

Método Linear Nodal no Esquema Iterativo NBI¹

J.H. ZANI², Fundação Educacional Serra dos Órgãos, FESO, 25964-000 Alto Teresópolis 111, RJ, Brasil.

Resumo. Este trabalho investiga a performance do esquema iterativo de inversão por blocos de um nodo, arquitetado com as equações discretizadas do método linear nodal. O método é aplicado a um problema de transporte de nêutrons, em meio não-multiplicativo, a um grupo de energia, considerando-se espalhamento isotrópico. A modelagem matemática trata da migração dos nêutrons na formulação de ordenadas discretas, em geometria bidimensional e em sistemas de coordenadas Cartesianas. Resultados numéricos para o problema-modelo ilustram o desempenho computacional do método linear nodal no esquema iterativo de inversão por blocos.

1. Introdução

A equação de transporte de nêutrons independente do tempo que considera a distribuição das partículas em meio não multiplicativo, a um grupo de energia, com espalhamento isotrópico, na formulação de ordenadas discretas (S_N), em geometria bidimensional e em sistemas de coordenadas Cartesianas é um conseqüente conjunto de equações diferenciais parciais (EDP) que, ao ser integrado no domínio e transversalmente, gera um sistema composto de equações lineares e algébricas de balanço espacial e de equações diferenciais ordinárias (EDO), onde o número de incógnitas é maior que o número de equações. O desconhecimento aí está em como representar exatamente as dependências espaciais dos termos de fugas transversais.

Na busca das equações auxiliares que tornem o sistema determinado vários métodos foram desenvolvidos. O método constante constante nodal (**CCN**) [1] aproxima por uma constante as dependências espaciais dos termos de fugas transversais e as dependências espaciais dos termos de fonte de espalhamento. O método linear linear nodal (**LLN**) [1, 4] aproxima tais dependências espaciais linearmente. O método linear nodal (**LN**) é uma variação do método **LLN** onde são adotadas as aproximações de diferenças diamante (**DD**) [1, 4] para os momentos espaciais de primeira ordem. Em todos estes métodos, onde há aproximação para os termos de espalhamento, é usual arranjar-se as equações discretizadas para o esquema de iteração na fonte, esquema (**SI**), cf. *source iteration* [3]. O método espectro nodal (**SGF-CN**), cf. *spectro Green's function-constant nodal* [2], aproxima por constantes as dependências espaciais dos termos de fugas transversais, mas não utiliza aproximações para os termos de fonte de espalhamento. Neste método, as equações

¹FESO.

²jhzani@hotmail.com

discretizadas são naturalmente arranjadas para o esquema de inversão por blocos de um nodo.

O desenvolvimento dado por W. F. Walters para os métodos nodais lineares [4] e o trabalho de R. C Barros no desenvolvimento do método **SGF-CN** [2] constituíram os precursores históricos deste desenvolvimento. Estes trabalhos motivaram a idealização de um método com aproximação linear para as dependências espaciais dos fluxos angulares nos termos de fugas transversais, sem aproximação espacial para os termos de fonte de espalhamento (**SGF-LN**), cf. *spectro Green's function linear nodal*. Porém, foi necessário investigar a estrutura e o desempenho do esquema iterativo de inversão por blocos quando utilizadas as aproximações lineares para as fugas transversais. A presente pesquisa concentrou-se inicialmente na arquitetura do algoritmo e no comportamento da convergência de um método com aproximação linear para as fugas transversais e para os termos de fonte de espalhamento, porém, com as equações discretizadas arranjadas para o esquema iterativo de inversão por blocos de um nodo (**LN-NBI**), cf. *linear nodal one-node block inversion* [5], pois seria relevante para o desenvolvimento futuro do método **SGF-LN**.

2. Modelagem Matemática

Emprega-se a equação de transporte de Boltzmann para nêutrons em regime estacionário, em meio não multiplicativo, a um grupo de energia, considerando espalhamento isotrópico, em geometria bidimensional, no sistema de coordenadas Cartesianas e na formulação de ordenadas discretas (S_N). Com estas considerações e aproximações a modelagem matemática conseqüente é formada por um sistema de EDP, que estabelecem balanços espaciais das taxas de produções e perdas de nêutrons:

$$\mu_m \frac{\partial}{\partial x} \psi_m(x, y) + \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \psi_m(x, y) + \sigma_t(x, y) \psi_m(x, y) = S_{esp}(x, y) + q(x, y), \quad (2.1)$$

onde $S_{esp}(x, y) = [\sigma_{so}(x, y)/4] \sum_{n=1}^M \psi_n(x, y) \omega_n$.

Na equação (2.1), $m = 1:M$, $M = (N+2)N/2$ é o número de ordenadas discretas, N é a ordem da quadratura angular, (x, y) é um ponto do domínio bidimensional, w_n representa o peso da angular associado à direção discreta (μ_m, η_m) , σ_t é a seção de choque macroscópica total, σ_{so} é a componente isotrópica da seção de choque macroscópica de espalhamento, ψ_m é o fluxo angular de nêutrons que se deslocam na direção discreta (μ_m, η_m) e q representa outras fontes isotrópicas.

