#### UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE ESCOLA DE ENGENHARIA PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA OCEÂNICA

### Tratamento de problemas de transporte unidimensionais por meio do método ADO

por

Marco Paulsen Rodrigues

Projeto de dissertação submetido como requisito parcial para a obtenção do grau de Mestre em Engenharia Oceânica

> Prof. Dr. João Francisco Prolo Filho Orientador

> > Rio Grande, Junho de 2017.

#### CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Paulsen Rodrigues, Marco

Tratamento de problemas de transporte unidimensionais por meio do método ADO / Marco Paulsen Rodrigues.— Rio Grande: PPGEO da FURG, 2017.

172 p.: il.

Dissertação (mestrado) — Universidade Federal de Rio Grande, Programa de Pós Graduação em Engenharia Oceânica, Rio Grande, 2017.

Orientador: Prolo Filho, João Francisco

Dissertação: Engenharia Oceânica Transporte de Nêutrons Unidimensional, Equação Linearizada de Boltzmann, Ordenadas Discretas

# Tratamento de problemas de transporte unidimensionais por meio do método ADO

por

Marco Paulsen Rodrigues

Projeto de dissertação submetido ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Oceânica da Escola de Engenharia da Universidade Federal de Rio Grande, como requisito parcial para a obtenção do grau de

#### Mestre em Engenharia Oceânica

Linha de Pesquisa: Teoria de Transporte

Orientador: Prof. Dr. João Francisco Prolo Filho

Banca examinadora:

Profa. Dra. Bárbara Denicol do Amaral Rodriguez PPGMC - FURG

Prof. Dr. Elizaldo Domingues dos Santos PPGEO - FURG

Profa. Dra. Liliane Basso Barichello PPGMAp - UFRGS

> Prof. Dr. Liércio André Isoldi Coordenador

# Índice Remissivo

LISTA DE FIGURAS	. viii	
LISTA DE TABELAS	. xi	
LISTA DE SÍMBOLOS - LETRAS ROMANAS		
LISTA DE SIMBOLOS - LETRAS GREGAS	. xvi	
LISTA DE ABREVIATURAS	. xvii	
RESUMO	. xviii	
ABSTRACT	. XX	
1 INTRODUÇÃO	. 1	
2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA	. 13	
2.1 Breve história da ciência nuclear	. 13	
2.1.1 Da antiguidade grega até a descoberta do nêutron	. 13	
2.1.2 De Enrico Fermi à fissão nuclear	. 16	
2.1.3 Da fissão ao primeiro reator nuclear.	. 18	
2.2 A importância da energia nuclear	. 19	
2.3 Conceitos fundamentais no transporte de nêutrons	. 22	
2.3.1 Seção de choque microscópica ( $\sigma$ )	. 22	
2.3.2 Seção de choque macroscópica ( $\Sigma$ )	. 23	
2.3.3 Reações nucleares	. 24	
2.3.4 Densidade angular $N(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)$	. 25	
2.3.5 Espaço de fase	. 25	
2.4 Modelagem matemática da equação de Boltzmann	. 25	
2.4.1 Balanço de nêutrons	. 27	
2.4.2 Construção de um modelo simplificado	. 31	

2.4.3	Adimensionalização da variável espacial	32
3 FO	ORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO MÉTODO DE ORDENADAS DIS- RETAS ANALÍTICO	34
3.1	Solução Homogênea	37
3.2	Solução Particular	40
3.3	Sistema de acoplamento	42
3.4	Grandezas de interesse	43
4 Pl	ROBLEMAS E RESULTADOS	46
<b>4.1</b>	Problemas isotrópicos em meio homogêneo sem fonte interna	46
4.1.1	Introdução sobre o conceito de isotropia	47
4.1.2	Descrição dos problemas com espalhamento isotrópico em meio homogê- neo sem fonte interna	48
4.1.3	Discussão dos resultados: problemas isotrópicos em meio homogêneo sem fonte interna	49
4.1.3.	1 Comparação com a literatura: problemas isotrópicos	49
4.1.3.2	2 Análise da influência da seção de choque de espalhamento isotrópica: pro- blemas isotrópicos	51
4.1.3.	3 Análise da influência da quantidade de termos na quadratura numérica: problemas isotrópicos	60
4.1.3.4	4 Análise da influência do comprimento do domínio: problemas isotrópicos.	64
4.2	Problemas de cálculos do coeficiente de albedo e da taxa de transmissão	67
4.2.1	Formulação matemática e descrição dos problemas de cálculos do coefici- ente de albedo e da taxa de transmissão	68
4.2.2	Discussão dos resultados dos problemas de cálculos do coeficiente de al- bedo e da taxa de transmissão	72
4.3	Problemas linearmente anisotrópicos sem fonte interna em meio homo- gêneo	78
4.3.1	Introdução sobre o conceito de anisotropia	78

4.3.2	Descrição dos problemas linearmente anisotrópicos em meios homogêneos sem fonte interna	
4.3.3	Discussão dos resultados dos problemas linearmente anisotrópicos sem fonte interna em meio homogêneo	82
4.3.3.1	Validação do Código e do Método: Problemas linearmente anisotrópicos sem fonte interna em meio homogêneo.	82
4.3.3.2	Estudo da influência do coeficiente de espalhamento isotrópico: Proble- mas linearmente anisotrópicos sem fonte interna em meio homogêneo.	86
4.3.3.3	Análise de precisão: Problemas linearmente anisotrópicos sem fonte in- terna em meio homogêneo.	90
4.3.3.4	Análise da influência do comprimento do domínio: Problemas linear- mente anisotrópicos sem fonte interna em meio homogêneo.	94
4.3.3.5	Análise da influência da seção de choque de espalhamento anisotrópico: Problemas linearmente anisotrópicos sem fonte interna em meio homogê- neo.	96
4.4 P	roblemas heterogêneos com anisotropia linear sem fonte interna	101
4.4.1	Estado da arte: problemas heterogêneos sem fonte interna	101
4.4.2	Descrição dos problemas heterogêneos sem fonte interna	101
4.4.3	Discussão dos resultados do problema heterogêneo sem fonte interna	103
4.5 P	roblemas heterogêneos com anisotropia linear e fonte interna constante	106
4.5.1	Estado da arte sobre problemas de blindagem radioativa	106
4.5.2	Descrição dos problemas, resultados e discussão dos problemas heterogê- neos com anisotropia linear e fonte interna constante	107
4.6 P	roblemas de determinação do fator de desvantagem térmica	113
4.6.1	Estado da arte sobre o cálculo do fator de desvantagem térmica	113
4.6.2	Descrição dos problemas de determinação do fator de desvantagem térmica	114
4.6.3	Resultados dos problemas de determinação do fator de desvantagem térmica e discussão.	116
4.6.3.1	Validação e análise da anisotropia e do tamanho das células	116
4.6.3.2	Análise da espessura do combustível	123

5 CO	NCLUSÃO	145
4.6.3.4	Análise da razão entre a espessura do moderador e do combustível	140
4.6.3.3	Análise da espessura do moderador.	128

# Lista de Figuras

Figura 1.1	Ludwig Boltzmann <imagem de="" domínio="" público=""></imagem>	2
Figura 1.2	Representação esquemática do funcionamento de uma usina nuclear. Adaptada de Duderstadt and Hamilton (1976).	4
Figura 1.3	Figura esquemática de uma reação de fissão nuclear. Adaptada de Duderstadt and Hamilton (1976).	5
Figura 1.4	Metodologias utilizadas no transporte de nêutrons	7
Figura 2.1	Distribuição das seções de choque por tipo de reação. Adaptada de Duderstadt (1979)	23
Figura 3.1	Divisão do domínio em camadas.	37
Figura 4.1	Condições de contorno à esquerda e direita.	48
Figura 4.2	Resultados do Problema 2: análise do espalhamento isotrópico	53
Figura 4.3	Resultados do Problema 3: análise do espalhamento isotrópico	55
Figura 4.4	Resultados do Problema 3: análise do espalhamento isotrópico	58
Figura 4.5	Resultados do Problema 4b	60
Figura 4.6	Resultados do Problema 5: análise de precisão	61
Figura 4.7	Resultados do Problema 6: análise de precisão	62
Figura 4.8	Resultados do Problema 7: análise de precisão	63
Figura 4.9	Resultados do Problema 8: análise da dimensão do domínio	65
Figura 4.10	Resultados do Problema 9: análise da dimensão do domínio	66
Figura 4.11	Resultados do Problema 10: análise da dimensão do domínio	66
Figura 4.12	Resultados do Problema 12: comportamento do coeficiente de albedo.	75
Figura 4.13	Resultados do Problema 12: comportamento do fator de transmissão.	77
Figura 4.14	Condições de contorno do problema unidimensional	81
Figura 4.15	Resultados do Problema 13: Análise de precisão	85
Figura 4.16	Resultados do Problema 14: análise quanto ao espalhamento isotrópico.	87

