelas 6.13 a 6.28 pode-se notar que os desvios dos resultados do modelo aproximado $N = 3$ em relação aos resultados Monte Carlo modificado são, no máximo, da ordem de 1,5%, exceto para o grupo 1 das Tabelas 6.13 e 6.21. Nesses casos, em particular, a razão dos desvios relativos altos é atribuída ao fato da probabilidade de reflexão no grupo 1 ser ordens de magnitude inferior às dos outros grupos, o que propicia o aparecimento de um fenômeno conhecido como sub-amostragem³² em cálculos Monte Carlo, que é caracterizado por médias e desvios padrão não-confiáveis. Aumentando o número de histórias para 10^8 no cálculo Monte Carlo modificado, foi obtida uma probabilidade de reflexão de $0,000151800 \pm 0,000001047$, no grupo 1 da Tabela 6.13, com um desvio relativo de 0,90% para o modelo $N = 3$ e 4,08% para o modelo

$N = 2$; para o grupo 1 da Tabela 6.21 obteve-se uma probabilidade de reflexão de $0,000204124 \pm 0,000001163$, o que resulta em desvio de 0,65% para o modelo $N = 3$ e 2,04% para o modelo $N = 2$. Nos dois casos observa-se uma concordância muito melhor dos resultados. Pode-se concluir que os modelos aproximados fornecem resultados muito próximos dos resultados Monte Carlo, o que comprova a implementação correta do método aproximado.

Tabela 6.9: Albedos $c_{g' \rightarrow g}$ para o Concreto na Faixa Térmica

g'	$g = 1$	$g = 2$	$g = 3$
1	$0,00967854 \pm 0,00003000$	$0,156860 \pm 0,000110$	$0,673636 \pm 0,000135$
2	$0,00232511 \pm 0,00001488$	$0,105244 \pm 0,000095$	$0,684002 \pm 0,000137$
3	$0,000251513 \pm 0,000004678$	$0,0231594 \pm 0,0000440$	$0,705511 \pm 0,000141$

Tabela 6.10: Albedos $c_{g' \rightarrow g}$ para o Concreto na Faixa Rápida

g'	$g = 1$	$g = 2$	$g = 3$	$g = 4$
1	$0,249895 \pm 0,000125$			
2	$0,153223 \pm 0,000107$	$0,272689 \pm 0,000136$		
3	$0,0618062 \pm 0,0000742$	$0,118654 \pm 0,000107$	$0,381532 \pm 0,000153$	
4	$0,0209931 \pm 0,0000441$	$0,0325753 \pm 0,0000554$	$0,104653 \pm 0,000094$	$0,273636 \pm 0,000137$

Tabela 6.11: Albedos $c_{g' \rightarrow g}$ para o Ferro na Faixa Térmica

g'	$g = 1$	$g = 2$	$g = 3$
1	0,0315515 \pm 0,0000379	0,149537 \pm 0,000060	0,0143936 \pm 0,0000230
2	0,00340498 \pm 0,00001362	0,156977 \pm 0,000078	0,0997125 \pm 0,0000698
3	0,00000100044 \pm 0,00000020739	0,000595573 \pm 0,0000006015	0,567852 \pm 0,000114

Tabela 6.12: Albedos $c_{g' \rightarrow g}$ para o Ferro na Faixa Rápida

g'	$g = 1$	$g = 2$	$g = 3$
1	0,0828505 \pm 0,0000911		
2	0,0304866 \pm 0,0000549	0,0487714 \pm 0,0000683	
3	0,0316130 \pm 0,0000537	0,0171988 \pm 0,0000396	0,0345111 \pm 0,0000552

Tabela 6.13: Probabilidades de Reflexão para um Duto de Concreto com Razão $Z/\rho = 1$ na Faixa Térmica

Grupo de Energia	Modelo Aproximado		Monte Carlo		Desvio (%)	
	$N = 2$	$N = 3$	10^6 histórias	10^7 histórias	$N = 2$	$N = 3$
1	0,000157989	0,000153171	$0,000128306 \pm 0,000009610$	$0,000146494 \pm 0,000003267$	7,85	4,56
2	0,00978683	0,00950837	$0,00961112 \pm 0,00008169$	$0,00955722 \pm 0,00002580$	2,40	-0,51
3	0,204979	0,199688	$0,199706 \pm 0,000300$	$0,199763 \pm 0,000100$	2,61	-0,04
Total	0,214924	0,209350	$0,209446 \pm 0,000314$	$0,209467 \pm 0,000105$	2,60	-0,06

Tabela 6.14: Probabilidades de Transmissão para um Duto de Concreto com Razão $Z/\rho = 1$ na Faixa Térmica

Grupo de Energia	Modelo Aproximado		Monte Carlo		Desvio (%)	
	$N = 2$	$N = 3$	10^6 histórias	10^7 histórias	$N = 2$	$N = 3$
1	0,00234169	0,00236663	$0,00237844 \pm 0,00004828$	$0,00236958 \pm 0,00001516$	-1,18	-0,12
2	0,0626581	0,0633310	$0,0635803 \pm 0,0002416$	$0,0635107 \pm 0,0000762$	-1,34	-0,28
3	0,493052	0,498373	$0,498440 \pm 0,000449$	$0,498356 \pm 0,000149$	-1,06	0,003
Total	0,558052	0,564070	$0,564398 \pm 0,000451$	$0,564236 \pm 0,000113$	-1,10	-0,03

Tabela 6.15: Probabilidades de Reflexão para um Duto de Concreto com Razão $Z/\rho = 1$ na Faixa Rápida

Grupo de Energia	Modelo Aproximado		Monte Carlo		Desvio (%)	
	$N = 2$	$N = 3$	10^6 histórias	10^7 histórias	$N = 2$	$N = 3$
1	0,00676207	0,00661172	$0,00660783 \pm 0,00004692$	$0,00663006 \pm 0,00001459$	1,99	-0,28
2	0,00992231	0,00968175	$0,00968068 \pm 0,00005808$	$0,00968546 \pm 0,00001840$	2,44	-0,04
3	0,0288472	0,0280360	$0,0279900 \pm 0,0000980$	$0,0280291 \pm 0,0000308$	2,92	0,02
4	0,0654956	0,0632487	$0,0633531 \pm 0,0001457$	$0,0633281 \pm 0,0000443$	3,42	-0,12
Total	0,111027	0,107578	$0,107632 \pm 0,000172$	$0,107673 \pm 0,000054$	3,11	-0,09

Tabela 6.16: Probabilidades de Transmissão para um Duto de Concreto com Razão $Z/\rho = 1$ na Faixa Rápida

Grupo de Energia	Modelo Aproximado		Monte Carlo		Desvio (%)	
	$N = 2$	$N = 3$	10^6 histórias	10^7 histórias	$N = 2$	$N = 3$
1	0,00580015	0,00585694	$0,00570750 \pm 0,00004281$	$0,00582570 \pm 0,00001398$	-0,44	0,54
2	0,00843488	0,00852265	$0,00848201 \pm 0,00005344$	$0,00846798 \pm 0,00001694$	-0,39	0,65
3	0,0241004	0,0243849	$0,0240834 \pm 0,0000915$	$0,0241487 \pm 0,0000290$	-0,20	0,98
4	0,429897	0,434617	$0,436194 \pm 0,000480$	$0,435676 \pm 0,000131$	-1,33	-0,24
Total	0,468232	0,473382	$0,474467 \pm 0,000427$	$0,474118 \pm 0,000142$	-1,24	-0,16

Tabela 6.17: Probabilidades de Reflexão para um Duto de Ferro com Razão $Z/\rho = 1$ na Faixa Térmica

Grupo de Energia	Modelo Aproximado		Monte Carlo		Desvio (%)	
	$N = 2$	$N = 3$	10^6 histórias	10^7 histórias	$N = 2$	$N = 3$
1	0,000155420	0,000149758	$0,000138016 \pm 0,000005659$	$0,000149439 \pm 0,000001868$	4,00	0,21
2	0,00556057	0,00536014	$0,00534818 \pm 0,00003637$	$0,00535768 \pm 0,00001125$	3,79	0,05
3	0,134341	0,130457	$0,130503 \pm 0,000222$	$0,130542 \pm 0,000065$	2,91	-0,06
Total	0,140057	0,135967	$0,135989 \pm 0,000218$	$0,136049 \pm 0,000068$	2,95	-0,06

Tabela 6.18: Probabilidades de Transmissão para um Duto de Ferro com Razão $Z/\rho = 1$ na Faixa Térmica

Grupo de Energia	Modelo Aproximado		Monte Carlo		Desvio (%)	
	$N = 2$	$N = 3$	10^6 histórias	10^7 histórias	$N = 2$	$N = 3$
1	0,00233610	0,00236124	$0,00236966 \pm 0,00004763$	$0,00236051 \pm 0,00001511$	-1,03	0,03
2	0,0589730	0,0596133	$0,0599612 \pm 0,0002278$	$0,0598171 \pm 0,0000718$	-1,41	-0,34
3	0,431842	0,436574	$0,437046 \pm 0,000437$	$0,436916 \pm 0,000131$	-1,16	-0,08
Total	0,493151	0,498549	$0,499376 \pm 0,000449$	$0,499094 \pm 0,000150$	-1,19	-0,11

Tabela 6.19: Probabilidades de Reflexão para um Duto de Ferro com Razão $Z/\rho = 1$ na Faixa Rápida

Grupo de Energia	Modelo Aproximado		Monte Carlo		Desvio (%)	
	$N = 2$	$N = 3$	10^6 histórias	10^7 histórias	$N = 2$	$N = 3$
1	0,00718339	0,00691894	$0,00690685 \pm 0,00002210$	$0,00692513 \pm 0,00000692$	3,73	-0,09
2	0,00384019	0,00369545	$0,00370304 \pm 0,00001703$	$0,00370256 \pm 0,00000518$	3,72	-0,19
3	0,00757872	0,00728665	$0,00730555 \pm 0,00002338$	$0,00729846 \pm 0,00000730$	3,84	-0,16
Total	0,0186023	0,0179010	$0,0179154 \pm 0,0000340$	$0,0179262 \pm 0,0000108$	3,77	-0,14

Tabela 6.20: Probabilidades de Transmissão para um Duto de Ferro com Razão $Z/\rho = 1$ na Faixa Rápida