3. Método LLN

Para realizar uma modelagem computacional, considera-se uma malha espacial bidimensional retangular e em um nodo homogêneo, aplica-se nas equações (2.1) os

operadores:

$$L_{IJ}^{xy} \equiv \frac{3^I 3^J}{h_x h_y} \int_{x_e}^{x_d} dx \int_{y_i}^{y_s} dy(\bullet) p_I(x) p_J(y), \quad (I, J) = (0, 0), (0, 1) \text{ e } (1, 0);$$

$$L_I^x \equiv \frac{3^I}{h_x} \int_{x_e}^{x_d} dx(\bullet) p_I(x), \quad I = 0, 1; \quad L_J^y \equiv \frac{3^J}{h_y} \int_{y_i}^{y_s} dy(\bullet) p_J(y), \quad J = 0, 1.$$

Os índices i , e , s e d , referem-se, respectivamente, às faces: inferior, esquerda, superior e direita do nodo da malha espacial. $p_I(x)$ e $p_J(y)$ são os polinômios:

$$p_0(x) = p_0(y) = 1, \quad p_1(x) = 2(x - \bar{x})/h_x \quad \text{e} \quad p_1(y) = 2(y - \bar{y})/h_y,$$

onde introduziu-se: $\bar{x} = (x^d + x^e)/2$ e $\bar{y} = (y^i + y^s)/2$.

As aplicações dos operadores L_{00}^{xy} , L_{10}^{xy} e L_{01}^{xy} nas equações (2.1), no nodo homogêneo da malha de discretização espacial, fornecem, respectivamente, as seguintes equações de balanço espacial:

$$(\psi_m^d - \psi_m^e)/\varepsilon_{x,m} + (\psi_m^s - \psi_m^i)/\varepsilon_{y,m} + \bar{\psi}_m = (\bar{S} + q)/\sigma_T, \quad (3.1)$$

$$3(\psi_m^d + \psi_m^e - 2\bar{\psi}_m)/\varepsilon_{x,m} + (\theta_m^s - \theta_m^i)/\varepsilon_{y,m} + \psi_m^x = S^x/\sigma_T \quad (3.2)$$

e

$$3(\psi_m^i + \psi_m^s - 2\bar{\psi}_m)/\varepsilon_{y,m} + (\theta_m^d - \theta_m^e)/\varepsilon_{x,m} + \psi_m^y = S^y/\sigma_T. \quad (3.3)$$

Nas equações (3.1) a (3.3) foram definidos:

- os momentos espaciais médios de ordem zero do fluxo angular de nêutrons nas faces horizontais (H) e verticais (V) do nodo

$$\psi_m^H \equiv L_0^x \psi_m(x, y^H), \quad H = s, i \quad \text{e} \quad \psi_m^V \equiv L_0^y \psi_m(x^V, y), \quad V = d, e;$$

- os momentos espaciais médios de primeira ordem do fluxo angular de nêutrons nas faces H e V do nodo

$$\theta_m^H \equiv L_1^x \psi_m(x, y^H), \quad H = s, i \quad \text{e} \quad \theta_m^V \equiv L_1^y \psi_m(x^V, y), \quad V = d, e;$$

- os momentos espaciais médios de ordem zero do fluxo angular de nêutrons no interior do nodo

$$\bar{\psi}_m \equiv L_{00}^{xy} \psi_m(x, y);$$

- os momentos espaciais médios de primeira ordem nas variáveis x e y do fluxo angular de nêutrons no interior do nodo

$$\psi_m^x \equiv L_{10}^{xy} \psi_m(x, y) \quad \text{e} \quad \psi_m^y \equiv L_{01}^{xy} \psi_m(x, y);$$

- a fonte de espalhamento média de ordem zero no interior do nodo

$$\bar{S} \equiv L_{00}^{xy} S_{esp}(x, y);$$

- as fontes de espalhamento médias de primeira ordem nas variáveis x e y no interior do nodo

$$S^x \equiv L_{10}^{xy} S_{esp}(x, y) \quad e \quad S^y \equiv L_{01}^{xy} S_{esp}(x, y);$$

- as quantidades adimensionais

$$\varepsilon_{x,m} \equiv h_x \sigma_T / \mu_m \quad e \quad \varepsilon_{y,m} \equiv h_y \sigma_T / \eta_m.$$