Figura 4.17	Resultados do Problema 15: análise quanto ao espalhamento isotrópico.	88
Figura 4.18	Resultados do Problema 16: análise quanto ao espalhamento isotrópico.	89
Figura 4.19	Resultados do Problema 17: análise de precisão	91
Figura 4.20	Resultados do Problema 18: análise de precisão	92
Figura 4.21	Resultados do Problema 19: análise de precisão	93
Figura 4.22	Resultados do Problema 20: análise da dimensão do domínio	95
Figura 4.23	Resultados do Problema 21: análise da dimensão do domínio	95
Figura 4.24	Resultados do Problema 22: análise da dimensão do domínio	96
Figura 4.25	Resultados do Problema 23: análise do fator de anisotropia	97
Figura 4.26	Resultados do Problema 24: análise do fator de anisotropia	99
Figura 4.27	Resultados do Problema 25: análise do fator de anisotropia	100
Figura 4.28	Divisão do domínio heterogêneo em camadas	102
Figura 4.29	Esquema das seções do domínio dos problemas estudados nesta seção.	103
Figura 4.30	Perfil do fluxo escalar com $S = 8$ para o Problema 26	105
Figura 4.31	Domínio do Problema 27	108
Figura 4.32	Perfil do fluxo escalar para o Problema 28	110
Figura 4.33	Domínio do Problema 28	111
Figura 4.34	Perfil do fluxo escalar para o Problema 28	112
Figura 4.35	Ilustração das células de dois meios estudadas nesta seção	116
Figura 4.36	Resultados para o fluxo escalar: célula 1	119
Figura 4.37	Resultados para o fluxo escalar: célula 2	119
Figura 4.38	Resultados para o fluxo escalar: célula 3	120
Figura 4.39	Resultados para o fluxo escalar: célula 4	120
Figura 4.40	Resultados para o fator de desvantagem para diversos níveis de aniso- tropia.	122

Figura 4.41	Análise da espessura do combustível - Resultados para o fluxo escalar no combustível e moderador.	125
Figura 4.42	Resultados para o fator de desvantagem de acordo com a espessura do combustível.	126
Figura 4.43	Análise da espessura do moderador - Resultados para o fluxo escalar no combustível e no moderador	130
Figura 4.44	Resultados para o fator de desvantagem conforme a espessura do mo- derador.	131
Figura 4.45	Resultados para o fator de desvantagem conforme a espessura das re- giões	134
Figura 4.46	Estudo de proporções - Resultados para o fluxo escalar no combustível e no moderador.	142

### Lista de Tabelas

Tabela 2.1	Custos de geração de eletricidade na Alemanha em 2003. Adaptado de NEA (2007)	20
Tabela 2.2	Densidade energética de alguns combustíveis. Fonte: Guimaraes and de Mattos (2011).	20
Tabela 2.3	Duração estimada das reservas dos respectivos combustíveis. Adap- tada de NEA (2007)	21
Tabela 4.1	Problemas-teste 1 até 10	49
Tabela 4.2	Dados do Problema 1	49
Tabela 4.3	Problema 1: Comparação entre diferentes métodos usando o esquema $S_8$ de quadratura.	50
Tabela 4.4	Problema 1: Análise de precisão do fluxo escalar computados pelo método ADO utilizado neste trabalho.	51
Tabela 4.5	Dados dos Problemas 2, 3, 4a e 4b	52
Tabela 4.6	Resultados do Problema 2: análise do espalhamento isotrópico	52
Tabela 4.7	Resultados do Problema 3: análise do espalhamento isotrópico	54
Tabela 4.8	Problema 3 - Crescimento em porcentagem dos perfis de fluxo escalar conforme a variação de $\sigma_{s0}$ .	56
Tabela 4.9	Problema 3 - Crescimento absoluto entre perfis do fluxo escalar conforme a variação de $\sigma_{s0}$ .	57
Tabela 4.10	Resultados do Problema 4a: análise do espalhamento isotrópico	58
Tabela 4.11	Resultados do Problema 4b	59
Tabela 4.12	Dados dos Problemas 5, 6 e 7.	60
Tabela 4.13	Resultados do Problema 5: análise de precisão.	61
Tabela 4.14	Resultados do Problema 6: análise de precisão.	62
Tabela 4.15	Resultados do Problema 7: análise de precisão.	63
Tabela 4.16	Dados dos Problemas 8, 9 e 10.	64
Tabela 4.17	Parâmetros dos problemas-teste 11 e 12	68

Tabela 4.18	Problema 11: comparação numérica para o coeficiente de albedo ob- tido pelos métodos ADO e $LTS_N$ com a solução exata	72
Tabela 4.19	Problema 12: Resultados para o coeficiente de albedo através método ADO pela formulação de Schulz (2014).	73
Tabela 4.20	Problema 12: Resultados para o coeficiente de albedo através do mé- todo ADO pela formulação deste trabalho	74
Tabela 4.21	Problema 12: Resultados para o fator de transmissão de acordo com o método ADO pela formulação de Schulz (2014)	76
Tabela 4.22	Problema 12: Resultados para o fator de transmissão conforme o mé- todo ADO pela formulação deste trabalho	76
Tabela 4.23	Parâmetros dos Problemas-teste 13 até 25	81
Tabela 4.24	Dados do Problema 13	82
Tabela 4.25	Problema 13 - Comparação do método ADO com os métodos $SGF_2(Baric 1992)$ e LTS <sub>2</sub> (Barichello, 1992).	hello, 82
Tabela 4.26	Problema 13 - Comparação do método ADO com os métodos $SGF_4$ (Baric 1992) e LTS <sub>4</sub> (Barichello, 1992).	hello, 83
Tabela 4.27	Problema 13 - Comparação do método ADO com os métodos $SGF_8$ (Baric 1992) e LTS <sub>8</sub> (Barichello, 1992)	hello, 84
Tabela 4.28	Problema 13 - Convergência dos resultados.	85
Tabela 4.29	Dados do Problema 14, 15 e 16	86
Tabela 4.30	Resultados do Problema 14: análise quanto ao espalhamento isotrópico.	87
Tabela 4.31	Resultados do Problema 15: análise quanto ao espalhamento isotrópico.	88
Tabela 4.32	Resultados do Problema 16: análise quanto ao espalhamento isotrópico.	89
Tabela 4.33	Dados dos Problemas 17,18 e 19	90
Tabela 4.34	Resultados do Problema 17: análise de precisão	91
Tabela 4.35	Resultados do Problema 18: análise de precisão	92
Tabela 4.36	Resultados do Problema 19: análise de precisão	93
Tabela 4.37	Dados dos Problemas 20, 21 e 22.	94
Tabela 4.38	Dados dos Problemas 23, 24 e 25	96

Tabela 4.39	Resultados do Problema 23: análise do fator de anisotropia	97
Tabela 4.40	Resultados do Problema 24: análise do fator de anisotropia	98
Tabela 4.41	Resultados do Problema 25: análise do fator de anisotropia	100
Tabela 4.42	Parâmetros do Problema 26	103
Tabela 4.43	Resultados do Problema 26: Comparação dos perfis do fluxo escalar obtidos com diferentes métodos e ordem de quadratura variável	104
Tabela 4.44	Concordância dos resultados do perfis do fluxo escalar através do mé- todo ADO utilizado neste trabalho	104
Tabela 4.45	Parâmetros utilizados no Problema 27	108
Tabela 4.46	Problema 27 - Convergência dos perfis do fluxo escalar computados pelo método ADO (este trabalho).	109
Tabela 4.47	Problema 27 - Comparação entre diferentes métodos usando um esquema da quadratura $S_8$ .	109
Tabela 4.48	Parâmetros utilizados no Problema 28	111
Tabela 4.49	Problema 28 - Convergência dos perfis do fluxo escalar de acordo com o método ADO (este trabalho)	111
Tabela 4.50	Parâmetros usados na solução dos problemas propostos 29, 30, 31 e 32.	116
Tabela 4.51	Parâmetros usados na solução do problema 29	117
Tabela 4.52	Problema 29 - Resultados do fator de desvantagem: análise do tama- nho das células e do coeficiente de anisotropia.	118
Tabela 4.53	Parâmetros usados na solução do Problema 30	123
Tabela 4.54	Análise da espessura do combustível - Resultados para o fluxo escalar no combustível.	124
Tabela 4.55	Análise da espessura do combustível - Resultados para o fluxo escalar no moderador.	124
Tabela 4.56	Análise do moderador - Termos da Eq. (3.54), que expressa o fator de desvantagem.	127
Tabela 4.57	Parâmetros do Problema 31	128
Tabela 4.58	Análise da espessura do moderador - Resultados para o fluxo escalar no combustível.	129

Tabela 4.59	Análise da espessura do moderador - Resultados para o fluxo escalar no moderador	129
Tabela 4.60	Análise do moderador - Valor dos termos da Eq. (3.54), que expressa o fator de desvantagem.	133
Tabela 4.61	Valores para o fator de desvantagem de $(b-a) = 0.9$ cm até $(b-a) = 0.25$ cm, com $N = 20$	136
Tabela 4.62	Valores para o fator de desvantagem com $(b - a) = 0.1 \text{ cm} \dots$	137
Tabela 4.63	Valores para o fator de desvantagem de $(b-a) = 0.2$ cm até $(b-a) = 10^{-7}$ cm, com $N = 80$ ,	138
Tabela 4.64	Análise do moderador - Valor dos termos da Eq. (4.30), com $N = 80$ .	140
Tabela 4.65	Parâmetros usados na solução do Problema 32	141
Tabela 4.66	Estudo de proporções - Resultados para o fluxo escalar no combustível.	141
Tabela 4.67	Estudo de proporções - Resultados para o fluxo escalar no moderador.	142
Tabela 4.68	Fator de desvantagem de acordo com a relação dos comprimentos combustível/moderador.	143