Grupo de Energia	Modelo Aproximado		Monte Carlo		Desvio (%)	
	$N = 2$	$N = 3$	10^6 histórias	10^7 histórias	$N = 2$	$N = 3$
1	0,00576768	0,00585697	$0,00574252 \pm 0,00002067$	$0,00579293 \pm 0,00000637$	-0,44	1,10
2	0,00307094	0,00311979	$0,00307043 \pm 0,00001535$	$0,00309188 \pm 0,00000495$	-0,68	0,90
3	0,382734	0,386790	$0,388935 \pm 0,000467$	$0,388270 \pm 0,000155$	-1,43	-0,38
Total	0,391573	0,395767	$0,397748 \pm 0,000477$	$0,397155 \pm 0,000159$	-1,40	-0,33

Tabela 6.21: Probabilidades de Reflexão para um Duto de Concreto com Razão $Z/\rho = 10$ na Faixa Térmica

Grupo de Energia	Modelo Aproximado		Monte Carlo		Desvio (%)	
	$N = 2$	$N = 3$	10^6 histórias	10^7 histórias	$N = 2$	$N = 3$
1	0,000208287	0,000205452	$0,000171103 \pm 0,000010643$	$0,000197572 \pm 0,000003635$	5,42	3,99
2	0,0134054	0,0132592	$0,0133574 \pm 0,0000908$	$0,0133259 \pm 0,0000293$	0,60	-0,50
3	0,294499	0,292235	$0,292213 \pm 0,000292$	$0,292199 \pm 0,000088$	0,79	0,01
Total	0,308113	0,305700	$0,305741 \pm 0,000306$	$0,305722 \pm 0,000092$	0,78	-0,01

Tabela 6.22: Probabilidades de Transmissão para um Duto de Concreto com Razão $Z/\rho = 10$ na Faixa Térmica

Grupo de Energia	Modelo Aproximado		Monte Carlo		Desvio (%)	
	$N = 2$	$N = 3$	10^6 histórias	10^7 histórias	$N = 2$	$N = 3$
1	0,0000631174	0,0000630796	$0,0000583485 \pm 0,0000073811$	$0,0000629605 \pm 0,0000024366$	0,25	0,19
2	0,00182811	0,00182147	$0,00183530 \pm 0,00003983$	$0,00184678 \pm 0,00001256$	-1,01	-1,37
3	0,0186062	0,0184089	$0,0186328 \pm 0,0001081$	$0,0184659 \pm 0,0000332$	0,76	-0,31
Total	0,0204974	0,0202934	$0,0205265 \pm 0,0001149$	$0,0203757 \pm 0,0000367$	0,60	-0,40

Tabela 6.23: Probabilidades de Reflexão para um Duto de Concreto com Razão $Z/\rho = 10$ na Faixa Rápida

Grupo de Energia	Modelo Aproximado		Monte Carlo		Desvio (%)	
	N = 2	N = 3	10 ⁶ histórias	10 ⁷ histórias	N = 2	N = 3
1	0,00971312	0,00966920	0,00966868 ± 0,00005124	0,00969225 ± 0,00001648	0,21	-0,24
2	0,0136335	0,0135384	0,0135515 ± 0,0000637	0,0135365 ± 0,0000203	0,72	0,01
3	0,0371203	0,0366804	0,0366137 ± 0,0001062	0,0366870 ± 0,0000330	1,18	-0,02
4	0,0772116	0,0756430	0,0757829 ± 0,0001516	0,0757269 ± 0,0000454	1,96	-0,11
Total	0,137679	0,135531	0,135617 ± 0,000176	0,135642 ± 0,000054	1,50	-0,08

Tabela 6.24: Probabilidades de Transmissão para um Duto de Concreto com Razão $Z/\rho = 10$ na Faixa Rápida

Grupo de Energia	Modelo Aproximado		Monte Carlo		Desvio (%)	
	N = 2	N = 3	10 ⁶ histórias	10 ⁷ histórias	N = 2	N = 3
1	0,000273599	0,000265752	0,000265266 ± 0,000006685	0,000268154 ± 0,000002118	2,03	-0,90
2	0,000337909	0,000327762	0,000342549 ± 0,000008392	0,000326105 ± 0,000002576	3,62	0,51
3	0,000752827	0,000728999	0,000730238 ± 0,000013728	0,000729461 ± 0,000004304	3,20	-0,06
4	0,0109095	0,0108868	0,0110235 ± 0,0001014	0,0109478 ± 0,0000317	-0,35	-0,56
Total	0,0122738	0,0122093	0,0123615 ± 0,0001026	0,0122715 ± 0,0000319	0,02	-0,51

Tabela 6.25: Probabilidades de Reflexão para um Duto de Ferro com Razão $Z/\rho = 10$ na Faixa Térmica

Grupo de Energia	Modelo Aproximado		Monte Carlo		Desvio (%)	
	$N = 2$	$N = 3$	10^6 histórias	10^7 histórias	$N = 2$	$N = 3$
1	0,000178853	0,000174682	$0,000161243 \pm 0,000006030$	$0,000174442 \pm 0,000001989$	2,53	0,14
2	0,00643157	0,00628525	$0,00628889 \pm 0,00003899$	$0,00628999 \pm 0,00001258$	2,25	-0,07
3	0,174704	0,172541	$0,172545 \pm 0,000224$	$0,172587 \pm 0,000069$	1,23	-0,03
Total	0,181314	0,179001	$0,178996 \pm 0,000215$	$0,179052 \pm 0,000072$	1,26	-0,03

Tabela 6.26: Probabilidades de Transmissão para um Duto de Ferro com Razão $Z/\rho = 10$ na Faixa Térmica

Grupo de Energia	Modelo Aproximado		Monte Carlo		Desvio (%)	
	$N = 2$	$N = 3$	10^6 histórias	10^7 histórias	$N = 2$	$N = 3$
1	0,0000597818	0,0000597919	$0,0000551098 \pm 0,0000072635$	$0,0000592296 \pm 0,0000023870$	0,97	0,95
2	0,00150232	0,00150160	$0,00151754 \pm 0,00003809$	$0,00152719 \pm 0,00001206$	-1,63	-1,68
3	0,0122201	0,0121200	$0,0122729 \pm 0,0000970$	$0,0121591 \pm 0,0000304$	0,50	-0,32
Total	0,0137822	0,0136814	$0,0138456 \pm 0,0001052$	$0,0137455 \pm 0,0000330$	0,27	-0,47

Tabela 6.27: Probabilidades de Reflexão para um Duto de Ferro com Razão $Z/\rho = 10$ na Faixa Rápida

Grupo de Energia	Modelo Aproximado		Monte Carlo		Desvio (%)	
	$N = 2$	$N = 3$	10^6 histórias	10^7 histórias	$N = 2$	$N = 3$
1	0,00822253	0,00802586	$0,00801112 \pm 0,00002403$	$0,00803889 \pm 0,00000723$	2,28	-0,16
2	0,00436029	0,00425067	$0,00426057 \pm 0,00001789$	$0,00426001 \pm 0,00000554$	2,35	-0,22
3	0,00854248	0,00831765	$0,00834623 \pm 0,00002504$	$0,00833046 \pm 0,00000750$	2,54	-0,15
Total	0,0211253	0,0205942	$0,0206179 \pm 0,00003350$	$0,0206294 \pm 0,0000103$	2,40	-0,17

Tabela 6.28: Probabilidades de Transmissão para um Duto de Ferro com Razão $Z/\rho = 10$ na Faixa Rápida

Grupo de Energia	Modelo Aproximado		Monte Carlo		Desvio (%)	
	$N = 2$	$N = 3$	10^6 histórias	10^7 histórias	$N = 2$	$N = 3$
1	0,00010552	0,000101892	$0,000103779 \pm 0,000002740$	$0,000101578 \pm 0,000000853$	3,88	0,31
2	0,0000540606	0,0000521987	$0,0000526755 \pm 0,0000019964$	$0,0000529967 \pm 0,0000006360$	2,01	-1,51
3	0,00988594	0,00989786	$0,0100263 \pm 0,00000993$	$0,00995343 \pm 0,00003086$	-0,68	-0,56
Total	0,0100455	0,0100520	$0,0101828 \pm 0,00000988$	$0,0101080 \pm 0,0000313$	-0,62	-0,55

6.4 Comparação entre o Modelo Aproximado e o Problema Real

O modelo aproximado estudado neste trabalho envolveu algumas aproximações na sua formulação. A fim de avaliar os efeitos destas aproximações, o problema de transporte em duto foi simulado com o código MCNP sem modificações, aqui designado por Monte Carlo referência. Os resultados do modelo aproximado por albedos são comparados com estes resultados. Nos cálculos de referência foi considerado um duto vazio com parede de 20 cm de espessura, onde se leva em conta o transporte dos nêutrons no interior da parede. As seções de choque utilizadas foram as mesmas da biblioteca usada para calcular os albedos. As Tabelas 6.29 e 6.30 mostram os resultados das probabilidades totais de reflexão e de transmissão, respectivamente, para o concreto na faixa térmica, em função do raio de um duto circular de comprimento $Z = 100$ cm. Nas Tabelas 6.31 e 6.32 são apresentados os resultados correspondentes para a faixa de energia rápida. As Tabelas 6.33, 6.34, 6.35 e 6.36 mostram os resultados obtidos para um duto de ferro. Os valores dos desvios são os do Monte Carlo modificado, utilizando albedos, calculados em relação ao Monte Carlo referência. Todos os resultados foram obtidos com 10^6 histórias.

No que se refere às probabilidades de reflexão, verificou-se que o modelo aproximado não descreve bem o problema real, apresentando resultados incorretos. Isto pode ser parcialmente explicado pelo fato dos albedos utilizados terem sido calculados com aproximações tais como a dependência constante em relação à direção e à posição das partículas incidentes. Entretanto, o principal fator que determinou estes resultados incorretos é que o modelo aproximado considera que, quando a partícula incide em uma determinada posição na parede, ela é refletida na mesma posição espacial. Como a fonte de partículas incide na entrada do duto, grande parte dessas partículas tem a primeira colisão na borda ou em suas proximidades. Assim sendo, no modelo aproximado, as partículas, ao colidirem em uma posição na borda do duto ou próxima a ela, como são reemitidas localmente, podem sofrer reflexão para fora do duto com uma probabilidade de $\sim 50\%$ multiplicada pelo valor do albedo, isto é, ocorre uma migração significativa de partículas para fora do duto. No caso real, a partícula incidindo na borda pode penetrar na parede do duto uma distância da ordem de um livre caminho médio antes de sofrer uma colisão e, neste caso, a probabilidade de ocorrer reflexão dirigida para a

abertura de entrada do duto é muito mais baixa. Apesar dos desvios altos, para um mesmo comprimento de duto, verifica-se uma tendência de diminuição desses desvios nas probabilidades de reflexão, com o aumento do raio. Isto porque, após a primeira colisão, quanto maior o raio do duto, maior o ângulo sólido subentendido pela abertura do duto para a saída de partículas de primeira colisão, o que confirma a justificativa apresentada. Para melhor compreensão desta particularidade do problema, nas Tabelas 6.37 a 6.40 são mostradas as probabilidades de reflexão em função do comprimento e do raio, mantendo a razão entre eles (Z/ρ) constante, para dutos de concreto e de ferro nas faixas de energia térmica e rápida. Para cada caso são apresentados resultados para $Z/\rho = 2$ e $Z/\rho = 5$. Estes resultados mostram com maior evidência a redução do desvio com o aumento do raio, obtendo-se um valor melhorado em até 100 vezes.