As aplicações dos operadores L_I^x e L_J^y , com $I = J = 0, 1$, nas equações (2.1) fornecem o seguinte sistema de EDO:

$$\mu_m \frac{d}{dx} \hat{\psi}_m(x) + (\eta_m/h_y) [\psi_m(x, y^s) - \psi_m(x, y^i)] + \sigma_T \hat{\psi}_m(x) = (\sigma_{so}/4) \sum_{n=1}^M \omega_n \hat{\psi}_n(x) + q, \quad (3.4)$$

$$\begin{aligned} \mu_m \frac{d}{dx} \hat{\theta}_m(x) + \sigma_T \hat{\theta}_m(x) = \\ 6(\eta_m/h_y) [\hat{\psi}_m(x) - \frac{1}{2}(\psi_m(x, y^s) - \frac{1}{2}(\psi_m(x, y^i)))] + (\sigma_{so}/4) \sum_{n=1}^M \omega_n \hat{\theta}_n(x), \end{aligned} \quad (3.5)$$

$$\eta_m \frac{d}{dy} \tilde{\psi}_m(y) + (\mu_m/h_x) [\psi_m(x^d, y) - \psi_m(x^e, y)] + \sigma_T \tilde{\psi}_m(y) = (\sigma_{so}/4) \sum_{n=1}^M \omega_n \tilde{\psi}_n(y) + q, \quad (3.6)$$

e

$$\begin{aligned} \eta_m \frac{d}{dy} \tilde{\theta}_m(y) + \sigma_T \tilde{\theta}_m(y) = \\ 6(\mu_m/h_x) [\tilde{\psi}_m(y) - \frac{1}{2}(\psi_m(x^d, y) - \frac{1}{2}(\psi_m(x^e, y)))] + (\sigma_{so}/4) \sum_{n=1}^M \omega_n \tilde{\theta}_n(y), \end{aligned} \quad (3.7)$$

onde: $\hat{\psi}_m(x) \equiv L_0^y \psi_m(x, y)$, $\hat{\theta}_m(x) \equiv L_1^y \psi_m(x, y)$, $\tilde{\psi}_m(y) \equiv L_0^x \psi_m(x, y)$
e $\tilde{\theta}_m(y) \equiv L_1^x \psi_m(x, y)$.

Se as dependências espaciais dos termos de fugas transversais nas faces dos nodos fossem conhecidas, as $3M$ equações lineares e algébricas de balanço espacial mais as soluções das $4M$ EDO, junto às condições de contorno nodais, formariam um sistema de equações lineares e algébricas a $7M$ equações e $7M$ incógnitas, que poderiam ser arranjadas para um esquema iterativo conveniente. Entretanto, as dependências espaciais dos termos de fugas transversais nas faces dos nodos não são conhecidas.

Para obter o conjunto de equações discretizadas do método **LLN** são introduzidas as seguintes aproximações lineares para as dependências espaciais dos fluxos angulares nas faces dos nodos e para as dependências espaciais das fontes de espalhamento no interior dos nodos da malha espacial:

$$\begin{aligned}\psi_m(x, y^s) &= p_0(x) \psi_m^s + s(\mu_m) p_1(x) \theta_m^s, & \psi_m(x, y^i) &= p_0(x) \psi_m^i + s(\mu_m) p_1(x) \theta_m^i, \\ \psi_m(x^e, y) &= p_0(y) \psi_m^e + s(\eta_m) p_1(y) \theta_m^e, & \psi_m(x^d, y) &= p_0(y) \psi_m^d + s(\eta_m) p_1(y) \theta_m^d\end{aligned}$$

e

$$S_{esp}(x, y) = p_0(x) p_0(y) \bar{S} + s(\mu_m) p_1(x) S^x + s(\eta_m) p_1(y) S^y,$$

onde $s(\mu_m)$ e $s(\eta_m)$ são os sinais das ordenadas discretas em cada sentido de varredura de transporte.

Integrando as equações (3.4) e (3.5) em $x^e \leq x \leq x^d$ e as equações (3.6) e (3.7) em $y^i \leq y \leq y^s$ e as manipulando junto às equações (3.1) a (3.3), obtêm-se para μ_m e η_m positivos:

$$\begin{aligned}\psi_m^d &= \psi_m^e \exp(-\varepsilon_{x,m}) + Z_0(\varepsilon_{x,m}) (\varepsilon_{x,m} \bar{\psi}_m + \psi_m^d - \psi_m^e) \\ &+ [2 Z_1(\varepsilon_{x,m}) - Z_0(\varepsilon_{x,m})] [3 (\psi_m^d + \psi_m^e - 2 \bar{\psi}_m) + \varepsilon_{x,m} \psi_m^x], \quad (3.8)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\theta_m^d &= \theta_m^e \exp(-\varepsilon_{x,m}) + Z_0(\varepsilon_{x,m}) (\varepsilon_{x,m} \psi_m^y + \theta_m^d - \theta_m^e) \\ &+ [2 Z_1(\varepsilon_{x,m}) - Z_0(\varepsilon_{x,m})] [3 (\varepsilon_{x,m}/\varepsilon_{y,m}) (2 \psi_m^x - \theta_m^s - \theta_m^i)], \quad (3.9)\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\psi_m^s &= \psi_m^i \exp(-\varepsilon_{y,m}) + Z_0(\varepsilon_{y,m}) (\varepsilon_{y,m} \bar{\psi}_m + \psi_m^s - \psi_m^i) \\ &+ [2 Z_1(\varepsilon_{y,m}) - Z_0(\varepsilon_{y,m})] [3 (\psi_m^i + \psi_m^s - 2 \bar{\psi}_m) + \varepsilon_{y,m} \psi_m^y] \quad (3.10)\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}\theta_m^s &= \theta_m^i \exp(-\varepsilon_{y,m}) + Z_0(\varepsilon_{y,m}) (\varepsilon_{y,m} \psi_m^x + \theta_m^s - \theta_m^i) \\ &+ [2 Z_1(\varepsilon_{y,m}) - Z_0(\varepsilon_{y,m})] [3 (\varepsilon_{y,m}/\varepsilon_{x,m}) (2 \psi_m^y - \theta_m^d - \theta_m^e)]. \quad (3.11)\end{aligned}$$