### LISTA DE SÍMBOLOS - LETRAS ROMANAS

a	dimensão do combustível [0,a] (cm)
$A_j$	coeficientes da solução homogênea
A, D	matrizes do problema de autovalores
$A_{\alpha}, D_{\alpha}$	matrizes do problema de autovalores na camada $\alpha$
$A^*$	coeficiente de albedo
$A_{j,\alpha}$	coeficiente da solução homogênea na camada $\alpha$
b	dimensão do moderador [a,b] (cm)
E	energia $(J)$
m	massa $(kg)$
M	índice da última camada dos domínios heterogêneos
mfp	livre caminho médio $(cm)$
N	ordem da quadratura $S_N$
$N(\vec{r},\vec{\Omega},E,t)$	densidade de nêutrons $(n/J \ s \ m^3)$
$ec{r}$	vetor de posição $(m)$
t	tempo (s)
V	volume $(m^3)$
$\vec{v}$	vetor velocidade $(m/s)$
$U_{\alpha}, V_{\alpha}$	funções auxiliares na camada $\alpha$
x	variável espacial na direção i (cm)
y	variável espacial na direção j (m)
z	variável espacial na direção k $(m)$
$w_k$	pesos da quadratura
i	índice referente à discretização das direções
k	índice referente à quadratura
j	índice referente à quadratura

### LISTA DE SIMBOLOS - LETRAS GREGAS

$\alpha$	índice referente à camada homogênea	
$ u_j$	constantes de separação	
$\mu$	direção de propagação das partículas	
$\lambda$	autovalores do problema homogêneo	
$\Phi$	autofunções do problema homogêneo	
$\phi$	fluxo escalar na variável $x (n/cm^2.s)$	
$\Psi$	fluxo angular ( $W/cm^2.Sr$ )	
$\Psi_{lpha}$	fluxo angular na camada $\alpha$	
$\Psi^h$	solução homogênea do problema de transporte	
$\Psi^p$	solução particular do problema de transporte	
$\overline{\Psi}$	fluxo angular após adimensionalização espacial ( $W/Sr$ )	
$\sigma$	seção de choque microscópica (cm <sup>2</sup> )	
$\Sigma$	seção de choque macroscópica $(cm^{-1})$	
$\sigma_{a,lpha}$	seção de choque macroscópica de absorção na camada $\alpha$	
	$(cm^{-1})$	
$\sigma_{s0}$	seção de choque macroscópica de espalhamento isotrópico	
	$(cm^{-1})$	
$\sigma_{s0,\alpha}$	seção de choque macroscópica de espalhamento isotrópico	
	na camada $\alpha$ ( $cm^{-1}$ )	
$\sigma_{s1}$	seção de choque macroscópica de espalhamento anisotró-	
	pico $(cm^{-1})$	
$\sigma_{s1,\alpha}$	seção de choque macroscópica de espalhamento na camada	
	$\alpha \ (cm^{-1})$	
au	variável adimensional de posição	
$\vec{\Omega}$	vetor de direção	
ω	Coeficiente de espalhamento anisotrópico baseado na ex-	
	pansão por polinômios de Legendre	

### LISTA DE ABREVIATURAS

ABH	Amouyal, Benoist, and Horowitz	(Método de) Amouyal, Benoist, and Horowitz
	(Method)	
ADO	Analitical Discrete Ordinates (Method)	(Método de) Ordenadas Discretas Analítico
BE	Boltzmann Equation	Equação de Boltzmann
BGK	Bhatnagar-Gross-Krook (Model)	(Modelo de) Bhatnagar-Gross-Krook
CCN	Constant-Constant-Nodal (Method)	(Método) Nodal Constante-Constante
CES	Synthetic-kernel Model Equation	Modelo de equação com núcleo sintético
CLF	Variable collision frequency model	Modelo com frequência variável de colisões
DD	Diamond Difference (Method)	(Método de) Diferença Diamante
DOM	Discrete Ordinates Method	Método de Ordenadas Discretas
END	Spectral Nodal Diffusion (Method)	(Método) Espectro-Nodal de Difusão
FBR	Fast Breedder Reactor	Reator Reprodutor Rápido
$F_N$	(Metodo) Facile	(Método) Fácil
GITT	General Integer Trasform Technique	(Método da) Técnica de Transformada Integral
	(Method)	Generalizada
LLN	Linear-Linear-Nodal (Method)	(Método) Nodal Linear-Linear
$LTS_N$	Laplace Transform $S_N$ (Method)	(Método de) Transformada de Laplace $SN$
LWR	Light Water Reactor	Reator de Água Leve
MRS	McCormack model for a single-species	Modelo de McCormack para gases únicos em
	gas of rigid spheres	esferas rígidas
MOC	Method Of Characteristics	Método das Características
mfp	mean free path	caminho livre médio
$P_N$	Spherical Harmonics Method	Métodos de Harmonias Esféricas
RGD	Rarefied Gas Dynamics	Dinâmica de Gases Rarefeitos
S	Constant collision frequency model	Modelo com frequência constante de colisões
SGF-CN	Spectral Green Function Constant-	(Método de) Função de Green Espectral Cons-
	Nodal (Method)	tante Nodal
SGF-LN	Spectral Green Function Linear-Nodal	Função de Green Espectral Linear Nodal
	(Method)	
$S_N$	Discrete Ordinates (Method)	(Método de) Ordenadas Discretas

#### **RESUMO**

Neste trabalho será apresentada uma abordagem para a solução das equações de transporte de nêutrons unidimensional, em geometria Cartesiana, com espalhamento isotrópico e anisotrópico linear, por meio do Método de Ordenadas Discretas Analítico (Método ADO). Para tanto, será estudada uma classe de problemas em meios homogêneos e heterogêneos, em regime estacionário e fontes de nêutrons constantes localizadas dentro e no contorno do domínio de interesse. No processo, por conta da discretização angular, a equação integro-diferencial é transformada em um sistema de EDO's, cuja solução homogênea é obtida por meio de um problema de autovalores de ordem reduzida. Para validação do código, do método e fornecimento de resultados benchmark, uma série de problemas testes, com aplicação potencial em física nuclear, serão tratados. Uma das principais contribuições deste trabalho é o estudo detalhado da influência de propriedades físicas importantes (as seções de choque e o comprimento do domínio) sobre grandezas de interesse (fluxo escalar, albedo, fator de transmissão e fator de desvantagem térmica). Entre as contribuições das discussões dessas análises realçam-se as determinações de que: a influência dos coeficientes de espalhamento isotrópico e anisotrópico torna-se significativamente maior com a magnitude destes; o albedo aumenta com o coeficiente de espalhamento isotrópico e com o comprimento do domínio, enquanto o fator de transmissão diminui; a anisotropia causa uma diminuição do fluxo escalar de nêutrons em regiões próximas as fontes externas ou onde há presença de uma fonte interna, enquanto também acarreta no atenuamento do decaimento de nêutrons nas demais regiões do domínio; o fator de desvantagem diminui com a anisotropia, mas aumenta com o crescimento proporcional das regiões das células; o aumento individual da espessura do combustível ou moderador leva à um crescimento desse fator, mas o comprimento do combustível possui maior influência; células com menores espessuras de combustível em relação ao moderador possuem menor fator de desvantagem; e de que a taxa de decaimento do fator de desvantagem com a redução do moderador não é monotônica para todas as escalas de espessuras dessa região. Os estudos realizados possuem aplicação no estudo de reatores nucleares, envolvendo desta maneira usinas nucleares próximas à costa de grandes volumes de água, e submarinos ou navios com sistema de propulsão nuclear. Consequentemente, este trabalho encaixa-se na área de engenharia oceânica.

#### ABSTRACT

In this work an approach to solve the one-dimensional neutron transport equation in Cartesian geometry, with isotropic and linear anisotropic scattering, using the Analitical Discrete Ordinates Method (ADO Method) will be presented. Therefore, a class of problems, in homogeneous and heterogeneous media, on steady-state regime and constant neutron sources located inside and on the boundaries of the domain of interest will be studied. In the process, due to the angular discretization process, the integro-diferential equation is transformed in an ODE system, whose homogeneous solution is obtained by a eigenvalues problem, with reduced order. To validate the code, the method and provide benchmark results, a serie of test problems with potential aplication in nuclear reactor physics will be treated and results will be discussed. One of the main contributions of this work is the detailed study of the influence of important physical properties (cross sections and domain length) on quantities of interest (scalar flow, albedo, transmission factor and thermal disadvantage factor). Among the contributions of the discussions of these analyzes are the determinations that: the influence of the isotropic and anisotropic scattering coefficients becomes significantly larger with the magnitude of these; the albedo increases with the isotropic scattering coefficient and the domain length, while the transmission factor decreases; the anisotropy causes a decrease in the scalar flux of neutrons in regions near the external sources or where there is presence of an internal source, while also causes in the attenuation of the decay of neutrons in the other regions of the domain; the disadvantage factor decreases with anisotropy, but increases with the proportional growth of cell regions; the individual increase of the thickness of the fuel or moderator leads to a growth in this factor, but the length of the fuel has greater influence; cells with lower fuel thicknesses relative to the moderator have a lower disadvantage factor; and that the decay rate of the disadvantage factor with the moderator reduction is not monotonic for all thickness scales of that region. The studies carried out have application in the study of nuclear reactors, involving in this way nuclear plants near the coast of large volumes of water, and submarines or ships with nuclear propulsion system. Consequently, this work fits into the ocean engineering field.