Foi também estudada a influência dos coeficientes de albedo, calculados com as mesmas hipóteses, mas especificando outro tipo de fonte incidente. Concluiu-se que esta influência é insignificante no sentido de se obter melhores resultados para problemas com as aproximações citadas. Este fato foi constatado efetuando-se cálculos utilizando albedos gerados com fonte incidente normal, ao invés de isotrópica.

Em relação às probabilidades de transmissão, que são os parâmetros mais importantes para análise deste tipo de problema, obteve-se resultados razoáveis. Quanto ao tempo computacional, verificou-se que o processamento do problema referência é até dez vezes mais demorado que o do modelo aproximado.

Tabela 6.29: Probabilidades de Reflexão Obtidas para o Modelo Aproximado e para o Problema Real no Caso de um Duto Circular de Comprimento $Z = 100$ cm na Faixa Térmica

Raio do Duto (cm)	Modelo $N = 3$	MCNP		Desvio (%)
		Albedo	Referência	
8	0,305746	0,305790 \pm 0,000306	0,148926 \pm 0,000328	105,33
10	0,305700	0,305741 \pm 0,000306	0,165982 \pm 0,000349	84,20
15	0,305160	0,305206 \pm 0,000305	0,194800 \pm 0,000370	56,58
20	0,303518	0,303589 \pm 0,000304	0,211878 \pm 0,000381	43,28
30	0,296240	0,296295 \pm 0,000296	0,226609 \pm 0,000385	30,75
50	0,271898	0,271811 \pm 0,000326	0,223601 \pm 0,000380	21,56

Tabela 6.30: Probabilidades de Transmissão Obtidas para o Modelo Aproximado e para o Problema Real no Caso de um Duto Circular de Comprimento $Z = 100$ cm na Faixa Térmica

Raio do Duto (cm)	Modelo $N = 3$	MCNP		Desvio (%)
		Albedo	Referência	
8	0,0112537	0,0113987 \pm 0,0000900	0,0127758 \pm 0,0001073	-10,78
10	0,0202934	0,0205265 \pm 0,0001149	0,0227286 \pm 0,0001409	-9,69
15	0,0545959	0,0549112 \pm 0,0001812	0,0590334 \pm 0,0002184	-6,98
20	0,0986414	0,0988497 \pm 0,0002372	0,103637 \pm 0,000280	-4,62
30	0,191172	0,191508 \pm 0,000306	0,195292 \pm 0,000371	-1,94
50	0,344483	0,345065 \pm 0,000380	0,345108 \pm 0,000449	-0,01

Tabela 6.31: Probabilidades de Reflexão Obtidas para o Modelo Aproximado e para o Problema Real no Caso de um Duto Circular de Concreto de Comprimento $Z = 100$ cm na Faixa Rápida

Raio do Duto (cm)	Modelo $N = 3$	MCNP		Desvio (%)
		Albedo	Referência	
8	0,135535	$0,135622 \pm 0,000176$	$0,0500623 \pm 0,00002103$	170,91
10	0,135543	$0,135617 \pm 0,000176$	$0,0572622 \pm 0,0002233$	136,83
15	0,135488	$0,135573 \pm 0,000176$	$0,0707850 \pm 0,0002477$	91,53
20	0,135341	$0,135418 \pm 0,000176$	$0,0799800 \pm 0,0002559$	69,31
30	0,134319	$0,134418 \pm 0,000175$	$0,0909530 \pm 0,0002729$	47,79
50	0,128992	$0,129006 \pm 0,000181$	$0,0977479 \pm 0,0002835$	31,98

Tabela 6.32: Probabilidades de Transmissão Obtidas para o Modelo Aproximado e para o Problema Real no Caso de um Duto Circular de Concreto de Comprimento $Z = 100$ cm na Faixa Rápida

Raio do Duto (cm)	Modelo $N = 3$	MCNP		Desvio (%)
		Albedo	Referência	
8	0,00745794	$0,00756650 \pm 0,00008172$	$0,00964329 \pm 0,00009643$	-21,54
10	0,0122101	$0,0123615 \pm 0,0001026$	$0,0159571 \pm 0,00001229$	-22,53
15	0,0300056	$0,0302141 \pm 0,0001511$	$0,0369962 \pm 0,0001850$	-18,33
20	0,0551010	$0,0551963 \pm 0,0001987$	$0,0642000 \pm 0,0002375$	-14,02
30	0,117380	$0,117596 \pm 0,000270$	$0,126344 \pm 0,000328$	-6,92
50	0,246019	$0,246752 \pm 0,000370$	$0,249858 \pm 0,000425$	-1,24

Tabela 6.33: Probabilidades de Reflexão Obtidas para o Modelo Aproximado e para o Problema Real no Caso de um Duto Circular de Ferro de Comprimento $Z = 100$ cm na Faixa Térmica

Raio do Duto (cm)	Modelo $N = 3$	MCNP		Desvio (%)
		Albedo	Referência	
8	0,179009	0,179005 \pm 0,000215	0,145466 \pm 0,000305	23,06
10	0,179001	0,178996 \pm 0,000215	0,151349 \pm 0,000303	18,27
15	0,178901	0,178896 \pm 0,000215	0,160075 \pm 0,000304	11,76
20	0,178543	0,178547 \pm 0,000214	0,164471 \pm 0,000312	8,56
30	0,176504	0,176509 \pm 0,000229	0,167148 \pm 0,000318	5,60
50	0,167317	0,167217 \pm 0,000217	0,163447 \pm 0,000307	3,64

Tabela 6.34: Probabilidades de Transmissão Obtidas para o Modelo Aproximado e para o Problema Real no Caso de um Duto Circular de Ferro de Comprimento $Z = 100$ cm na Faixa Térmica

Raio do Duto (cm)	Modelo $N = 3$	MCNP		Desvio (%)
		Albedo	Referência	
8	0,00813402	0,00824572 \pm 0,00008328	0,00885319 \pm 0,00009030	-10,78
10	0,0136814	0,0138456 \pm 0,00001052	0,0148882 \pm 0,0001146	-9,69
15	0,0349246	0,0351841 \pm 0,0001583	0,0373911 \pm 0,0001757	-6,98
20	0,0645146	0,0646553 \pm 0,0002069	0,0678094 \pm 0,0002305	-4,62
30	0,134965	0,135233 \pm 0,000284	0,138371 \pm 0,000318	-1,94
50	0,271618	0,272356 \pm 0,000381	0,273804 \pm 0,000411	-0,01

Tabela 6.35: Probabilidades de Reflexão Obtidas para o Modelo Aproximado e para o Problema Real no Caso de um Duto Circular de Ferro de Comprimento $Z = 100$ cm na Faixa Rápida

Raio do Duto (cm)	Modelo $N = 3$	MCNP		Desvio (%)
		Albedo	Referência	
8	0,0205944	0,0206182 ± 0,0000350	0,00949654 ± 0,00009496	117,11
10	0,0205942	0,0206179 ± 0,0000350	0,0102750 ± 0,0000986	100,66
15	0,0205919	0,0206156 ± 0,0000350	0,0117537 ± 0,0001058	75,40
20	0,0205839	0,0206085 ± 0,0000350	0,0126587 ± 0,0001089	62,80
30	0,0205301	0,0205564 ± 0,0000349	0,0136486 ± 0,0001133	50,61
50	0,0201559	0,0201757 ± 0,0000349	0,0142592 ± 0,0001155	41,49

Tabela 6.36: Probabilidades de Transmissão Obtidas para o Modelo Aproximado e para o Problema Real no Caso de um Duto Circular de Ferro de Comprimento $Z = 100$ cm na Faixa Rápida

Raio do Duto (cm)	Modelo $N = 3$	MCNP		Desvio (%)
		Albedo	Referência	
8	0,00643846	0,00652848 ± 0,00007965	0,00901107 ± 0,00009371	-27,55
10	0,0100520	0,0101828 ± 0,0000988	0,0138316 ± 0,0001162	-26,38
15	0,0224118	0,0225548 ± 0,0001466	0,0288989 ± 0,0001676	-21,95
20	0,0390333	0,0390921 ± 0,0001876	0,0471871 ± 0,0002123	-17,15
30	0,0816173	0,0816837 ± 0,0002614	0,0905938 ± 0,0002899	-9,83
50	0,181639	0,182386 ± 0,000365	0,189593 ± 0,000398	-3,80

Tabela 6.37: Probabilidades de Reflexão para um Duto de Concreto na Faixa Térmica e Z/ρ Constante

Z/ρ	Referência	Desvio (%)	Z/ρ	Referência	Desvio (%)
2/1	0,0205601 \pm 0,0001398	1222,03	5/1	0,0285375 \pm 0,0001655	963,82
10/5	0,0851352 \pm 0,0002724	219,27	10/2	0,0537107 \pm 0,0002202	465,23
60/30	0,203196 \pm 0,000366	33,77	50/10	0,163471 \pm 0,000343	85,71
100/50	0,223601 \pm 0,000380	21,56	100/20	0,211878 \pm 0,000381	43,28
MCNP-Albedo	0,271811 \pm 0,000326			0,303589 \pm 0,000304	
Modelo $N = 3$	0,271898			0,303518	

Tabela 6.38: Probabilidades de Reflexão para um Duto de Concreto na Faixa Rápida e Z/ρ Constante

Z/ρ	Referência	Desvio (%)	Z/ρ	Referência	Desvio (%)
2/1	0,00573392 \pm 0,00007339	2149,87	5/1	0,00823677 \pm 0,00008813	1544,07
10/5	0,0266897 \pm 0,0001548	383,35	10/2	0,0160404 \pm 0,0001219	744,23
60/30	0,0840910 \pm 0,0002691	53,41	50/10	0,0567190 \pm 0,0002212	138,75
100/50	0,0977479 \pm 0,0002835	31,98	100/20	0,0799800 \pm 0,0002559	69,31
MCNP-Albedo	0,129006 \pm 0,000181			0,135418 \pm 0,000176	
Modelo $N = 3$	0,128992			0,135341	