Nas equações (3.8) a (3.11) foram introduzidos:

$$Z_{0,m}(\varepsilon_{y,m}) \equiv [1 - \exp(-\varepsilon_{y,m})]/\varepsilon_{y,m} \quad \text{e} \quad Z_{1,m}(\varepsilon_{y,m}) \equiv [1 - Z_{0,m}(\varepsilon_{y,m})]/\varepsilon_{y,m}.$$

As equações (3.1) a (3.3) e as equações (3.8) a (3.11) constituem o conjunto de equações lineares e algébricas de balanço espacial do método LLN para μ_m e $\eta_m > 0$.

Para que o texto não fique sobrecarregado será omitido a seguir o índice m indicativo da direção angular.

4. Método LN

Obtêm-se as equações de balanço espacial, lineares e algébricas do método LN, introduzindo-se nas equações (3.9) e (3.11) as aproximações DD [4]:

$$\psi^x = (\theta^s + \theta^i)/2 \quad e \quad \psi^y = (\theta^d + \theta^e)/2.$$

Com estas aproximações as equações (3.9) e (3.11) fornecem as seguintes expressões para os momentos espaciais médios de primeira ordem no interior do nodo:

$$\psi^x = \theta^s [Z_1(\varepsilon_y)/Z_0(\varepsilon_y)] + \theta^i [1 - Z_1(\varepsilon_y)/Z_0(\varepsilon_y)], \quad (4.1)$$

$$\psi^y = \theta^d [Z_1(\varepsilon_x)/Z_0(\varepsilon_x)] + \theta^e [1 - Z_1(\varepsilon_x)/Z_0(\varepsilon_x)]. \quad (4.2)$$

Explicitando $\varepsilon_y \psi^x$ na equação (3.2), $Z_0(\varepsilon_y)/Z_1(\varepsilon_x) \psi^x$ na equação (4.1) e somando estas equações, chega-se a uma expressão para ψ^x , que quando substituída na equação (3.8), fornece a forma aumentada [4]

$$\bar{\psi} = (1 - \alpha^x) \psi^e / 2 + (1 + \alpha^x) \psi^d / 2 + C^{1x} \theta^i + C^{2x} S^x. \quad (4.3)$$

Uma manipulação algébrica análoga com as equações (3.3), (4.2) e (3.10) permite obter:

$$\bar{\psi} = (1 - \alpha^y) \psi^i / 2 + (1 + \alpha^y) \psi^s / 2 + C^{1y} \theta^e + C^{2y} S^y. \quad (4.4)$$

Nas equações (4.3) e (4.4) foram definidos:

$$C^{1x} \equiv -F^x [\varepsilon_x Z_0(\varepsilon_y) / \varepsilon_y Z_1(\varepsilon_y)], \quad C^{1y} \equiv -F^y [\varepsilon_y Z_0(\varepsilon_x) / \varepsilon_x Z_1(\varepsilon_x)],$$

$$C^{2x} \equiv -F^x [h_x / \mu], \quad C^{2y} \equiv -F^y [h_y / \eta],$$

$$\alpha^x \equiv F^x [\varepsilon_x + \varepsilon_x Z_0(\varepsilon_y) / \varepsilon_y Z_1(\varepsilon_y)] \quad e \quad \alpha^y \equiv F^y [\varepsilon_y + \varepsilon_y Z_0(\varepsilon_x) / \varepsilon_x Z_1(\varepsilon_x)],$$

onde $F^x \equiv [Z_2(\varepsilon_x) - Z_1(\varepsilon_x)] / \{\rho^y \frac{h_x}{\mu} [Z_1(\varepsilon_x) + 2Z_3(\varepsilon_x) - 3Z_2(\varepsilon_x)] - Z_0(\varepsilon_x)\}$,

$$F^y \equiv [Z_2(\varepsilon_y) - Z_1(\varepsilon_y)] / \{\rho^x \frac{h_y}{\eta} [Z_1(\varepsilon_y) + 2Z_3(\varepsilon_y) - 3Z_2(\varepsilon_y)] - Z_0(\varepsilon_y)\},$$

$$\rho^x \equiv \mu Z_0(\varepsilon_x) / h_x Z_1(\varepsilon_x), \quad \rho^y \equiv \eta Z_0(\varepsilon_y) / h_y Z_1(\varepsilon_y),$$

$$Z_2(\varepsilon_y) \equiv [1 - 2Z_1(\varepsilon_y)] / \varepsilon_y \quad e \quad Z_3(\varepsilon_y) \equiv [1 - 3Z_2(\varepsilon_y)] / \varepsilon_y.$$