### 1 INTRODUÇÃO

Os fenômenos de transferência de massa, energia ou quantidade de movimento estão presentes em todas as interações que ocorrem no universo. Desta forma, entende-se que o estudo do transporte de partículas, por corresponder à uma parcela destes fenômenos, é de extrema importância científica.

Os estudos de transporte de partículas têm se mostrado fundamentais para a ciência moderna, possuindo aplicações em campos como engenharia, biologia, medicina e astronomia, o que tem feito com que muitas teorias sejam desenvolvidas visando uma melhor compreensão destes fenômenos.

Neste sentido, um dos trabalhos mais importantes foi desenvolvido em 1872 por Ludwig Boltzmann (Figura 1.1), enquanto buscava uma equação capaz de descrever a dinâmica das partículas de um gás ideal. O alcance do seu esforço, contudo, revelou-se muito mais abrangente, pois a equação integro-diferencial parcial não-linear, conhecida como Equação de Boltzmann (BE - do inglês *Boltzmann Equation*), mostrou-se capaz de descrever o comportamento estatístico de qualquer sistema termodinâmico fora do equilíbrio, representando quantitativamente a distribuição espacial, direcional, energética e temporal de partículas em meios materiais (Garcia, 2002).



Figura 1.1: Ludwig Boltzmann < Imagem de domínio público>.

Como consequência, a BE adquiriu múltiplas aplicações, as quais se estendem por muitas áreas do conhecimento. Em engenharia, essa equação tem sido aplicada na pesquisa de evaporadores, fornalhas, câmaras de combustão, queimadores e isoladores (Mishra et al., 2012). Também tem sido utilizada em estudos de aerodinâmica (Sun et al., 2002), em simulações acústicas (Garcia et al., 2008; Sharipov and Kalempa, 2009), e em eletrônica (Stewart, 1971) através do cálculo de características do transporte eletrônico em metais e semicondutores. Além disso, a BE tem sido aplicada em análises de microfluidos (Tsai and Loyalka, 1976) e escoamentos em microestruturas (Filho, 2007).

Em geologia, a BE tem sido aplicada em estudos de sensoriamento remoto e no desenvolvimento das sondas nucleares que realizam prospecção de petróleo (Badruzzaman, 1986; Chen et al., 2012). Em agronomia, essa equação tem sido utilizada em análises da intensidade de radiação aplicada na vegetação para cálculos de taxas de fotossíntese (Shultis and Myneni, 1988). A BE também tem sido empregada na análise da influência de radiação incidente nas células e tecidos animais (Friedland and Kundrát, 2014), e, na medicina, tem sido fundamental para a predição da radiação em tratamentos de radioterapia e hipertermia, sendo também importante para o desenvolvimento de tomografias (Neto and Roberty, 1998a,b,c, 1999). Apesar da infinidade de trabalhos com enfoque na BE propriamente dita (Case and Zweifel, 1967; Cercignani, 1975, 1990; Cercignani et al., 1994; Loyalka and Hickey, 1989; Siewert, 2003a; Sone et al., 1990), a resolução dessa equação é singularmente difícil graças à não linearidade do operador integral e à presença de uma grande quantidade de variáveis. Para superar essas dificuldades, um modelo matemático geralmente é construído à partir da aplicação de algumas hipóteses simplificadoras na BE. A equação resultante, empregada neste trabalho, é conhecida como Equação de Transporte. No âmbito do transporte neutrônico, essa equação deriva do princípio de conservação de nêutrons em um meio material.

A maior parte da importância atribuída à ET é devida às suas aplicações no setor de energia nuclear, onde essa equação é fundamental para o estudo de grandezas cruciais no funcionamento de reatores nucleares (Dongarra et al., 1979; Duderstadt, 1979; Gunay et al., 2013; Hu et al., 2013; Mervin et al., 2013). O desenvolvimento destes reatores levou à renovação do interesse científico no transporte de nêutrons.

Neste campo de física de reatores, uma colaboração significante da utilização da Equação de Transporte está nos cálculos de blindagem nuclear (Garcia, 2002). A necessidade de precisão no projeto de blindagem é enorme; os menores erros podem comprometer ecossistemas inteiros nos entornos das plantas nucleares – e como a maior parte destas instalações se encontra às beiras de mares ricos em fauna e flora, grandes danos ambientais podem ser causados.

As plantas nucleares são construídas próximas à oceanos ou lagos, naturais ou artificiais, uma vez que grandes volumes de água são necessários para seu funcionamento. Para compreender este fato, portanto, serão descritos alguns dos processos que ocorrem nestas usinas. A Figura 1.2 ilustra, basicamente, a estrutura de um reator nuclear.



**Figura 1.2:** Representação esquemática do funcionamento de uma usina nuclear. Adaptada de Duderstadt and Hamilton (1976).

O princípio mais elementar do funcionamento de uma dessas usinas é a fissão nuclear. Este processo, que ocorre no vaso do reator, faz parte de um circuito primário. Nesta etapa, como pode ser visto na Figura 1.3, um átomo de Urânio 235, presente na célula de combustível é bombardeado com um nêutron. Como resultado, há a captura desse nêutron e produz-se um átomo de Urânio 236 que é altamente instável, e se desestabiliza espontaneamente, fissionando-se em átomos mais leves e liberando grandes quantidades de energia (Duderstadt and Hamilton, 1976; Kok, 2009; Sekimoto, 2007) (ao redor de 207 *MeV*, mantendo uma relação com a equação  $E = mc^2$ , onde *E* corresponde à energia liberada, *m* a massa da partícula, e *c* à velocidade da luz no meio (Guimaraes and de Mattos, 2011; Sekimoto, 2007; Stacey, 2001; van Dam et al., 2005)).



**Figura 1.3:** Figura esquemática de uma reação de fissão nuclear. Adaptada de Duderstadt and Hamilton (1976).

Em um circuito secundário, a energia então é utilizada para alimentar um evaporador. O vapor de água gerado propele uma turbina, que, ligada à um gerador, transforma a energia cinética em energia elétrica. Após este processo, o vapor não é liberado para a atmosfera devido à preocupação com a contaminação do meio ambiente; ao invés disso, é reutilizado no sistema fechado (Duderstadt and Hamilton, 1976; Kok, 2009; Sekimoto, 2007).

Desta maneira, a água precisa retornar ao estado líquido, e, para tanto, um condensador é utilizado para resfriá-la. Um sistema terciário tem a função de alimentar este condensador com enormes volumes de água (Duderstadt and Hamilton, 1976; Kok, 2009; Sekimoto, 2007). Assim, como grandes quantidades de líquido implicariam em custos elevados se houvessem de ser transportadas por longas distâncias, é necessário, do ponto de vista econômico, que as usinas nucleares estejam dispostas próximas à extensos corpos de água.

A consequência disto é que se ocorrerem erros nos cálculos do projeto de blindagem, o vapor de água do circuito secundário poderá, por exemplo, propagar radiação para o circuito terciário, contaminando à água que retorna ao meio ambiente, e, com efeito, causando um desastre ambiental.

Além deste fato, deve-se observar que nêutrons livres também são originados no processo de fissão; estes nêutrons, ao se chocarem com núcleos de átomos de Urânio 235, irão ocasionar outras reações de fissão, de modo que uma reação em cadeia poderá ser mantida (Duderstadt and Hamilton, 1976; Kok, 2009; Sekimoto, 2007; Stacey, 2001; van Dam et al., 2005) – um reator funcionará adequadamente se estiver em um estado crítico, ou seja, se as reações dentro do vaso ocorrem de forma controlada.

Devido a estes fatores, existe uma enorme necessidade de precisão em relação ao cálculo das grandezas envolvidas nos processos de um reator nuclear. O cálculo do fluxo escalar em meios multicamadas, realizado neste trabalho, simula uma necessidade importante no ambiente da física de reatores. Já o cálculo do fator de desvantagem térmica, também apresentado nesta dissertação, é importante na predição da quantidade de energia gerada pelo reator, e também nos cálculos de criticalidade, onde busca-se determinar a faixa ótima de operação do reator, evitando-se potenciais desastres nucleares (Stacey, 2001).

As metodologias utilizadas para a realização destes cálculos são divididas principalmente em dois grupos: as abordagens ditas probabilísticas e as chamadas de determinísticas. A Figura 1.4 foi desenvolvida por este trabalho para representar algumas possíveis ramificações de algumas abordagens utilizadas no estudo do transporte de nêutrons. Salienta-se que o agrupamento nestas categorias foi realizado com fim meramente explicativo, para este trabalho em especial, e portanto não compreende uma classificação definitiva ou completa das metologias utilizadas no transporte de nêutrons.



Figura 1.4: Metodologias utilizadas no transporte de nêutrons.

As metodologias probabilísticas, entre as quais se destaca o método de Monte Carlo (Gunay et al., 2013; Mervin et al., 2013; Wagner and Haghighat, 1998), oferecem soluções aproximadas para formulações exatas. As metodologias determinísticas, ao contrário, fornecem soluções exatas para formulações aproximadas.