Tabela 6.39: Probabilidades de Reflexão para um Duto de Ferro na Faixa Térmica e Z/ρ Constante

Z/ρ	Referência	Desvio (%)	Z/ρ	Referência	Desvio (%)
2/1	0,0491164 \pm 0,0002358	240,45	5/1	0,0609316 \pm 0,0002133	193,03
10/5	0,116918 \pm 0,000281	43,02	10/2	0,0909011 \pm 0,0002545	96,42
60/30	0,157085 \pm 0,000314	6,45	50/10	0,150722 \pm 0,000301	18,46
100/50	0,161347 \pm 0,0000307	3,64	100/20	0,164471 \pm 0,000312	8,65
MCNP-Albedo	0,167217 \pm 0,000217			0,178547 \pm 0,000214	
Modelo $N = 3$	0,167317			0,178546	

Tabela 6.40: Probabilidades de Reflexão para um Duto de Ferro na Faixa Rápida e Z/ρ Constante

Z/ρ	Referência	Desvio (%)	Z/ρ	Referência	Desvio (%)
2/1	0,00206709 \pm 0,00004486	876,04	5/1	0,00266065 \pm 0,00005082	674,57
10/5	0,00688161 \pm 0,00008120	193,18	10/2	0,00450911 \pm 0,00006583	357,04
60/30	0,0131841 \pm 0,0001121	53,03	50/10	0,0102330 \pm 0,0000982	101,39
100/50	0,0142592 \pm 0,0001155	41,49	100/20	0,0126587 \pm 0,0001089	62,80
MCNP-Albedo	0,0201757 \pm 0,0000343			0,0206085 \pm 0,0000350	
Modelo $N = 3$	0,0201559			0,0205839	

7 CONSIDERAÇÕES FINAIS

7.1 Contribuições do Trabalho

Como contribuições deste trabalho podem ser mencionados:

- o desenvolvimento e implementação da decomposição do problema de duto em problemas não-colidido e colidido e suas soluções;
- o desenvolvimento e obtenção de quadraturas mais adequadas ao problema;
- o desenvolvimento e implementação do modelo aproximado com três funções de base;
- o desenvolvimento e implementação dos modelos com duas e três funções de base dependentes da energia.

7.2 Conclusões

A partir dos resultados obtidos conclui-se que a decomposição em problemas não-colidido e colidido, para aproximação com duas funções de base tem característica superior de convergência e oferece um ganho em eficiência, uma vez que a ordem de quadratura necessária para se obter os resultados das probabilidades de reflexão e de transmissão, dentro de uma precisão pré-estabelecida, é usualmente muito menor (até uma ordem de grandeza) do que na solução padrão por ordenadas discretas, além de se obter resultados mais precisos para as probabilidades de transmissão, especialmente para dutos longos.

O desenvolvimento e a utilização de conjuntos de quadraturas duplas possibilita uma melhor representação das descontinuidades nos fluxos angulares, obtendo-se convergência mais rápida e também probabilidades de reflexão mais precisas do que

as quadraturas de Chebyshev do segundo tipo, até então utilizadas. Em relação às probabilidades de transmissão os resultados são melhores para dutos de pequenos comprimentos, sendo que para dutos longos os resultados são praticamente equivalentes aos das quadraturas de Chebyshev.

Na aproximação com três funções de base os resultados mostram, consistentemente, precisão melhor quando comparados aos resultados de aproximações de mais baixa ordem, e também substancial economia no tempo computacional, quando comparados aos resultados Monte Carlo, indicando ainda que o desenvolvimento de aproximação de maior ordem (quatro funções de base), com um conseqüente aumento da complexidade, não acrescentaria muito ao modelo aproximado.

O modelo dependente da energia foi implementado com sucesso, comprovado com os resultados obtidos do código MCNP modificado. Entretanto, conclui-se que o modelo aproximado é limitado a aplicações onde o processo de interação partícula-parede é restrito à superfície da parede ou suas proximidades como no escoamento de partículas atômicas e moleculares, onde o mecanismo de reflexão é local, típico em dispositivos de fusão nuclear. Nos casos de transporte de nêutrons e fótons onde a interação não se limita à superfície da parede, o modelo apresenta limitações que poderiam ser superadas, ou pelo menos atenuadas, por exemplo, seguindo a linha de pesquisa de Prinja²⁵ que utiliza um núcleo de espalhamento não-local sintético que permite a migração da partícula na parede do duto.

7.3 Possíveis Trabalhos Futuros

Uma técnica de aceleração de convergência seria recomendável no esquema de iteração de fonte do método das ordenadas discretas, para redução do tempo de CPU gasto no caso de dutos longos e alta taxa de espalhamento na parede, pelos modelos $N = 2$ e $N = 3$.

No método das ordenadas discretas, a eliminação da discretização espacial, através da formulação analítica do método, é uma opção que tornaria mais eficiente a solução do problema, principalmente para dutos longos.

No modelo aproximado, um núcleo de espalhamento não-local, que des-

creva bem a interação da partícula com a parede do duto, é necessário para se obter melhores resultados no caso de transporte de nêutrons e fótons.

Finalmente, como sugerido por Prinja,²⁶ o desenvolvimento de um modelo aproximado unidimensional para o cálculo de transporte em duto que apresenta curva ou conexão que muda a direção do seu eixo é assunto de interesse para aplicação em transporte de partículas atômicas e moleculares.

APÊNDICE A

Determinação dos Coeficientes da Segunda Função de Base

As funções de base e as funções peso devem satisfazer a condição de ortogonalidade dada pela Eq. (2.15). Assim, no esquema de Galerkin, para $i = j = 2$ tem-se

$$\frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} u[D(x, y, \omega) - v]u[D(x, y, \omega) - v]d\varphi dx dy = 1, \quad (\text{A.1})$$

$$\frac{u^2}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - v]^2 d\varphi dx dy = 1. \quad (\text{A.2})$$

$$u = \left\{ \frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - v]^2 d\varphi dx dy \right\}^{-1/2}. \quad (\text{A.3})$$

Para $i = 1$ e $j = 2$

$$\frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} u[D(x, y, \omega) - v]d\varphi dx dy = 0. \quad (\text{A.4})$$

$$\frac{1}{2\pi A} \left[u \int_R \int_0^{2\pi} D(x, y, \omega) d\varphi dx dy - 2\pi Auv \right] = 0, \quad (\text{A.5})$$

$$v = \frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} D(x, y, \omega) d\varphi dx dy. \quad (\text{A.6})$$

A função $D(x, y, \omega)$ satisfaz a equação²²

$$\omega \cdot \nabla D(x, y, \omega) = 1, \quad (x, y) \in R \quad (\text{A.7})$$

e

$$D(x, y, \omega) = 0, \quad (x, y) \in \partial R, \quad \omega \cdot \mathbf{n} < 0. \quad (\text{A.8})$$

Da Eq. (A.7)

$$D(x, y, \omega) = \frac{1}{2} [\omega \cdot \nabla D^2(x, y, \omega)] \quad (\text{A.9})$$

e

$$[D(x, y, \omega) - v]^2 = \frac{1}{3} \left\{ \omega \cdot \nabla [D(x, y, \omega) - v]^3 \right\}. \quad (\text{A.10})$$

Substituindo a Eq. (A.10) na Eq. (A.3) e aplicando o teorema da divergência, u pode ser expresso como

$$u = \left\{ \frac{1}{6\pi A} \int_{\partial R} \int_0^{2\pi} \omega \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \omega) - v]^3 d\varphi ds \right\}^{-1/2}. \quad (\text{A.11})$$

De forma similar, utilizando a Eq. (A.9) e aplicando o teorema da divergência, obtém-se

$$v = \frac{1}{4\pi A} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} D^2(x, y, \omega) d\varphi ds. \quad (\text{A.12})$$

No caso específico de um duto de seção circular de raio ρ , $D(x, y, \omega)$ pode ser expressa como²²

$$D(x, y, \omega) = \mathbf{r} \cdot \omega - [(\mathbf{r} \cdot \omega)^2 + \rho^2 - x^2 - y^2]^{1/2}. \quad (\text{A.13})$$

Na parede interna, ∂R , $\mathbf{r} = \rho \mathbf{n}$ e a equação anterior se reduz a

$$D(x, y, \omega) = \begin{cases} 2\rho(\omega \cdot \mathbf{n}) & \cdot \omega \cdot \mathbf{n} > 0, \\ 0 & \cdot \omega \cdot \mathbf{n} < 0. \end{cases} \quad (\text{A.14})$$

O perímetro L e área A da seção é expresso como

$$L = 2\pi\rho; \quad A = \pi\rho^2. \quad (\text{A.15})$$

Substituindo a Eq. (A.14) na Eq. (A.12) tem-se

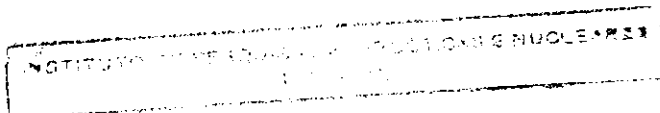
$$v = \frac{4\rho^2}{4\pi A} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} (\omega \cdot \mathbf{n})^3 d\varphi ds. \quad (\text{A.16})$$

Como em ∂R

$$\int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} d\varphi = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos \varphi d\varphi = 2, \quad (\text{A.17})$$

$$\int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} (\omega \cdot \mathbf{n})^2 d\varphi = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^2 \varphi d\varphi = \frac{\pi}{2}, \quad (\text{A.18})$$

$$\int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} (\omega \cdot \mathbf{n})^3 d\varphi = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^3 \varphi d\varphi = \frac{4}{3}, \quad (\text{A.19})$$



tem-se

$$v = \frac{8\rho}{3\pi}. \quad (\text{A.20})$$

O coeficiente u é calculado da expressão dada pela Eq. (A.11). Escrevendo a integral sobre φ como a soma das integrais sobre $\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} < 0$ e $\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} > 0$,

$$u = \left\{ \frac{1}{6\pi A} \int_{\partial R} \left[\int_{\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} < 0} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \bar{\boldsymbol{\omega}}) - v]^3 d\varphi + \int_{\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} > 0} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \boldsymbol{\omega}) - v]^3 d\varphi \right] ds \right\}^{-1/2}. \quad (\text{A.21})$$