5. Método LN no Esquema de Iteração na Fonte

Para obter o conjunto de equações para varredura de transporte de primeiro quadrante, constituintes do esquema SI, escrevem-se as equações (4.3) e (4.4) como:

$$\psi^d = [2\bar{\psi} - (1 - \alpha^x) \psi^e - 2C^{1x} \theta^i - 2C^{2x} S^x] / (1 + \alpha^x), \quad (5.1)$$

$$\psi^s = [2\bar{\psi} - (1 - \alpha^y) \psi^i - 2C^{1y} \theta^e - 2C^{2y} S^y] / (1 + \alpha^y). \quad (5.2)$$

Em seguida, substituem-se as equações (5.1) e (5.2) na equação (3.1). Este procedimento fornece uma expressão que permite avaliar o fluxo angular médio

$$\begin{aligned}\bar{\psi} = & \{[(1 - \alpha^x)\delta^x + (1/\varepsilon_x)]\psi^e + [(1 - \alpha^y)\delta^y + (1/\varepsilon_y)]\psi^i + (2C^{1x}\delta^x)\theta^i \\ & + 2C^{1y}\delta^y\theta^e + 2C^{2x}\delta^x S^x + 2C^{2y}\delta^y S^y + (\bar{S} + q)/\sigma_T\} / [2(\delta^x + \delta^y) + 1].\end{aligned}$$

Aqui foram definidos: $\delta^x \equiv 1 / \varepsilon_x(1 + \alpha^x)$ e $\delta^y \equiv 1 / \varepsilon_y(1 + \alpha^y)$.

Então são estimados os momentos angulares médios emergentes de ordem zero nas faces dos nodos ψ^d e ψ^s , através das equações (5.1) e (5.2).

No próximo passo, avaliam-se os momentos:

$$\begin{aligned}\psi^x &= [3(2\bar{\psi} - \psi^d - \psi^e) + (\theta^i \rho^y + S^x)h_x/\mu]/(\varepsilon_x + \rho^y h_x/\mu); \\ \psi^y &= [3(2\bar{\psi} - \psi^i - \psi^s) + \{\theta^e \rho^x + S^y\}h_y/\eta]/(\varepsilon_y + \rho^x h_y/\eta); \\ \theta^s &= \psi^x [Z_0(\varepsilon_y)/Z_1(\varepsilon_y)] + \theta^i [1 - Z_0(\varepsilon_y)/Z_1(\varepsilon_y)]; \\ \theta^d &= \psi^y [Z_0(\varepsilon_x)/Z_1(\varepsilon_x)] + \theta^e [1 - Z_0(\varepsilon_x)/Z_1(\varepsilon_x)].\end{aligned}$$

As expressões para ψ^x e ψ^y são obtidas respectivamente através das manipulações algébricas das equações (3.2) e (4.1); (3.3) e (4.2).

Finalmente, atualizam-se os sinais dos momentos de primeira ordem:

$$\psi^x = s(\mu)\psi^x, \quad \psi^y = s(\eta)\psi^y, \quad \theta^s = s(\mu)\theta^s \quad e \quad \theta^d = s(\eta)\theta^d.$$

Os sinais das ordenadas discretas $s(\mu)$ e $s(\eta)$ têm o objetivo de preservar as equações de balanço espacial nos demais sentidos de varreduras de transporte.

Após percorrer os nodos da malha espacial nos quatro sentidos de varreduras de transporte, atualiza-se as fontes de espalhamento \bar{S} , S^x e S^y .

6. Método LN no Esquema Iterativo NBI

Para obter o conjunto de equações discretizadas do método LN no esquema iterativo NBI parte-se das equações (3.1) a (3.3) e introduzem-se as expressões para ψ^x , ψ^y e $\bar{\psi}$ dadas pelas equações (4.1) a (4.4). Para quadratura S_2 e.g., com auxílio da Figura 1, são arranjadas inicialmente as equações de balanço espacial para os momentos médios emergentes nas faces adjacentes aos vértices 1Q e 3Q:

Após manipular algebricamente o sistema formado pelas equações (6.1) e (6.2):

$$\mathbf{A}^{(1)} \begin{bmatrix} \psi_{1,4}^d \\ \psi_{1,2}^s \\ \theta_{1,4}^e \\ \theta_{1,2}^i \end{bmatrix} - \mathbf{B}^{(1)} \begin{bmatrix} \psi_{2,3}^e \\ \psi_{4,3}^i \\ \theta_{2,3}^e \\ \theta_{4,3}^i \end{bmatrix} = \mathbf{C}^{(1)} \begin{bmatrix} \psi_{1,4}^e \\ \psi_{1,2}^s \\ \theta_{1,4}^e \\ \theta_{1,2}^i \end{bmatrix} + \mathbf{D}^{(1)} \begin{bmatrix} \psi_{2,3}^d \\ \psi_{4,3}^s \\ \theta_{2,3}^d \\ \theta_{4,3}^s \end{bmatrix} + \vec{\mathbf{F}}q, \quad (6.1)$$