Essas formulações determinísticas, por sua vez, podem ser subdividas em dois grandes grupos: os métodos numéricos e os métodos híbridos. Os métodos ditos numéricos compreendem metodologias baseadas no método de elementos finitos (Hennart and Valle, 2010; Ju et al., 2007; Lewis et al., 1975; Wang and Ragusa, 2009) e no método de diferenças finitas (Han et al., 2008). Já os métodos híbridos são aqueles em que a variável espacial pode ser tratada de maneira analítica. Entre esses, destaca-se os métodos de ordenadas discretas ( $S_N$  ou DOM - do inglês *Discrete Ordinates Method*) (Badruzzaman, 1986; Barichello, 2011; Barichello et al., 2000, 2009; Barros and Larsen, 1992; Barros et al., 1999, 2003; Cabrera, 2009; Chandrasekhar, 1950; Doicu and Trautmann, 2009). O DOM foi proposto por Wick (1943) e posteriormente desenvolvido por Chandrasekhar (1950). É baseado na discretização da variável angular por meio da aproximação do termo integral presente na Equação de Transporte por uma quadratura numérica. Deste modo, a equação integro-diferencial é transformada em um sistema de equações diferenciais que pode ser resolvido por abordagens puramente numéricas, ou pela aplicação de algum método analítico.

Pesquisadores tem dedicado seus esforços ao estudo desse método desde sua criação, portanto suas características são bem conhecidas. O DOM já foi comprovado como versátil, fácil de associar com outras metodologias, e com grandes aplicações em problemas unidimensionais em diferentes geometrias (Abreu, 2009; Doicu and Trautmann, 2009; Gonzales et al., 2009). Foi observado, também, que o DOM proporciona resultados mais satisfatórios nos casos em que a variação angular do fluxo não é precisamente representada pela aproximação isentrópica. Outra vantagem do método pode ser constatada no trabalho de Neto and Roberty (1998c), que realiza uma comparação do DOM com os métodos  $P_N$  e Global Galarkin Method; os resultados obtidos neste trabalho demonstram que o DOM é capaz de prover resultados bastante precisos sem, no entanto, envolver esforços analíticos ou computacionais elevados.

Contudo, algumas desvantagens do DOM também já foram contempladas. É conhecido por sofrer de dois tipos de erros de truncamento (Fattal, 2009; Hunter and Guo, 2015): (i) o espalhamento falso, devido à discretização do domínio espacial, no qual os feixes de radiação são erroneamente suavizados e (ii) o efeito de raio, causado pela discretização angular, onde a radiação emanada por fontes intensas é relacionada com direções fictícias. Além disso, o DOM apresenta dificuldades ao trabalhar com geometrias complexas (Neto and Neto, 1999).

Ainda que os problemas de transporte sejam principalmente relacionados com meios multidimensionais, problemas unidimensionais também possuem aplicações com grande importância, graças ao emprego de modelos matemáticos. Na teoria de reatores, três casos significativos podem ser aproximados como problemas unidimensionais (Altac, 1989):

(i) placas paralelas onde a composição varia apenas em uma coordenada cartesiana; (ii) reatores axial e cilindricamente simétricos onde cascas cilindricamente concêntricas e homogêneas possuem paredes não reflexivas; (iii) reatores esfericamente simétricos constituídos de séries de cascas concêntricas e homogêneas.

Como consequência, diversos autores empregaram o DOM para resolver problemas unidimensionais. Os resultados que obtiveram foram excelentes. Leal (2008) aplicou um método analítico para aproximação com ordenadas discretas em geometria cartesiana. Leitao et al. (2014) realizaram uma análise espectral das equações de transporte em meios multiplicativos. Jin et al. (2010) avaliaram um método numérico de segunda ordem no estudo da Equação de Transporte discreta. Neto and Neto (1999) exploraram meios cinzas homogêneos com espalhamento isotrópicos e superfícies translúcidas. Nunes and Barros (2009) realizaram cálculos de blindagem de radiação com um modelo de ordenadas discretas monoenergético.

Contudo, à despeito dos bons resultados que o DOM é capaz de fornecer, algumas metodologias foram criadas para aprimorá-lo. Isto foi feito, por exemplo, com intuito de resolver alguns dos problemas numéricos derivados da computação de raízes de polinômios característicos. No âmbito deste trabalho, duas entre estas metodologias adquirem maior significado: o método  $LTS_N$  e o método de Ordenadas Discretas Analítico (ADO - do inglês *Analitical Discrete Ordinates*).

Barichello (1992) desenvolveram o método  $LTS_N$ , que se distingue do DOM pela aplicação da transformada de Laplace na variável espacial. Este artifício leva à um sistema algébrico no domínio de Laplace. Assim, após a determinação da solução do problema transformado, a função inversa de Laplace deve ser obtida. Isto é realizado por meio de artifícios numéricos que envolvem matrizes mal condicionadas, o que acarreta num aumento do esforço computacional.

O método ADO, desenvolvido por Barichello and Siewert (1999), se diferencia do DOM por expressar de forma analítica a variável espacial e por determinar as constantes

de separação utilizando problemas de autovalores de ordem reduzida. Além disso, não necessita de métodos de interpolação, esquemas iterativos ou da discretização do domínio. Deste modo, supera o problema de espalhamento falso presente no DOM. Ademais, o método ADO proporciona a utilização de esquemas de quadratura mais arbitrários. Por causa destes fatores, esse método oferece vantagens relacionadas ao custo computacional, precisão e tempo de processamento.

A aplicação do método ADO em muitos problemas unidimensionais revelou performances notáveis em relação à precisão das soluções, ao custo computacional e a implementação dos códigos computacionais. Em problemas de gases rarefeitos, esse método foi capaz de fornecer soluções unificadas para diferentes modelos cinéticos (Scherer et al., 2009a,b), tais como os modelos BGK (Barichello et al., 2001), Gross-Jackson (Gross and Jackson, 1959; Scherer, 2005), MRS (Filho, 2007; Garcia and Siewert, 2006) e S (Cabrera and Barichello, 2006; Siewert, 2002a; Siewert and Valougeorgis, 2002). O método ADO produziu bons resultados em problemas de deslizamento viscoso com o modelo CLF (Camargo, 2003; Doicu and Trautmann, 2009; Siewert, 2001), e também forneceu resultados satisfatórios em problemas de misturas de gases com o modelo McCormack (Garcia and Siewert, 2004; Siewert, 2005; Siewert and Valougeorgis, 2004a,b). Além disso, demonstrou boa performance na solução de problemas de Poiseuille, Couette, creep térmico e salto de temperatura com o modelo CES (Siewert, 2002b, 2004). Finalmente, provouse eficiente no tratamento de problemas associados com diferentes condições de contorno (Knackfuss, 2005; Knackfuss and Barichello, 2006) e em problemas utilizando a Equação de Boltzmann Linear propriamente dita (Siewert, 2003a,b).

Resultados satisfatórios também têm sido obtidos utilizando o método ADO para a resolução de problemas multidimensionais (Barichello et al., 2011; Filho, 2011). Nestes problemas, a equação integro-diferencial é convertida em um sistema de EDP's através de uma quadratura multidimensional. Através do processo usual de integração, são construídos sistemas de EDO's acoplados. Os fluxos então passam a ser descritos em termos de grandezas médias. A partir de técnicas herdadas dos métodos nodais (Azmy, 1988;

Badruzzaman, 1986; Barros and Larsen, 1992; Dominguez et al., 2010a,b; Dominguez, 2006; Dominguez et al., 2005; Walters, 1986), o domínio é decomposto em nodos (ou células). Com a introdução de equações auxiliares, os coeficientes relacionados aos contornos do domínio são determinados. O aumento da complexidade do problema eleva o esforço computacional, contudo o caráter analítico do método ainda é mantido, e esquemas iterativos e métodos de interpolação não precisam ser utilizados.

Deste modo, levando-se em consideração as características favoráveis do método ADO, assim como seu desenvolvimento relativamente recente, este trabalho conduzirá um estudo da aplicação desse método em diversos problemas unidimensionais de transporte de nêutrons, estudando quantidades de interesse nestes tipos de problemas, com especial enfoque em física de reatores.

A contribuição deste trabalho consiste no emprego do método ADO na resolução de problemas ainda não solucionados por meio desta formulação, provando, para estes casos, que a metodologia apresentada é capaz de conferir soluções concisas e fechadas à baixo custo computacional. Além disto, pode-se destacar, como contribuições importantes deste trabalho, análises sobre a influência de algumas propriedades importantes, e a colaboração com a discussão à respeito do decaimento do fator de desvantagem em relação à espessura do moderador e a influência do grau de anisotropia linear no decaimento do fluxo escalar. Ademais, esta dissertação fornecerá resultados *benchmark* para problemas originais, que poderão ser utilizados como referência por outros pesquisadores. Finalmente, o desenvolvimento de um código computacional em softwares de distribuição livre, como o OCTAVE 4.0, caracterizará a potencialidade do método quanto a sua viabilidade econômica e acessibilidade à todos os níveis acadêmicos.

No segundo capítulo desta dissertação é fornecida uma fundamentação teórica à respeito do transporte de nêutrons. Neste capítulo podem ser encontradas informações sobre alguns aspectos importantes relativos ao setor de energia atômica. Busca-se contextualizar especialmente os tópicos relativos à história e as vantagens do uso de energia nuclear.