Para $\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} < 0$, $D(x, y, \boldsymbol{\omega}) = 0$. Portanto

$$u = \left\{ \frac{1}{6\pi A} \int_{\partial R} \left[\int_{\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} < 0} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} (-v^3) d\varphi + \int_{\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} > 0} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} [D^3(x, y, \boldsymbol{\omega}) - v^3 - 3vD^2(x, y, \boldsymbol{\omega}) + 3v^2D(x, y, \boldsymbol{\omega})] d\varphi \right] ds \right\}^{-1/2}. \quad (\text{A.22})$$

Utilizando as Eqs. (A.14), (A.20) e escrevendo as integrais em $\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} > 0$ de acordo com as Eqs. (A.17), (A.18), (A.19) e considerando ainda que, em ∂R ,

$$\int_{\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} > 0} (\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n})^4 d\varphi = \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^4 \varphi d\varphi = \frac{3\pi}{8}. \quad (\text{A.23})$$

obtem-se

$$u = \frac{3\pi}{\rho} (9\pi^2 - 64)^{-1/2}. \quad (\text{A.24})$$

APÊNDICE B

Determinação dos Coeficientes da Terceira Função de Base

A terceira função de base é dada por

$$\alpha_3(x, y, \varphi) = r[D(x, y, \omega) - s][D(x, y, \omega) - t]. \quad (\text{B.1})$$

onde r , s e t são constantes. Considerando o esquema de Galerkin e aplicando a condição de ortogonalidade expressa pela Eq. (2.15) para $1 \leq i, j \leq 3$, tem-se

$$\frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} r[D(x, y, \omega) - s][D(x, y, \omega) - t] d\varphi dx dy = 0, \quad (\text{B.2})$$

$$\frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} ur[D(x, y, \omega) - v][D(x, y, \omega) - s][D(x, y, \omega) - t] d\varphi dx dy = 0, \quad (\text{B.3})$$

$$\frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} r^2[D(x, y, \omega) - s]^2[D(x, y, \omega) - t]^2 d\varphi dx dy = 1, \quad (\text{B.4})$$

que se reduzem a

$$\int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - s][D(x, y, \omega) - t] d\varphi dx dy = 0, \quad (\text{B.5})$$

$$\int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - v][D(x, y, \omega) - s][D(x, y, \omega) - t] d\varphi dx dy = 0, \quad (\text{B.6})$$

$$r = \left\{ \frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - s]^2[D(x, y, \omega) - t]^2 d\varphi dx dy \right\}^{-1/2}. \quad (\text{B.7})$$

Da Eq. (B.6) tem-se

$$\begin{aligned} \int_R \int_0^{2\pi} D(x, y, \omega)[D(x, y, \omega) - s][D(x, y, \omega) - t] d\varphi dx dy \\ - v \int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - s][D(x, y, \omega) - t] d\varphi dx dy = 0. \end{aligned} \quad (\text{B.8})$$

O segundo termo desta equação é nulo de acordo com a Eq. (B.2), portanto,

$$\int_R \int_0^{2\pi} D(x, y, \omega)[D(x, y, \omega) - s][D(x, y, \omega) - t] d\varphi dx dy = 0. \quad (\text{B.9})$$

Escrevendo a Eq. (B.2) como

$$\int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - v + (v - s)][D(x, y, \omega) - v + (v - t)] d\varphi dx dy = 0. \quad (\text{B.10})$$

tem-se

$$\begin{aligned} & \int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - v]^2 d\varphi dx dy + (v - t) \int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - v] d\varphi dx dy \\ & + (v - s) \int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - v] d\varphi dx dy + (v - s)(v - t) \int_R \int_0^{2\pi} d\varphi dx dy = 0. \end{aligned} \quad (\text{B.11})$$

Da Eq. (A.6),

$$\int_R \int_0^{2\pi} D(x, y, \omega) d\varphi dx dy = 2\pi Av. \quad (\text{B.12})$$

portanto,

$$\int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - v] d\varphi dx dy = 0. \quad (\text{B.13})$$

Da Eq. (A.3),

$$\int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - v]^2 d\varphi dx dy = \frac{2\pi A}{u^2}. \quad (\text{B.14})$$

Assim, da Eq. (B.11) resulta

$$(v - s)(v - t) = -\frac{1}{u^2}. \quad (\text{B.15})$$

Escrevendo a Eq. (B.9) como

$$\begin{aligned} & \int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - v + v][D(x, y, \omega) - v + (v - s)] \\ & \quad \times [D(x, y, \omega) - v + (v - t)] d\varphi dx dy = 0 \end{aligned} \quad (\text{B.16})$$

e usando as Eqs. (B.13) e (B.14), obtém-se

$$(s + t) - v(v - s)(v - t)u^2 = 3v + \frac{u^2}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - v]^3 d\varphi dx dy. \quad (\text{B.17})$$

Considerando a Eq. (B.15), pode-se escrever a Eq. (B.17) como

$$(s + t) = 2v + \frac{u^2}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - v]^3 d\varphi dx dy \quad (\text{B.18})$$

e finalmente,

$$s + t = 2v + q, \quad (\text{B.19})$$

onde

$$q = \frac{u^2}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - v]^3 d\varphi dx dy. \quad (\text{B.20})$$

Assim obtém-se duas equações para o cálculo de s e t :

$$(v - s)(v - t) = -\frac{1}{u^2} \quad (\text{B.21})$$

e

$$s = -t + 2v + q. \quad (\text{B.22})$$

Solucionando as Eqs. (B.21) e (B.22), tem-se

$$s = v + \frac{1}{2} \left(q + \sqrt{q^2 + \frac{4}{u^2}} \right) \quad (\text{B.23})$$

e

$$t = v + \frac{1}{2} \left(q - \sqrt{q^2 + \frac{4}{u^2}} \right). \quad (\text{B.24})$$

Substituindo as Eqs. (B.23) e (B.24) na Eq. (B.1), pode-se escrever a terceira função de base como

$$\alpha_3(x, y, \varphi) = r \{ [D(x, y, \omega) - v][D(x, y, \omega) - v - q] - 1/u^2 \}. \quad (\text{B.25})$$

Uma vez determinadas as constantes u e v da função α_2 , para a definição da terceira função de base é necessária a determinação da constante r que é mostrada a seguir.

Considerando a Eq. (B.25), a Eq. (B.7) pode ser escrita na forma

$$r = \left\{ \frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} \left\{ [D(x, y, \omega) - v][D(x, y, \omega) - v - q] - \frac{1}{u^2} \right\}^2 d\varphi dx dy \right\}^{-1/2}, \quad (\text{B.26})$$

$$= \left\{ \frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} \left\{ [D(x, y, \omega) - v]^4 - 2q[D(x, y, \omega) - v]^3 + \left(q^2 - \frac{2}{u^2} \right) [D(x, y, \omega) - v]^2 + \frac{2q}{u^2} [D(x, y, \omega) - v] + \frac{1}{u^4} \right\} d\varphi dx dy \right\}^{-1/2}. \quad (\text{B.27})$$

Utilizando as Eqs. (A.3), (A.4) e (B.20), tem-se

$$r = \left\{ \frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - v]^4 d\varphi dx dy - \frac{2q^2}{u^2} + \frac{1}{u^2} \left(q^2 - \frac{2}{u^2} \right) + \frac{1}{u^4} \right\}^{-1/2} \quad (\text{B.28})$$

e, finalmente

$$r = \left\{ \frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - v]^4 d\varphi dx dy - \frac{1}{u^2} \left(q^2 + \frac{1}{u^2} \right) \right\}^{-1/2}. \quad (\text{B.29})$$

Para um duto de seção circular de raio ρ , o coeficiente q pode ser calculado fazendo

$$q = \frac{u^2}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - v]^3 d\varphi dx dy \quad (\text{B.30})$$

$$= \frac{u^2}{8\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} \omega \cdot \nabla [D(x, y, \omega) - v]^4 d\varphi dx dy \quad (\text{B.31})$$

e aplicando o teorema da divergência, para se obter

$$q = \frac{u^2}{8\pi A} \int_{\partial R} \int_0^{2\pi} \omega \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \omega) - v]^4 d\varphi ds. \quad (\text{B.32})$$

Escrevendo a integral sobre φ , separadamente para as partes $\omega \cdot \mathbf{n} < 0$ e $\omega \cdot \mathbf{n} > 0$ e utilizando a Eq. (A.14) obtém-se

$$q = \frac{u^2}{8\pi A} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} [2\rho(\omega \cdot \mathbf{n}) - v]^4 d\varphi ds + \frac{u^2 v^4}{8\pi A} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} < 0} \omega \cdot \mathbf{n} d\varphi ds \quad (\text{B.33})$$

$$= \frac{u^2}{8\pi A} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} [16\rho^4(\omega \cdot \mathbf{n})^5 - 32\rho^3 v(\omega \cdot \mathbf{n})^4 + 24\rho^2 v^2(\omega \cdot \mathbf{n})^3 - 8\rho v^3(\omega \cdot \mathbf{n})^2 + v^4(\omega \cdot \mathbf{n})] d\varphi ds + \frac{u^2 v^4}{8\pi A} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} < 0} (\omega \cdot \mathbf{n}) d\varphi ds, \quad (\text{B.34})$$

ou

$$q = \frac{u^2}{4\pi\rho} \left[16\rho^4 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^5 \varphi d\varphi - 32\rho^3 v \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^4 \varphi d\varphi + 24\rho^2 v^2 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^3 \varphi d\varphi - 8\rho v^3 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^2 \varphi d\varphi + v^4 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos \varphi d\varphi \right] - \frac{u^2 v^4}{2\pi\rho}. \quad (\text{B.35})$$

Resolvendo as integrais resulta

$$q = 8\rho \left[\frac{9\pi}{5(9\pi^2 - 64)} - \frac{2}{3\pi} \right]. \quad (\text{B.36})$$