$$\mathbf{A}^{(3)} \begin{bmatrix} \psi_{3,2}^e \\ \psi_{3,4}^i \\ \theta_{3,2}^e \\ \theta_{3,4}^i \end{bmatrix} - \mathbf{B}^{(3)} \begin{bmatrix} \psi_{4,1}^d \\ \psi_{2,1}^s \\ \theta_{4,1}^d \\ \theta_{2,1}^s \end{bmatrix} = \mathbf{C}^{(3)} \begin{bmatrix} \psi_{3,2}^d \\ \psi_{3,4}^s \\ \theta_{3,2}^d \\ \theta_{3,4}^s \end{bmatrix} + \mathbf{D}^{(3)} \begin{bmatrix} \psi_{4,1}^e \\ \psi_{2,1}^i \\ \theta_{4,1}^e \\ \theta_{2,1}^i \end{bmatrix} + \vec{\mathbf{F}}q, \quad (6.2)$$

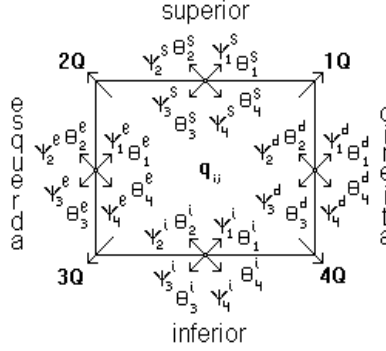


Figura 1: Momentos espaciais incidentes e emergentes nas faces do nodo.

são obtidas as entradas das matrizes resposta \mathbf{G}^+ , \mathbf{G}^- e \mathbf{S} , com todos os momentos espaciais do fluxo angular médio nas faces, emergentes dos nodos, explícitos em função de todos os momentos espaciais médios incidentes nas faces do nodo e das fontes interiores do nodo da malha espacial.

$$\begin{bmatrix} \psi_{1,4}^d \\ \psi_{1,2}^s \\ \theta_{1,4}^d \\ \theta_{1,2}^s \end{bmatrix} = \mathbf{G}^{(1+)} \begin{bmatrix} \psi_{1,4}^e \\ \psi_{1,2}^i \\ \theta_{1,4}^e \\ \theta_{1,2}^i \end{bmatrix} + \mathbf{G}^{(1-)} \begin{bmatrix} \psi_{2,3}^d \\ \psi_{4,3}^s \\ \theta_{2,3}^d \\ \theta_{4,3}^s \end{bmatrix} + \mathbf{S}^{(1)} \vec{\mathbf{F}} q, \quad (6.3)$$

$$\begin{aligned} \text{onde } \mathbf{G}^{(1+)} &= \{\mathbf{A}^{(1)} - \mathbf{B}^{(1)}\mathbf{E}[\mathbf{A}^{(3)}] - \mathbf{B}^{(3)}\mathbf{E}\} - \{\mathbf{C}^{(1)} + \mathbf{B}^{(1)}\mathbf{E}[\mathbf{A}^{(3)}] - \mathbf{D}^{(3)}\mathbf{E}\}, \\ \mathbf{G}^{(1-)} &= \{\mathbf{A}^{(1)} - \mathbf{B}^{(1)}\mathbf{E}[\mathbf{A}^{(3)}] - \mathbf{B}^{(3)}\mathbf{E}\} - \{\mathbf{D}^{(1)} + \mathbf{B}^{(1)}\mathbf{E}[\mathbf{A}^{(3)}] - \mathbf{C}^{(3)}\mathbf{E}\}, \\ \text{e } \mathbf{S}^{(1)} &= \{\mathbf{A}^{(1)} - \mathbf{B}^{(1)}\mathbf{E}[\mathbf{A}^{(3)}] - \mathbf{B}^{(3)}\mathbf{E}\} - \{\mathbf{I}^{(1)} + \mathbf{B}^{(1)}\mathbf{E}[\mathbf{A}^{(3)}] - \}. \end{aligned}$$

$$\begin{bmatrix} \psi_{3,2}^e \\ \psi_{3,4}^i \\ \theta_{3,2}^e \\ \theta_{3,4}^i \end{bmatrix} = \mathbf{G}^{(3+)} \begin{bmatrix} \psi_{3,2}^d \\ \psi_{3,4}^s \\ \theta_{3,2}^d \\ \theta_{3,4}^s \end{bmatrix} + \mathbf{G}^{(3-)} \begin{bmatrix} \psi_{4,1}^e \\ \psi_{2,1}^i \\ \theta_{4,1}^e \\ \theta_{2,1}^i \end{bmatrix} + \mathbf{S}^{(3)} \vec{\mathbf{F}} q; \quad (6.4)$$