No capítulo 3 é apresentado o desenvolvimento do método ADO para a classe de problemas propostos aqui. Em especial, a solução homogênea é descrita como um decaimento exponencial. Por conta do tipo de termo fonte, a solução particular foi obtida separadamente, utilizando-se da proposta de valores constantes. A determinação de todos os coeficientes envolvidos se dá pela aplicação das condições de contorno (incidentes nos extremos do domínio) e condições de interface entre os meios.

No capítulo 4 são apresentados resultados para os problemas estudados. Neste capítulo, o código computacional é validado através da comparação dos resultados obtidos aqui com aqueles disponíveis na literatura, adquiridos através de outros métodos. Acompanhando o processo de validação, são realizadas análises comparativas do método ADO em relação aos métodos utilizados por outros autores. Em posterior às análises da performance do método, resultados originais *benchmark* são oferecidos em conjunto com análises sobre o comportamento físico do problema em relação à algumas propriedades importantes.

A primeira seção deste capítulo, a seção 4.1, apresenta uma categoria de problemas mais simples, oferecendo resultados para problemas isotrópicos em meios homogêneos. Os problemas presentes na seção 4.2, em seguida, envolvem os cálculos do coeficiente de albedo e do fator de transferência, com potencial aplicação em blindagem e na manutenção de reatores nucleares. A seção 4.3 trata de problemas semelhantes, com acréscimo dos efeitos de um espalhamento anisotrópico linear. Na seção 4.4 são resolvidos problemas em meios heterogêneos sem fonte interna. Na seção 4.5, problemas de blindagem são discutidos e uma pequena revisão bibliográfica sobre o tema encontra-se disponível. A seção 4.6, por fim, dedica-se aos problemas relativos ao cálculo do fator de desvantagem, também fornecendo uma curta revisão sobre este assunto.

Finalmente, o capítulo 5 apresentará as conclusões inferidas desta dissertação e possíveis propostas de continuidade.

### 2 FUNDAMENTAÇÃO TEÓRICA

Neste capítulo será apresentada uma fundamentação teórica à respeito do transporte de nêutrons. Na seção 2.1 será fornecido um resumo da história da física nuclear. Na seção 2.2 será realizada uma discussão à respeito do setor de energia nuclear. Na seção 2.3, grandezas básicas e os principais conceitos do transporte de nêutrons serão apresentados, visando-se melhorar a compreensão dos demais capítulos deste trabalho; por fim, na seção 2.4 é apresentada a modelagem da Equação de Boltzmann através de uma série de simplificações, resultando na Equação de Transporte posteriormente resolvida neste trabalho através do método ADO.

#### 2.1 Breve história da ciência nuclear

Nesta seção procura-se citar fatos históricos de grande impacto na história da ciência nuclear. Assim, descobertas dos mais renomados pesquisadores são brevemente descritas, com enfoque em suas contribuições para o avanço da pesquisa nuclear. Essa seção foi baseada principalmente nos trabalhos de Martins (2014) e de Jevremovic (2005).

#### 2.1.1 Da antiguidade grega até a descoberta do nêutron.

No quinto século antes de Cristo, os filósofos gregos Leucipo e Demócrito desenvolveram a teoria atomística, professando uma partícula infinitesimal, chamada de átomo, como constituinte básico, indivisível, invisível e elementar da realidade.

Mais de dois mil anos depois, John Dalton, no ano de 1803, resgatou essa teoria. Dalton postulou que os átomos preservam sua individualidade nas reações químicas, sendo também indivisíveis. Afirmava que os átomos de elementos iguais são indiferenciáveis, mas que átomos de elementos diferentes possuem pesos diferentes. Desta maneira, os elementos seriam caracterizados pelo peso de seus átomos. Anunciou, também, que compostos químicos são formados pelas uniões dos átomos de elementos diversos, de acordo com proporções numéricas simples. Após esta retomada, a ciência atômica avançou rapidamente.

Poucos anos depois, Avogado concluiu a existência de moléculas formadas pelas uniões de átomos, e deduções feitas sobre as leis de Faraday levaram-no ao entendimento de que os átomos transportavam cargas elétricas. Em 1869, Mendeleev apresentou a primeira classificação periódica dos elementos em função de seus pesos atômicos.

O primeiro modelo atômico foi introduzido por J. J. Thomson no século XX. Este modelo ficou conhecido como modelo "pudim de ameixas", pela analogia do núcleo positivo com um pudim, e dos elétrons, circulando-o, com ameixas. Este passo marcou o princípio da transição da física clássica à física moderna.

Thomson, com Rutherford como assistente, deu início ao estudo do elétron. Contou também com o auxílio de Lorentz. Através de campos elétricos e magnéticos, a relação entre carga e massa das partículas dos raios catódicos foi determinada. Esses raios foram identificados como feixes de elétrons. Em seguida, Robert Millikan estabeleceu à carga do elétron através de experimentos com gotas de óleo.

Poucos anos antes destas descobertas, Roentgen deparava-se com um fenômeno que modificaria a compreensão da ciência atômica; descobriu raios atravessando e sendo parcialmente absorvidos por corpos opacos. Por sua natureza misteriosa, estes raios foram batizados de Raios X.

Poincarré apresentou estudos sobre a capacidade dos Raios X de excitar materiais fosforescentes e fluorescentes. Henri Becquerel intensificou estes estudos, concluindo que sais de urânio produzem radiações semelhantes.

Nestes primórdios, os estudos sobre radioatividade tiveram vários contribuintes ilustres, como Kevin, Elster, Beattle, Smoluchwski, Geitel e Schmidt. Contudo, os maiores reconhecimentos são dedicados ao casal Pierre e Marie Curie, que à custo da própria saúde desvelaram as propriedades radioativas de vários elementos. A descoberta do rádio por esse casal em 1910, teria futuramente grande impacto na medicina.

Nessa época foram distinguidos três tipos de radiação: raios alfa, raios beta e raios gama. Os raios alfa foram determinados como partículas positivas por Rutherford, em consideração aos desvios que sofriam ao atravessar campos eletromagnéticos. Os raios beta são constituídos de elétrons de alta energia e foram estudados por Giesel, Meyer, Scheweidler, Becquerel, Kaufmann, Bragg e Fermi. O estudo da desintegração beta por Fermi constitui um dos marcos mais importantes da física nuclear. Os raios gama foram analisados por Rutherford, que os identificou como radiações eletromagnéticas já que não sofriam desvio em campos elétricos e magnéticos.

Após essas descobertas, Rutherford ainda apresentou uma de suas contribuições mais importantes: o modelo planetário de Rutherford .

Estudando o espalhamento de partículas alfa aceleradas se chocando contra uma fina lâmina de ouro, Rutherford observou que apenas uma entre dez mil partículas era refletida. Com isto, concluiu que o átomo não era maciço, mas constituído de grandes espaços vazios e que seu raio total deveria ser dez mil vezes superior ao de seu núcleo. Verificou que os elétrons, eletricamente negativos, trafegavam em altas velocidades por orbitas helicoidais em torno do núcleo de carga positiva. Este núcleo deveria ser maciço e pesado ao ponto de conter praticamente toda massa do átomo.

No entanto, o modelo de Rutherford não era capaz de explicar como os elétrons mantinham suas orbitas à despeito da atração dos prótons. Também não esclarecia a razão destas partículas não decaírem em direção ao núcleo por perdas de energia causadas pela emissão de radiação devido ao movimento acelerado. A solução para estes problemas de estabilidades foi descoberta em 1913, por Niels Bohr, com o desenvolvimento do modelo atômico quântico.

Bohr, um aluno de Rutherford, encontrou uma solução para as questões de estabilidade em trabalhos da mecânica quântica, que recém estava em surgimento. Segundo
ele, em orbitas especificas, os elétrons não emitiriam radiação, pois em estado estacionário possuiriam níveis quantizados e constantes de energia. Concluiu, também, que da transição entre os estados obtinha-se a produção da luz pelo surgimento de uma partícula denominada fóton, correspondente à diferença da energia entre as órbitas.

Essa proposta só foi possível graças ao trabalho de Max Planck e Albert Einstein. A radiação eletromagnética foi descrita pela primeira vez, e do estudo da radiação de corpos negros, surgiu o conceito da quantização de energia. A mecânica quântica, também chamada de mecânica ondulatória, começava a ser estruturada.

De Broglie, em 1924, definiu o postulado de que uma onda deve estar associada a um corpúsculo, assim como um corpúsculo deve estar associado a uma onda. Os trabalhos de Schroedinger e de Heisenberg com mecânica das matrizes foram definitivos para a construção da até então recente mecânica ondulatória.

Mas as partículas elementares da matéria ainda não haviam sido bem definidas; prótons e elétrons recém haviam sido propostos por Rutherford como constituintes do núcleo. A existência de uma outra partícula, formada por um próton e um elétron, não podia ser confirmada. Essa partícula se situaria no núcleo e seria conhecida como nêutron.

Em 1932, Chadwik assentou definitivamente a existência do nêutron, verificando-o experimentalmente. Com isto pôde-se compreender muitos dos fenômenos da radiação, atualmente entendidos a partir da interação de nêutrons.