Para o coeficiente r ,

$$r = \left\{ \frac{1}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} [D(x, y, \omega) - v]^4 d\varphi dx dy - \frac{1}{u^2} \left(q^2 + \frac{1}{u^2} \right) \right\}^{-1/2} \quad (\text{B.37})$$

$$= \left\{ \frac{1}{10\pi A} \int_{\partial R} \int_0^{2\pi} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \boldsymbol{\omega}) - v]^5 d\varphi ds - \frac{1}{u^2} \left(q^2 + \frac{1}{u^2} \right) \right\}^{-1/2} \quad (\text{B.38})$$

$$= \left\{ \frac{1}{10\pi A} \int_{\partial R} \int_{\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} > 0} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} [2\rho(\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}) - v]^5 d\varphi ds \right. \\ \left. - \frac{v^5}{10\pi A} \int_{\partial R} \int_{\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} < 0} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} d\varphi ds - \frac{1}{u^2} \left(q^2 + \frac{1}{u^2} \right) \right\}^{-1/2} \quad (\text{B.39})$$

$$= \left\{ \frac{1}{5\pi\rho} \left[32\rho^5 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^6 \varphi d\varphi - 80\rho^4 v \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^5 \varphi d\varphi \right. \right. \\ \left. \left. + 80\rho^3 v^2 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^4 \varphi d\varphi - 40\rho^2 v^3 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^3 \varphi d\varphi \right. \right. \\ \left. \left. + 10\rho v^4 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos^2 \varphi d\varphi - v^5 \int_{-\pi/2}^{\pi/2} \cos \varphi d\varphi \right] + \frac{2v^5}{5\pi\rho} - \frac{1}{u^2} \left(q^2 + \frac{1}{u^2} \right) \right\}^{-1/2} \quad (\text{B.40})$$

resultando em

$$r = \rho^{-2} \left\{ \left[1 + \frac{24}{5(9\pi^2 - 64)^{1/2}} \right] \left[1 - \frac{24}{5(9\pi^2 - 64)^{1/2}} \right] \right\}^{-1/2} \quad (\text{B.41})$$

APÊNDICE C

Exemplos de Obtenção de Alguns Elementos das Matrizes A e B

Elemento a_{22}

Conforme a Eq. (2.25),

$$a_{22} = \frac{1}{2\pi A} \left\{ \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} \beta_2(x, y, \varphi) \alpha_2(x, y, \varphi) d\varphi ds \right. \\ \left. - \int_R \int_0^{2\pi} [\omega \cdot \nabla \beta_2(x, y, \varphi)] \alpha_2(x, y, \varphi) d\varphi dx dy \right\}, \quad (C.1)$$

onde, no esquema de Galerkin,

$$\alpha_2(x, y, \varphi) = \beta_2(x, y, \varphi) = u[D(x, y, \omega) - v]. \quad (C.2)$$

Portanto,

$$a_{22} = \frac{1}{2\pi A} \left\{ \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} u^2 [D(x, y, \omega) - v]^2 d\varphi ds \right. \\ \left. - \int_R \int_0^{2\pi} \{ \omega \cdot \nabla u [D(x, y, \omega) - v] \} \{ u [D(x, y, \omega) - v] \} d\varphi dx dy \right\} \quad (C.3)$$

$$= \frac{1}{2\pi A} \left\{ u^2 \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} [D^2(x, y, \omega) + v^2 - 2vD(x, y, \omega)] d\varphi ds \right. \\ \left. - u^2 \int_R \int_0^{2\pi} \{ \omega \cdot \nabla [D(x, y, \omega) - v] \} [D(x, y, \omega) - v] d\varphi dx dy \right\}. \quad (C.4)$$

Como $\omega \cdot \nabla [D(x, y, \omega) - v] = 1$ para $(x, y) \in R$, a segunda integral é nula por ortogonalidade. Portanto,

$$a_{22} = \frac{1}{2\pi A} \left\{ u^2 \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} D^2(x, y, \omega) d\varphi ds + u^2 v^2 \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} d\varphi ds \right. \\ \left. - 2u^2 v \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} D(x, y, \omega) d\varphi ds \right\}. \quad (C.5)$$

Usando as Eqs. (A.8), (A.12) e (A.17)

$$a_{22} = 2u^2 v + \frac{u^2 v^2 L}{\pi A} - \frac{u^2 v}{\pi A} \int_{\partial R} \int_0^{2\pi} \omega \cdot \mathbf{n} D(x, y, \omega) d\varphi ds. \quad (C.6)$$

Pelo teorema da divergência,

$$a_{22} = 2u^2 v + \frac{u^2 v^2 L}{\pi A} - \frac{u^2 v}{\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} \omega \cdot \nabla D(x, y, \omega) d\varphi dx dy, \quad (C.7)$$

portanto, empregando a Eq. (A.7), obtém-se

$$a_{22} = \frac{u^2 v^2 L}{\pi A}. \quad (\text{C.8})$$

Elemento b_{22}

Conforme a Eq. (2.26),

$$b_{22} = \frac{1}{4\pi A} \int_{\partial R} \left[\int_{\omega \cdot \mathbf{n} < 0} |\omega \cdot \mathbf{n}| \beta_2(x, y, \varphi) d\varphi \right] \left[\int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} \alpha_2(x, y, \varphi) d\varphi \right] ds, \quad (\text{C.9})$$

portanto tem-se, para o esquema de Galerkin,

$$b_{22} = \frac{1}{4\pi A} \int_{\partial R} \left[\int_{\omega \cdot \mathbf{n} < 0} |\omega \cdot \mathbf{n}| u [D(x, y, \omega) - v] d\varphi \right] \left[\int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} u [D(x, y, \omega) - v] d\varphi \right] ds. \quad (\text{C.10})$$

Sendo $D(x, y, \omega) = 0$ para $(x, y) \in R$ e $\omega \cdot \mathbf{n} < 0$,

$$b_{22} = \frac{1}{4\pi A} \int_{\partial R} \left[(-uv) \int_{\omega \cdot \mathbf{n} < 0} |\omega \cdot \mathbf{n}| d\varphi \right] \left[u \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \omega) - v] d\varphi \right] ds, \quad (\text{C.11})$$

$$b_{22} = \frac{-2u^2v}{4\pi A} \left\{ \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \omega) - v] d\varphi \right\} ds, \quad (\text{C.12})$$

$$b_{22} = \frac{-u^2v}{2\pi A} \left\{ \int_{\partial R} \int_0^{2\pi} \omega \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \omega) - v] d\varphi ds \right. \\ \left. - \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} < 0} \omega \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \omega) - v] d\varphi ds \right\}. \quad (\text{C.13})$$

Usando o teorema da divergência e a Eq. (A.8), obtém-se

$$b_{22} = -u^2v + \frac{u^2v^2L}{\pi A}. \quad (\text{C.14})$$

Elemento a_{23}

Conforme a Eq. (2.25),

$$a_{23} = \frac{1}{2\pi A} \left\{ \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} \beta_2(x, y, \varphi) \alpha_3(x, y, \varphi) d\varphi ds - \int_R \int_0^{2\pi} [\omega \cdot \nabla \beta_2(x, y, \varphi)] \alpha_3(x, y, \varphi) d\varphi dx dy \right\}, \quad (\text{C.15})$$

onde, no esquema de Galerkin,

$$\beta_2(x, y, \varphi) = \alpha_2(x, y, \varphi) = u[D(x, y, \omega) - v] \quad (\text{C.16})$$

e

$$\alpha_3(x, y, \varphi) = \beta_3(x, y, \varphi) = r \left\{ [D(x, y, \omega) - v][D(x, y, \omega) - v - q] - \frac{1}{u^2} \right\}. \quad (\text{C.17})$$

Portanto,

$$a_{23} = \frac{1}{2\pi A} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} (\omega \cdot \mathbf{n}) u [D(x, y, \omega) - v] r \left\{ [D(x, y, \omega) - v] \times [D(x, y, \omega) - v - q] - \frac{1}{u^2} \right\} d\varphi ds - \frac{1}{2\pi A} \times \int_R \int_0^{2\pi} \omega \cdot \nabla \left\{ u [D(x, y, \omega) - v] \right\} r \left\{ [D(x, y, \omega) - v][D(x, y, \omega) - v - q] - \frac{1}{u^2} \right\} d\varphi dx dy, \quad (\text{C.18})$$

$$a_{23} = \frac{ur}{2\pi A} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \omega) - v] \left\{ [D(x, y, \omega) - v]^2 - q [D(x, y, \omega) - v] - \frac{1}{u^2} \right\} d\varphi ds - \frac{ur}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} \omega \cdot \nabla [D(x, y, \omega) - v] \left\{ [D(x, y, \omega) - v]^2 - q [D(x, y, \omega) - v] - \frac{1}{u^2} \right\} d\varphi dx dy. \quad (\text{C.19})$$

Notando que $\omega \cdot \nabla [D(x, y, \omega) - v] = 1$, $(x, y) \in R$,

$$a_{23} = \frac{ur}{2\pi A} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} \left\{ [D(x, y, \omega) - v]^3 - q [D(x, y, \omega) - v]^2 - \frac{1}{u^2} [D(x, y, \omega) - v] \right\} d\varphi ds - \frac{ur}{2\pi A} \int_R \int_0^{2\pi} \left\{ [D(x, y, \omega) - v]^2 - q [D(x, y, \omega) - v] - \frac{1}{u^2} \right\} d\varphi dx dy. \quad (\text{C.20})$$

O segundo termo do lado direito da equação anterior é nulo por ortogonalidade. Portanto

$$a_{23} = I1 + I2 + I3 \quad (C.21)$$

onde

$$I1 = \frac{ur}{2\pi A} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \omega) - v]^3 d\varphi ds. \quad (C.22)$$

$$I2 = -\frac{urq}{2\pi A} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \omega) - v]^2 d\varphi ds. \quad (C.23)$$

$$I3 = -\frac{r}{2u\pi A} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \omega) - v] d\varphi ds. \quad (C.24)$$

A primeira integral pode ser escrita

$$I1 = \frac{ur}{2\pi A} \int_{\partial R} \int_0^{2\pi} \omega \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \omega) - v]^3 d\varphi ds - \frac{ur}{2\pi A} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} < 0} \omega \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \omega) - v]^3 d\varphi ds \quad (C.25)$$

e pode ser resolvida utilizando a Eq. (A.11), reescrita como

$$\int_{\partial R} \int_0^{2\pi} \omega \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \omega) - v]^3 d\varphi ds = \frac{6\pi A}{u^2} \quad (C.26)$$

e o fato que $D(x, y, \omega) = 0$ para $\omega \cdot \mathbf{n} < 0$ em ∂R . Portanto

$$I1 = \frac{3r}{u} - \frac{urv^3 L}{\pi A}. \quad (C.27)$$

Analogamente, a segunda integral

$$I2 = -\frac{urq}{2\pi A} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} [D^2(x, y, \omega) - 2vD(x, y, \omega) + v^2] d\varphi ds \quad (C.28)$$

pode ser resolvida utilizando a Eq. (A.12). Tem-se

$$I2 = -\frac{urq}{2\pi A} \left\{ 4\pi Av - 2v \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} D(x, y, \omega) d\varphi ds + 2v^2 L \right\}. \quad (C.29)$$

$$I2 = -\frac{urq}{2\pi A} \left\{ 4\pi Av - 2v \int_{\partial R} \int_0^{2\pi} \omega \cdot \mathbf{n} D(x, y, \omega) d\varphi ds + 2v \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} < 0} \omega \cdot \mathbf{n} D(x, y, \omega) d\varphi ds + 2v^2 L \right\}. \quad (C.30)$$