$$\begin{aligned} \text{onde } \mathbf{G}^{(3+)} &= \{\mathbf{A}^{(3)} - \mathbf{B}^{(3)}\mathbf{E}[\mathbf{A}^{(1)}] - \mathbf{B}^{(1)}\mathbf{E}\} - \{\mathbf{C}^{(3)} + \mathbf{B}^{(3)}\mathbf{E}[\mathbf{A}^{(1)}] - \mathbf{D}^{(1)}\mathbf{E}\}, \\ \mathbf{G}^{(3-)} &= \{\mathbf{A}^{(3)} - \mathbf{B}^{(3)}\mathbf{E}[\mathbf{A}^{(1)}] - \mathbf{B}^{(1)}\mathbf{E}\} - \{\mathbf{D}^{(3)} + \mathbf{B}^{(3)}\mathbf{E}[\mathbf{A}^{(1)}] - \mathbf{C}^{(1)}\mathbf{E}\}, \\ \text{e } \mathbf{S}^{(3)} &= \{\mathbf{A}^{(3)} - \mathbf{B}^{(3)}\mathbf{E}[\mathbf{A}^{(1)}] - \mathbf{B}^{(1)}\mathbf{E}\} - \{\mathbf{I}^{(1)} + \mathbf{B}^{(3)}\mathbf{E}[\mathbf{A}^{(1)}] - \}. \end{aligned}$$

As entradas das matrizes \mathbf{G}^+ , \mathbf{G}^- e \mathbf{S} , para o cálculo dos momentos médios emergentes nas faces adjacentes aos vértices 2Q e 4Q são construídas de forma análoga. Os sinais negativos sobrescritos após as operações matriciais indicam a operação matricial inversa, exceto nas matrizes \mathbf{G}^+ e \mathbf{G}^- onde caracterizam as contribuições dos momentos espaciais incidentes nas faces. De uma forma geral, para quadratura S_N , as matrizes $\mathbf{A}^{(k)}$, $\mathbf{B}^{(k)}$, $\mathbf{C}^{(k)}$, $\mathbf{D}^{(k)}$, $\mathbf{G}^{(k+)}$, $\mathbf{G}^{(k-)}$ e $\mathbf{S}^{(k)}$ são de ordem $2M \times 2M$. k representa os sentidos de varreduras de transporte, $k = 1:4$, e M é o número de sentidos de discretização angular, $M = N(N+2)/2$. Os vetores-coluna são de ordem $2M$; M momentos espaciais de ordem zero do fluxo angular de nêutros e M momentos de primeira ordem. Para quadratura S_4 , e.g., cada elemento de matriz, tomando-se a quadratura S_2 como referência, estende-se para um

bloco de matriz 3×3 . Estes blocos têm dimensões dadas pelo número de ordenadas discretas por quadrante, i.e., $M = N(N+2)/8$. A matriz \mathbf{E} é uma matriz elementar e foi introduzida apenas para operar mudanças convenientes na ordem das componentes dos vetores-coluna. $\vec{\mathbf{F}}$ é um vetor coluna com $2M$ linhas, com as componentes $f_{p,1}$ tais que: $f_{p,1} = 1$ se p menor ou igual a M e $f_{p,1} = 0$ para o restante.

As matrizes \mathbf{G}^+ , \mathbf{G}^- e \mathbf{S} carregam informações sobre os parâmetros materiais, as ordenadas discretas, a largura e a altura dos nodos. São calculadas apenas uma vez para um nodo de cada zona material homogênea, antes de se iniciar o processo iterativo.

7. Resultados Numéricos

Para ilustrar o mérito do esquema iterativo de inversão nodal, foram gerados resultados numéricos para um problema-modelo de fonte fixa. A Figura 2 representa um poço de sondagem geofísica para identificação de recursos geológicos, cf. *Nuclear well-logging* [1]. No poço é inserido um cilindro de aço contendo dois detectores: D_1 e D_2 . As condições de contorno utilizadas foram as de vácuo e reflexiva do transporte.

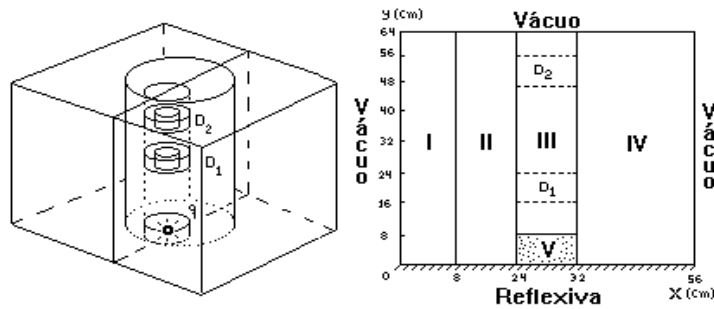


Figura 2: Poço de sondagem geofísica.

Os parâmetros das zonas materiais I, II, III e IV estão listados na Tabela 1. A fonte isotrópica e unitária de nêutrons está uniformemente distribuída na região V.

Parâmetros (cm^{-1})	Zonas Materiais		
	I e IV	II	III e V
σ_S	0,314419	0,634883	0,494460
σ_T	0,330263	0,694676	0,499122

Tabela 1: Parâmetros das zonas materiais.