#### 2.1.2 De Enrico Fermi à fissão nuclear.

O nome mais importante na ciência do aproveitamento da energia nuclear talvez seja o de Enrico Fermi. Sua teoria de 1933 sobre o decaimento beta constituiu a base do conceito de interações fracas. Fermi sugeriu que os elementos fossem irradiados com nêutrons através de uma fonte de Polônio-Berílio. Após dois anos de trabalho, conseguiu desenvolver uma fonte ainda mais forte, constituída de Rádio-Berílio. Com essa, bombardeou os elementos atômicos em ordem crescente de peso atômico. Acreditava-se que a eficiência dos nêutrons para produzir novos núcleos aumentasse com a sua energia. A experiência provou que esta ideia estava errada.

Os trabalhos sobre nêutrons de Fermi foram reunidos por Rutherford, que classificou a atividade produzida nos elementos como fraca, média ou forte. Em seguida, Fermi dedicou-se também ao estudo das seções de choque das reações com os nêutrons. O elemento utilizado em seus experimentos foi a prata. Ele observou que os resultados dependiam do material de que se constituía a mesa que suportava o espectroscópio: madeira ou mármore. Concluiu que esse fenômeno devia-se a moderação da velocidade dos nêutrons no hidrogênio da madeira.

Para evitar a dispersão de nêutrons, foi construído um anteparo de chumbo. Posteriormente, por uma inspiração momentânea, substituiu o chumbo por parafina e evidenciou que esse material amplificava os efeitos radioativos. Fermi deduziu que os nêutrons mais lentos eram mais eficazes na produção de reações nucleares em dados elementos. A parafina agia como moderador, fazendo com que as interações dos nêutrons com os núcleos de hidrogênio causassem uma perda de energia cinética. Descobriu-se, assim, o processo de termalização dos nêutrons, posteriormente utilizado no primeiro reator nuclear.

Logo, Fermi foi comunicado por Niels Bohr de que receberia o prêmio Nobel por seu trabalho na produção de elementos transurânicos (i.e. com número atômico maior que o do Urânio) resultantes do bombardeamento de Urânio com nêutrons. Em 1938, a descoberta mais importante na física nuclear foi feita enquanto Fermi recebia esse prêmio. Otto Hahn e Fritz Strassman descobriram a fissão do núcleo. Além disso, foi verificada a presença de bário como produto do bombardeamento do Urânio por um nêutron, e Lise Meitner concluiu que o bário era um fragmento resultante da fissão do Urânio.

#### 2.1.3 Da fissão ao primeiro reator nuclear.

Walter Zinn e Leo Szilard estudaram a emissão de nêutrons na fissão de Urânio. Fermi, Anderson e Haustein também direcionaram suas pesquisas a este tópico, onde comprovou-se viável manter uma reação em cadeia utilizando os nêutrons originados da fissão.

Fermi e Pegram consideraram necessário avisar ao governo americano sobre a possível criação de um novo tipo de explosivo, e assim uma carta foi enviada. O Ministro da Marinha recebeu Fermi dois dias depois.

Einstein estava ciente dos trabalhos de Fermi e Szilard, e, considerando a situação da Alemanha na Europa, enviou uma carta ao presidente Roosevelt, onde aconselhava a ligação do governo com o grupos de cientistas, a fim de regular e incentivar seus trabalhos na área nuclear (Golub, 2014).

A Comissão do Urânio foi criada em seguida. Fizeram parte de sua formação inicial os cientistas Briggs, Szilard, Wigner, Teller e Fermi. Logo depois, Roosevelt criou um comitê voltado a pesquisas de problemas bélicos. Bush foi indicado como presidente deste comitê, e reestruturou a Comissão do Urânio, adicionando os físicos Tuve, Pegram, Beams, Gunn e Urey no grupo.

Físicos americanos de renome como Compton e Lawrence passaram a participar ativamente das pesquisas. A reação em cadeia ainda não havia sido obtida, e a produção de Urânio-235 era muito pequena para a construção de um armamento militar.

A separação em larga escala do isótopo Urânio-235 do Urânio-238 foi elaborada em seguida. Grandes indústrias americanas, com o auxílio dos cientistas Urey, Dunning, e Lawrence, foram responsáveis pelos avanços no enriquecimento do Urânio, que se caracteriza como uma grande conquista na ciência nuclear. A produção de Plutônio-239, contudo, ainda era muito baixa. Foi proposta, então, a construção de um sistema que gerasse grandes quantidades deste elemento - este viria à ser o primeiro reator nuclear.

O governo determinou a aceleração do projeto atômico. As operações foram transferidas da Universidade de Colúmbia para a Universidade de Chicago. Neste local, Fermi e Anderson passaram a construir uma espécie de pilha nuclear. Assim, no estádio de atletismo da universidade, iniciou-se a construção do primeiro reator nuclear.

A colocação geométrica do combustível e a escolha do moderador foram problemáticas. Finalmente, o grafite foi escolhido para a moderação. O fluxo de nêutrons na pilha nuclear foi controlado por barras de Cádmio projetadas por Anderson e Zinn, com base nos trabalhos de Fermi. Com estes triunfos, o projeto nuclear obteve sucesso e o trabalho dos pesquisadores estava completo.

A reação em cadeia autossustentável ocorreu no dia 2 de dezembro de 1942 (Golub, 2014). O primeiro reator nuclear do mundo estava em operação.

## 2.2 A importância da energia nuclear

As vantagens do uso da energia nuclear em relação à outras fontes alternativas de energia têm ganho destaque crescente no cenário mundial, despertando interesse de diversas nações. Soluções únicas para a matriz energética mundial não são viáveis, e por isso é necessário que haja diversificação nas opções de produção de energia.

Por interesses econômicos, grandes investimentos estão sendo feitos no setor nuclear, devido à possibilidade de geração de grandes quantidades de eletricidade (NEA, 2007), e principalmente pela eficiência na obtenção de energia, já que a eletricidade gerada por fontes nucleares é considerada de baixo custo (Deutch, 2003; NEA, 2007). Na Tabela 2.1 apresenta-se o preço da geração de eletricidade para algumas fontes.

Fonte	Lignina	Carvão	Gás	Óleo	Nuclear	Hidrodinâmica	Vento	Solar
(Euro/ kWh)	0.033	0.030	0.031	0.036	0.021	0.07	0.07	0.6

Essa vantagem econômica decorre de fatores como o baixo preço do Urânio utilizado como combustível e do baixo custo de funcionamento das usinas nucleares, ja que pequenas quantidades de Urânio são capazes de gerar grandes quantidades de energia (Guimaraes and de Mattos, 2011). A densidade energética do Urânio é muito superior à de outras fontes de combustível, como pode ser observado na Tabela 2.2.

Tipo de combustível	Densidade energética (kWh/kg)	Número de vezes mais denso do
		que petróleo
U-235 puro	24,513,889.0	2,715,835.0
Urânio natural (em FBR)	6,666,667.0	738,462.0
Urânio enriquecido (em LWR)	960,000.0	106,338.0
Urânio natural (em LWR)	123,056.0	13,631.0
Propano	13.8	1.5
Butano	13.6	1.5
Gasolina	13.0	1.4
Diesel para aquecimento residencial	12.7	1.4
Biodiesel	11.4	1.3
Carvão (antracita)	9.0	1.0
Água represada à uma altura de 100m	0.0003	N/A

Tabela 2.2: Densidade energética de alguns combustíveis. Fonte: Guimaraes and de Mattos (2011).

Devido à esta alta densidade energética, plantas nucleares podem operar com quantidades relativamente pequenas de Urânio. Consequentemente, o transporte da matéria bruta necessária para a operação de uma planta nuclear é comparativamente barato. Isto também leva à uma diminuição no impacto ambiental gerado pelos meios de transporte envolvidos no processo. Existem outros aspectos que também tornam as usinas nucleares atrativas do ponto de vista ambiental. Uma usina nuclear adequadamente projetada e operando corretamente se destaca pelo baixo impacto ambiental, pois não causa a liberação de gases causadores do efeito estufa (como dióxido de carbono e metano (Patterson, 1986)) e não requer o alagamento de grandes áreas. Ademais, quanto ao tamanho das instalações, plantas nucleares são compactas em comparação as de outras fontes alternativas de energias (Comby, 2001), que cobrem grandes extensões de terra.

A confiabilidade da produção energética é outro aspecto positivo, pois em uma planta nuclear a geração de energia é constante, ocorrendo em 90% do tempo de existência da instalação. Isto ocorre porque a produção de energia nuclear não depende de fatores naturais, de modo que a quantidade de energia gerada se mantém estável à despeito de fatores climáticos, como a intensidade solar, do vento ou das ondas. Consequentemente, condições ambientais agressivas não afetam a produção de energia nuclear (Comby, 2001).

A duração das reservas naturais de combustível nuclear também caracteriza um ponto vantajoso. Previsões científicas indicam que as reservas naturais de Urânio devem durar mais do que as de petróleo ou gás. A Tabela 2.3 representa essa situação.

Tabela 2.3: Duração estimada das reservas dos respectivos combustíveis. Adaptada de NEA (2007).

Fonte	Carvão	Petróleo	Gás	Urânio
Duração (anos)	155	41	65	85

As aplicações dos reatores nucleares não estão restritas apenas a geração de energia. No estudo da matéria por espectroscopia (Duderstadt and Hamilton, 1976), os reatores nucleares são importantes por produzirem grandes quantidades de radiação, principalmente na forma de nêutrons e raios gama. Na industria e na medicina a radiação pode ser utilizada para transmutar núcleos em isótopos artificiais para a produção de traçadores. Reatores compactos também são utilizados como fonte de energia em ambientes particularmente remotos, como em estações de pesquisa nos polos ou estações orbitais (Duderstadt and Hamilton, 1976), bem como garantir a autonomia de submarinos, navios e foguetes através de seus sistemas de propulsão.