A segunda integral no lado direito da Eq. (C.30) é nula conforme a Eq. (A.8). Aplicando o teorema da divergência obtém-se

$$I2 = -\frac{urq}{2\pi A} \left\{ 4\pi Av - 2v \int_R \int_0^{2\pi} \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla D(x, y, \boldsymbol{\omega}) d\varphi dx dy + 2v^2 L \right\}. \quad (C.31)$$

Utilizando a Eq. (A.7) resulta

$$I2 = -\frac{uv^2 r q L}{\pi A}. \quad (C.32)$$

Finalmente, a terceira integral é reescrita como

$$I3 = -\frac{r}{2u\pi A} \left\{ \int_{\partial R} \int_0^{2\pi} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \boldsymbol{\omega}) - v] d\varphi ds - \int_{\partial R} \int_{\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} < 0} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \boldsymbol{\omega}) - v] d\varphi ds \right\}. \quad (C.33)$$

Usando o teorema da divergência e o fato que $D(x, y, \boldsymbol{\omega}) = 0$ para $\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} < 0$ em ∂R ,

$$I3 = -\frac{r}{2u\pi A} \left\{ \int_R \int_0^{2\pi} \boldsymbol{\omega} \cdot \nabla [D(x, y, \boldsymbol{\omega}) - v] d\varphi dx dy - 2vL \right\}, \quad (C.34)$$

Tendo em vista a Eq. (A.7)

$$I3 = -\frac{r}{u} + \frac{vrL}{u\pi A}. \quad (C.35)$$

Portanto,

$$a_{23} = \frac{2r}{u} - \frac{uvrL}{\pi A} \left(v^2 + vq - 1/u^2 \right). \quad (C.36)$$

Elemento b_{23}

Conforme a Eq. (2.26), usando o esquema de Galerkin,

$$b_{23} = \frac{1}{4\pi A} \int_{\partial R} \left\{ \int_{\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} < 0} |\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}| u [D(x, y, \boldsymbol{\omega}) - v] d\varphi \right\} \times \left\{ \int_{\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} > 0} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} r \left\{ [D(x, y, \boldsymbol{\omega}) - v]^2 - q[D(x, y, \boldsymbol{\omega}) - v] - \frac{1}{u^2} \right\} d\varphi \right\} ds \quad (C.37)$$

$$= \frac{ur}{4\pi A} \int_{\partial R} \left[\int_{\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} < 0} |\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}| D(x, y, \boldsymbol{\omega}) d\varphi - v \int_{\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} < 0} |\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n}| d\varphi \right] \times \left\{ \int_{\boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} > 0} \boldsymbol{\omega} \cdot \mathbf{n} \left\{ [D(x, y, \boldsymbol{\omega}) - v]^2 - q[D(x, y, \boldsymbol{\omega}) - v] - \frac{1}{u^2} \right\} d\varphi \right\} ds. \quad (C.38)$$

Usando o fato que $D(x, y, \omega) = 0$ para $\omega \cdot \mathbf{n} < 0$ em ∂R ,

$$b_{23} = -\frac{2uvr}{4\pi A} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} \left\{ [D(x, y, \omega) - v]^2 - q[D(x, y, \omega) - v] - \frac{1}{u^2} \right\} d\varphi ds \quad (\text{C.39})$$

$$\begin{aligned} &= -\frac{2uvr}{4\pi A} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \omega) - v]^2 d\varphi ds \\ &\quad + \frac{2uvrq}{4\pi A} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \omega) - v] d\varphi ds \\ &\quad + \frac{2uvr}{4u^2\pi A} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} d\varphi ds, \quad (\text{C.40}) \end{aligned}$$

ou

$$b_{23} = I1 + I2 + I3. \quad (\text{C.41})$$

A primeira integral

$$I1 = -\frac{2uvr}{4\pi A} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \omega) - v]^2 d\varphi ds, \quad (\text{C.42})$$

$$\begin{aligned} I1 = -\frac{2uvr}{4\pi A} \left[\int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} D^2(x, y, \omega) d\varphi ds + v^2 \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} d\varphi ds \right. \\ \left. - 2v \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} D(x, y, \omega) d\varphi ds \right], \quad (\text{C.43}) \end{aligned}$$

Da Eq. (A.12), onde

$$\int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} D^2(x, y, \omega) d\varphi ds = 4\pi Av, \quad (\text{C.44})$$

e utilizando a Eq. (A.17) tem-se

$$\begin{aligned} I1 = -\frac{2uvr}{4\pi A} \left[4\pi Av + 2v^2 L - 2v \int_{\partial R} \int_0^{2\pi} \omega \cdot \mathbf{n} D(x, y, \omega) d\varphi ds \right. \\ \left. + 2v \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} < 0} \omega \cdot \mathbf{n} D(x, y, \omega) d\varphi ds \right]. \quad (\text{C.45}) \end{aligned}$$

Sendo $D(x, y, \omega) = 0$ para $(x, y) \in \partial R$ e $\omega \cdot \mathbf{n} < 0$ e aplicando o teorema da divergência, a equação anterior pode ser expressa como

$$I1 = -\frac{2uvr}{4\pi A} \left[4\pi Av + 2v^2 L - 2v \int_R \int_0^{2\pi} \omega \cdot \nabla D(x, y, \omega) d\varphi dx dy \right]. \quad (\text{C.46})$$

Considerando o fato que $\omega \cdot \nabla D(x, y, \omega) = 1$ para $(x, y) \in R$

$$I1 = -\frac{2uvr}{4\pi A} \left(4v\pi A + 2v^2 L - 4v\pi A \right), \quad (\text{C.47})$$

$$I1 = -\frac{uv^3rL}{\pi A}. \quad (C.48)$$

A segunda integral

$$I2 = \frac{2uvrq}{4\pi A} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \omega) - v] d\varphi ds, \quad (C.49)$$

$$I2 = \frac{uvrq}{2\pi A} \left\{ \int_{\partial R} \int_0^{2\pi} \omega \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \omega) - v] d\varphi ds - \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} < 0} \omega \cdot \mathbf{n} [D(x, y, \omega) - v] d\varphi ds \right\}. \quad (C.50)$$

Usando o teorema da divergência e o fato que $D(x, y, \omega) = 0$ para $\omega \cdot \mathbf{n} < 0$ em ∂R .

$$I2 = \frac{uvrq}{2\pi A} \left\{ \int_R \int_0^{2\pi} \omega \cdot \nabla [D(x, y, \omega) - v] d\varphi dx dy - 2vL \right\}. \quad (C.51)$$

Considerando o fato que $\omega \cdot \nabla D(x, y, \omega) = 1$ para $(x, y) \in R$

$$I2 = \frac{uvrq}{2\pi A} (2\pi A - 2vL), \quad (C.52)$$

portanto,

$$I2 = uvrq - \frac{uv^2rqL}{\pi A}. \quad (C.53)$$

Finalmente, a terceira integral

$$I3 = \frac{2uvr}{4u^2\pi A} \int_{\partial R} \int_{\omega \cdot \mathbf{n} > 0} \omega \cdot \mathbf{n} d\varphi ds, \quad (C.54)$$

de acordo com a Eq. (A.17), resulta em

$$I3 = \frac{uvrL}{u^2\pi A}. \quad (C.55)$$

Portanto,

$$b_{23} = uv \left[qr - \frac{rL}{\pi A} (v^2 + qv - 1/u^2) \right]. \quad (C.56)$$

APÊNDICE D

Modificação Introduzida no Código MCNP para Simulação do Modelo de Albedo Independente da Energia

Os cálculos Monte Carlo independentes da energia foram feitos com uma versão modificada³¹ do código MCNP. O problema de duto vazio foi modelado usando a opção de reflexão “white” na parede interna do duto de seção circular. A reflexão “white” foi amostrada considerando o vetor normal \mathbf{n} no ponto da parede onde a reflexão ocorre, orientado no sentido do interior do duto. O co-seno do ângulo polar e o ângulo azimutal de reflexão em relação à normal foram amostrados uniformemente em $[0,1]$ e $[0,2\pi]$, respectivamente. Os correspondentes co-senos diretores da partícula refletida foram obtidos como discutido na Ref. 4. Em adição, o modelo incluiu uma fonte cossenoidal na entrada do duto ($z = 0$), uniformemente distribuída ao longo da seção transversal do duto.

A modificação introduzida no MCNP é como segue. Um cartão foi introduzido na subrotina REFLECT para multiplicar o peso da partícula pela probabilidade de reflexão na parede, c , que aparece na Eq. (2.6). Esta quantidade é introduzida como um dado de entrada do código no cartão DBCN. Desta maneira, a condição de reflexão “white” no MCNP é transformada em condição de albedo.

Os resultados Monte Carlo publicados são dados com erros absolutos em vez do desvio padrão usual que é fornecido pelo código, com o propósito de mostrar de uma maneira mais direta a sua precisão.

APÊNDICE E

Modificação Introduzida no Código MCNP para Simulação do Modelo de Albedo Dependente da Energia

Para obter resultados de comparação, com a finalidade de assegurar a implementação correta do método aproximado em multigrupo, modificou-se o código MCNP.²⁴ A modificação consistiu em possibilitar que o código efetuasse os cálculos, em multigrupo, de um duto vazio, eliminando o transporte na parede, o que conseqüentemente, reduz as dificuldades de análise do problema. O procedimento consiste em modificar o tratamento da condição de reflexão, introduzindo nesta uma matriz de albedos que é calculada, previamente, pelo método Monte Carlo ou qualquer método determinístico, como ordenadas discretas ou harmônicos esféricos.¹

Essencialmente, as alterações foram feitas na sub-rotina REFLECT que simula a reflexão especular e também a reflexão difusa de uma partícula que incide em uma superfície. Esta sub-rotina foi modificada para ler a matriz de albedos multigrupo, efetuar a soma destes nos grupos finais para calcular a probabilidade de reflexão total e construir as distribuições de probabilidades acumuladas para amostrar o grupo em que a partícula é emitida. A simulação de transporte consiste, portanto, em calcular a probabilidade de reflexão da partícula na parede do duto. O cálculo é iniciado com a amostragem de um grupo de energia e das coordenadas angulares da partícula emitida, sendo o peso diminuído pela probabilidade de reflexão. Novas direções e trajetórias são amostradas, sucessivamente, até que a partícula escape do sistema.