Os resultados numéricos obtidos para este problema-modelo foram gerados em um computador com 256 *Mbytes-RAM*, 32-bit e 1180 *MHz*, utilizando-se a quadratura angular S_6 de simetria de nível [3] e o critério de convergência de 10^{-5} na norma máxima do vetor desvio relativo percentual do fluxo escalar médio, nos nodos da malha espacial, avaliados a cada duas estimativas consecutivas.

A Tabela 2 lista as malhas de discretizações com partições uniformes nas orientações espaciais (**ME**), os fluxos escalares médios (Φ) nas regiões dos detectores D_1 e D_2 , os desvios relativos percentuais (%) em relação ao método de malha fina **DD-SI** e o número de iterações (**NI**).

	ME	Φ ($cm^{-2}.s^{-1}$)				NI
		D_1	%	$D_2 \times 10^{-2}$	%	
LN-SI:	7 x 8	1,647	-3,97	1,374	8,19	315
	14 x 16	1,732	0,99	1,260	-0,79	327
	28 x 32	1,717	0,12	1,247	-1,81	329
LN-NBI:	7 x 8	1,590	-7,29	1,062	-16,34	33
	14 x 16	1,698	-0,99	1,230	-3,15	47
	28 x 32	1,705	-0,58	1,238	-2,52	66
DD-SI:	140x160	1,715	-	1,270	-	278

Tabela 2: Performance dos métodos: **LN-SI** e **LN-NBI** em relação ao **DD-SI**.

8. Discussões

Devido ao grande esforço algébrico para obterem-se as equações discretizadas do método **LN** para o sentido de varredura de primeiro quadrante, as equações para os demais sentidos de varredura podem ser obtidas através de argumentos de simetria espacial, i.e., preservando-se os pesos dos momentos espaciais de ordem zero que são incidentes e emergentes nas faces do nodo, em relação aos sentidos de varredura de transporte e atendendo para os sinais dos momentos espaciais e fontes de primeira ordem.

Os resultados numéricos listados na Tabela 2, mostram que os desvios relativos percentuais obtidos para os métodos **LN-SI** e **LN-NBI** ao serem comparados aos gerados com o método e esquema iterativo **DD-SI**, em geral, aumentam com malhas espaciais maiores. Nestes métodos, as aproximações adotadas para as dependências espaciais das fugas transversais e das fontes de espalhamento são as responsáveis por estes resultados numéricos não serem livres de erro de truncamento espacial. Observa-se na Tabela 2 que, o número de iterações para o algoritmo do esquema iterativo **SI** apresenta-se pouco sensível ao alargamento da malha espacial, enquanto o número de iterações do esquema iterativo **NBI** diminui com o alargamento da malha espacial, o que aponta para utilização de malhas espaciais relativamente mais grossas em métodos livres de erro de truncamento espacial, arranjados para o esquema iterativo **NBI**.

O arranjo matemático do sistema de equações lineares e algébricas do método **LN** para o esquema iterativo **NBI** foi o primeiro passo para o desenvolvimento futuro do método **SGF-LN**, que espera-se ser mais preciso que o método **LN** por não utilizar aproximações para as fontes de espalhamento e, conseqüentemente, permita a utilização de malhas espaciais relativamente mais grossas.

Agradecimentos

Marcos Pimenta de Abreu (D.Sc.), Ricardo Carvalho de Barros (Ph.D.), *IPRJ/UERJ, Rio de Janeiro, Brasil* e Todd Wareing (D.Sc.), *Los Alamos National Laboratory, EUA*.

Abstract. This paper describe de architecture and examines the performance of the one-node block inversion (**NBI**) iterative schemes, solve the discretized equations of the linear nodal method (**LN**) in one-speed neutron transport, with isotropic scattering and that dislocates in non multiplicative region. The mathematical model treat the transport equations in X,Y geometry, Cartesian coordinates systems and in the discrete ordinates (S_N) formulation. The numerical results illustrate the computational performance of the iterative schemes for typical stead-state model problem.

Referências

- [1] Y.Y. Azmy, Comparison of three approximations to the linear-linear nodal transport method in weighted diamond-difference form, *Nuclear Science and Engineering*, **100** (1988), 190-200.
- [2] R.C. Barros, “A Spectral Nodal Method for the Solution of Discrete Ordinates Problems in One-and Two-Dimensional Cartesian Geometry”, Ph.D. dissertation, The University of Michigan, Ann Arbor, Michigan, 1990.
- [3] E.E. Lewis e W.F.Jr. Miller, “Computational Methods of Neutron Transport”, American Nuclear Society, La Grange Park, Illinois, 1993.
- [4] W.F. Walters, Augmented weighted diamond form of the linear nodal scheme for Cartesian coordinates systems, *American Nuclear Society*, **2** (1985), 452-460.
- [5] J.H. Zani, “Esquemas Iterativos para Solução Numérica Nodal de Problemas de Transporte de Nêutrons Monoenergéticos na Formulação S_N em Geometria Bidimensional Cartesiana”, Tese de doutorado, UERJ, IPRJ, Nova Friburgo, Rio de Janeiro, 2001.