No arquivo de entrada de dados é acrescentado o cartão IDUM onde é introduzido o número total de grupos de energia e o cartão RDUM que contém a matriz de albedos e a estrutura dos grupos de energia (o limite superior de cada grupo). A versão modificada da sub-rotina REFLECT é dada a seguir.

Sub-Rotina REFLECT Modificada

```

*define pcdos,cheap
*/ ----- reflect
*ident re
*i, re.5
    dimension enr(6),albed(6,6),xlimgrp(6),abso(6)
*ident re4b
*i, re4b.3
    japassou=idum(2)
    if(japassou.eq.1) go to 13
    idum(2)=1
    ngrupo=idum(1)
    kk=0
    do 16 iw=1,nggrupo
    do 16 jw=1,nggrupo
    kk=kk+1
    albed(iw,jw)=rdum(kk)
c    write(*,*) ' +++',iw, jw, albed(iw,jw)
16  continue
    do 15 ig=1,nggrupo
    xlimgrp(ig)=rdum(nggrupo*nggrupo + ig)
15  continue
    enr(1)=xlimgrp(1)/2.
    do 17 ig=2,nggrupo
    enr(ig)=(xlimgrp(ig)+xlimgrp(ig-1))/2.
17  continue
    do 200 i=1,nggrupo
    sum=0.0
    do 210 j=1,nggrupo
    sum=albed(i,j)+sum
210  continue
    abso(i)=sum
    do 220 j=1,nggrupo
    albed(i,j)=albed(i,j)/sum
220  continue
200  continue
    do 230 i=1,nggrupo
    do 240 j=2,nggrupo
    albed(i,j)=albed(i,j)+albed(i,j-1)
240  continue
230  continue
    do 300 i=1,nggrupo
    write(*,*) ' ++',i, xlimgrp(i), enr(i), abso(i)
    do 301 j=1,nggrupo
    write(*,*) ' ++',i, j, albed(i,j)
301  continue
300  continue
13  continue
    do 12 ig=1,nggrupo

```

```
    if(erg.gt.xlingrp(ig)) go to 12
    ibex=ig
    exit
12  continue
    wgt=wgt*abso(ibex)
    rnd=rang()
    do 11 j1=1,ngrupa
    if(rnd.gt.albed(ibex,j1)) go to 11
    ih = j1
    exit
11  continue
    erg=enr(ih)
*/
```

APÊNDICE F

Estruturas de Grupos de Energia e Composição do Concreto Usado nos Cálculos Monte Carlo

As estruturas de grupos de energia e a composição do concreto utilizadas na definição dos problemas resolvidos nas Seções 6.3 e 6.4 são apresentadas nas Tabelas F.1 e F.2, respectivamente.

Tabela F.1: Estruturas de Grupos de Energia

Grupo de Energia	Faixa Térmica (eV)	Faixa Rápida (MeV)	
	concreto/ferro	concreto	ferro
1	0,000 – 0,001	0,001 – 0,010	4,00 – 6,00
2	0,001 – 0,010	0,010 – 0,100	6,00 – 8,00
3	0,010 – 1,000	0,100 – 1,000	8,00 – 10,00
4		1,000 – 10,00	

Tabela F.2: Composição do Concreto Usado nos Cálculos Monte Carlo

Elemento	Densidade Atômica (10^{21} átomos/cm ³)
H	13,75
O	45,87
Al	1,743
Si	20,15

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- 1 – BELL, G. I.; GLASSTONE, S. *Nuclear reactor theory*. Van Nostrand Reinhold, New York, 1970.
- 2 – BRIESMEISTER, J.F., Ed. *MCNP—A general Monte Carlo N-particle transport code*. Version 4B, LA-12625-M, Los Alamos National Laboratory. Los Alamos, NM, 1997.
- 3 – CALDEIRA, A. D.; CHALHOUB, E. S. A program for generating pointwise weighting functions. *Ann. Nucl. Energy*, v. 20(9). p. 606-609, 1993.
- 4 – CARTER, L. L.; CASHWELL, E. D. *Particle-transport simulation with the Monte Carlo method*. ERDA Critical Review Series, TID-26607, ERDA Technical Information Center, Oak Ridge, TN, 1975.
- 5 – CHILTON, A. B.; SHULTS, J. K.; FAW, R. E. *Principles of radiation shielding*. Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1984.
- 6 – DAVIS, P. J.; POLONSKY, I. Numerical interpolation, differentiation, and integration. *Handbook of mathematical functions*. p. 875, ABRAMOWITZ, M.; STEGUN, I. A., (Eds.), National Bureau of Standards, Washington, D.C., 1964.
- 7 – DONGARRA, J. J.; BUNCH, J. R.; MOLER, C. B.; STEWART, G. W. *LINPACK users's guide*. Siam, Philadelphia, 1979.
- 8 – ERDÉLYI, A.; MAGNUS, W.; OBERHETTINGER, F.; TRICOMI, F. G. *Higher transcendental functions*. v. 1, McGraw-Hill, NY, 1953.
- 9 – ERDÉLYI, A.; MAGNUS, W.; OBERHETTINGER, F.; TRICOMI, F. G. *Tables of integral transforms*. v. 2, McGraw-Hill, NY, 1954.
- 10 – GARCIA, R. D. M. Trabalho não publicado, 1995.
- 11 – GARCIA, R. D. M.; ONO, S. A comparison of three quadrature schemes for discrete-ordinates calculations of neutral particle transport in ducts. *Mathe-*

matics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications, Madrid, Spain, v. 1, Sep. 1999.

- 12 – GARCIA, R. D. M.; ONO, S. Improved discrete-ordinates calculations for an approximate model of neutral particle transport in ducts. *Nucl. Sci. Eng.*, v. 133(1), p. 40-54, 1999.
- 13 – GARCIA, R. D. M.; ONO, S.; VIEIRA, W. J. The third basis function relevant to an approximate model of neutral particle transport in ducts. *Nucl. Sci. Eng.*, v. 136(3), p. 388-398, 2000.
- 14 – GAUTSCHI, W. Computational aspects of three-term recurrence relations. *SIAM Rev.*, v. 9, p. 24-82, 1967.
- 15 – GAUTSCHI, W. On generating orthogonal polynomials. *SIAM J. Sci. Stat. Comput.*, v. 3, p. 289-317, 1982.
- 16 – GAUTSCHI, W. Orthogonal polynomials—constructive theory and applications. *J. Comput. Appl. Math.*, 12&13, p. 61-76, 1985.
- 17 – GAUTSCHI, W. Computational aspects of orthogonal polynomials, NEVAI, P. (Ed.) *Orthogonal polynomials—theory and practice*. Dordrecht, The Netherlands: Kluwer Academic Publishers, p. 181-216, 1990.
- 18 – GOLUB, G. H.; WELSCH, J. H. Calculation of Gauss quadrature rules. *Math. Comp.*, v. 23, p. 221-230, 1969.
- 19 – KELLER, J. B. On the solution of the Boltzmann equation for rarefied gases. *Comm. Pure Appl. Math.*, v. 1, p. 275-279, 1948.
- 20 – KUŠČER, I. Phenomenological aspects of gas-surface interaction, COHEN, E. G. D. and FISZDON, W. (Eds.) *Fundamental problems in statistical mechanics, IV*. Polish Academy of Science, Wrocław, Warsaw, 1978.
- 21 – LARSEN, E. W. A one-dimensional model for three-dimensional transport in a pipe. *Transp. Theory Stat. Phys.*, v. 13(5), p. 599-614, 1984.
- 22 – LARSEN, E. W.; MALVAGI, F.; POMRANING, G. C. One-dimensional models for neutral particle transport in ducts. *Nucl. Sci. Eng.*, v. 93, p. 13-30, 1986.

- 23 – NOBLE, B.; DANIEL, J. W. *Applied linear algebra*. 2nd ed., Prentice-Hall, Englewood Cliffs, NJ, 1977.
- 24 – ONO, S.; VIEIRA, W. J.; GARCIA, R. D. M. Cálculos de transporte em dutos utilizando coeficientes de albedo multigrupo no código MCNP. *XII ENFIR Encontro Nacional de Física de Reatores e Termohidráulica*, 15 a 20 Out. 2000, RJ, 2000.
- 25 – PRINJA, A. K. On the solution of a nonlocal transport equation by the Wiener-Hopf method. *Ann. Nucl. Energy*, v. 23(4/5), p. 429-440, 1996.
- 26 – PRINJA, A. K. Comunicação privada, 2000.
- 27 – PRINJA, A. K.; POMRANING, G. C. Statistical model of transport in a vacuum. *Transp. Theory Stat. Phys.*, v. 15(5), p. 567-589, 1984.
- 28 – ROSE, P. F.; DUNFORD, C. L. (Eds.) *Data formats and procedures for the evaluated nuclear data file ENDF-6*. BNL-NCS 44945, National Nuclear Data Center, Brookhaven National Laboratory, NY, 1991.
- 29 – SIEWERT, C. E. Comunicação pessoal, 1999.
- 30 – SMITH, B. T.; BOYLE, J. M.; DONGARRA, J. J.; GARBOW, B. S.; IKEBE, F.; KLEMA, V. C.; MOLER, C. B. *Matrix eigensystem routines—EISPACK guide*. Springer-Verlag, Berlin, 1976.
- 31 – VIEIRA, W. J. Comunicação privada, 1999.
- 32 – VIEIRA, W. J.; STEVENS, P. N. Analysis of the sampling distribution in Monte Carlo radiation transport calculations. *Ann. Nucl. Energy*, v. 22, p. 51-55, 1995.



instituto de pesquisas energéticas e nucleares

Travessa "R", nº 400 - Cidade Universitária - Butantã
São Paulo - CEP: 05508-900

Tel.: (011) 816-9000 - Fax.: (011) 212-3546

<http://www.ipen.br>

O ipen é uma autarquia vinculada à Secretaria de Ciência, Tecnologia e Desenvolvimento Econômico do Estado de São Paulo, gerida técnica, administrativa e financeiramente pela Comissão Nacional de Energia Nuclear e associada à Universidade de São Paulo para fins de ensino de Pós-Graduação.