### **2.3** Conceitos fundamentais no transporte de nêutrons

Esta seção será dedicada aos conceitos fundamentais para compreensão deste trabalho, dando enfoque ao transporte de nêutrons que migram em um meio hospedeiro com certas propriedades nucleares, caracterizadas fenomenologicamente em termos das seções de choque. Esta seção é fundamentada em Bell and Glasstone (1970), Duderstadt (1979), Stacey (2001) e Pazinatto (2011).

#### **2.3.1** Seção de choque microscópica ( $\sigma$ )

A seção de choque microscópica é a medida virtual de área relacionada com a probabilidade de um determinado isótopo sofrer algum tipo de reação nuclear. A Figura 2.1 apresenta as reações de choque para os diversos tipos de reação nuclear.



Figura 2.1: Distribuição das seções de choque por tipo de reação. Adaptada de Duderstadt (1979).

#### **2.3.2** Seção de choque macroscópica $(\Sigma)$

A seção de choque macroscópica é definida como o produto entre a seção de choque microscópica ( $\sigma$ ) e a densidade de isótopos presentes em um certo volume hospedeiro. Desta forma, esta grandeza está relacionada com a probabilidade que terá uma partícula com certa energia de sofrer um determinado tipo de reação nuclear ao migrar em um meio hospedeiro caracterizado por uma população de isótopos.

$$\Sigma = N_{is}.\sigma. \tag{2.1}$$

onde  $N_{is}$ . representa o número de isótopos.

Quanto maior for a seção de choque macroscópica, menor será a distância média percorrida pela partícula (nêutron, foton) até que tal reação nuclear ocorra. Esta distância média também é chamada de livre caminho médio (ou mean free path - mfp), e é calculada segundo a equação

$$mfp = \frac{1}{\Sigma}.$$
(2.2)

#### 2.3.3 Reações nucleares

- Reação do tipo (n,2n) e (n,3n): Uma reação é do tipo (n,2n) quando o número de nêutrons emergentes é duas vezes maior do que o número de nêutrons incidentes. De modo análogo, uma reação é do tipo (n,3n) quando a quantia de nêutrons subsequentes à reação é três vezes maior do que à quantia incidente.
- Reação do tipo (n,α) e (n,p): Uma reação é do tipo (n,α) quando é liberada uma partícula α como resultado da absorção de um nêutron; analogamente, uma reação é do tipo (n,p) quando um próton é liberado por essa absorção.
- Espalhamento elástico e inelástico: Um processo é chamado de espalhamento elástico (*n*,*n*) quando, após um choque, o núcleo alvo permanece inalterado em sua composição isotrópica e em seu estado energético. Um processo é considerado espalhamento inelástico quando, como resultado de uma colisão, o núcleo alvo permanece inalterado quanto à sua composição, mas tem seu estado energético alterado.
- Captura radioativa (n,γ): Uma reação é considerada uma captura radioativa (n,γ) quando o nêutron e núcleo atômico ao colidirem, se combinam para formar um núcleo mais pesado. Nesse processo, o excesso de energia é liberado na forma de radiação γ.
- Fissão nuclear: É o processo ocasionado por meio de colisões, nas quais o núcleo de um isótopo é retirado de sua estabilidade energética e se divide em dois ou mais elementos, liberando grandes quantidades de energia. Este processo é o principal responsável pelo funcionamento das usinas termonucleares.

## **2.3.4** Densidade angular $N(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)$

A densidade angular é definida como o número médio de partículas presentes em um volume unitário dV ocupando uma posição  $\vec{r}$ , possuindo energia dE em torno de Ee direção  $d\vec{\Omega}$  em torno de  $\vec{\Omega}$ , para um dado instante de tempo t. Como tais variáveis são independentes, é possível que partículas em um mesmo volume unitário apresentem densidades diferentes de acordo com suas características. Portanto, o número esperado de partículas contidas em um elemento de volume infinitesimal corresponderá à  $N(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) dV d\vec{\Omega} dE$ .

#### 2.3.5 Espaço de fase

O espaço de fase é a representação do estado das variáveis do sistema. No caso do transporte tridimensional de nêutrons, estas variáveis são sete, absolutamente independentes: três relacionadas à posição no espaço, duas correspondentes à direção de migração, uma referente ao tempo e uma relacionada a energia de reação.

### 2.4 Modelagem matemática da equação de Boltzmann

Todo o equacionamento desta seção também tem como fundamento Bell and Glasstone (1970), Duderstadt (1979), Stacey (2001) e Pazinatto (2011).

A Equação de Boltzmann corresponde à um modelo matemático capaz de descrever o comportamento médio de toda uma população de partículas. Para tanto, algumas considerações precisam ser feitas com relação a física do problema:

> • Flutuações estatísticas são consideradas desprezíveis no interior dos elementos de velocidade e espaço

Tal hipótese é necessária pois os elementos de velocidade e espaço são considerados suficientemente grandes. Além disso, a Equação de Boltzmann não é capaz de considerar estas flutuações estatísticas.

• Tempo de colisão de nêutrons é considerado nulo

Tal consideração é razoável uma vez que a vida dos núcleos compostos é extremamente pequena. O mesmo pode se dizer das forças nucleares em relação a distância média entre os nêutrons.

• Inexistência de colisões entre nêutrons

Tal conjectura é apropriada porque a densidade de nêutrons é extremamente pequena em comparação a dos núcleos-alvo em sistemas realísticos.

• Energia de vibração dos átomos e moléculas é desprezível

Este pressuposto é apropriado desde que a energia de vibração dos átomos ou moléculas não seja maior do que a energia de ligação dos átomos ou moléculas do reticulado cristalográfico (relacionado a distribuição dos átomos ou molecular em planos com certas propriedades).

#### Campos forças externos são nulos

Tal pressuposto é razoável porque forças gravitacionais não possuem intensidade suficiente para influenciar o movimento dos nêutrons, e os campos elétricos e/ou magnéticos não atuam sobre partículas que não possuem carga elétrica. Dessa forma, espera-se que a migração dos nêutrons ocorra em linha reta e com velocidade constante entre as colisões.

#### • Espaço isentrópico

Significa que os quaisquer efeitos incorporados no sistema não dependem da orientação dos nêutrons.

**Balanço de nêutrons** 

No transporte de partículas neutras é comum substituir as três variáveis da velocidade  $\vec{v} = (v_1, v_2, v_3)$  pela energia cinética

$$E = \frac{mv^2}{2},\tag{2.3}$$

onde  $v = |\vec{v}|$  corresponde à magnitude do vetor velocidade e m à massa da partícula.

Em uma transformação em coordenadas esféricas, obtêm-se que

$$\vec{\Omega} = \vec{v}/v = (\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3), \tag{2.4}$$

onde

2.4.1

$$\Omega_1 = \sqrt{1 - \mu^2} \cos(\phi), \quad \Omega_2 = \sqrt{1 - \mu^2} \sin(\phi), \quad \Omega_3 = \mu,$$
(2.5)

sendo  $\mu = \cos(\phi)$  traduz o ângulo polar ( $0 \le \theta \le \pi$ ) e  $\phi$  o ângulo azimutal ( $0 \le \phi \le 2\pi$ ).

O elemento de integração na esfera unitária é  $d\vec{\Omega} = d\mu d\phi$ , de modo que se f for uma função de  $\vec{\Omega}$ , pode-se dizer que

$$\int_{4\pi} f(\vec{\Omega}) d\vec{\Omega} = \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 f(\mu, \phi) d\mu \, d\phi,$$
(2.6)

com  $4\pi$  representando que a região de integração corresponde a esfera unitária.

Com efeito, a área desta é obtida quando  $f(\vec{\Omega}) = 1$ , conforme

$$\int_{4\pi} d\vec{\Omega} = \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 d\mu \, d\phi = 4\pi.$$
(2.7)

A seção de choque diferencial ou duplamente diferencial (em razão da direção e energia) de uma dada reação exprime a probabilidade dos nêutrons emergentes desta adquirirem determinada direção ou energia. Matematicamente ela pode ser definida como

$$\sigma_k(\vec{r}, E') f_k(\vec{r}; \vec{\Omega}', E' \to \vec{\Omega}, E), \qquad (2.8)$$

onde  $\sigma_k$  corresponde à seção de choque para a reação do tipo k (que pode ser espalhamento elástico, inelástico, captura radioativa, absorção e/ou fissão);  $f_k(\vec{r}; \vec{\Omega}', E' \rightarrow \vec{\Omega}, E) d\mu d\vec{\Omega}$  expressa à probabilidade, após a reação do tipo k, dos nêutrons com direção  $\Omega'$  e energia E', passassem a migrar com direção  $\vec{\Omega}$  e energia E.

Quando sofre integração em todas as direções e energias, a função  $f_k$  é normalizada. A probabilidade total de emergirem nêutrons com direção  $\vec{\Omega}$  e energia E, consequentemente, deve ser igual ao somatório das probabilidades deste acontecimento ocorrer em cada uma das possíveis reações k comentadas anteriormente. Assim

$$\sigma(\vec{r}, E')f(\vec{r}; \vec{\Omega}', E' \to \vec{\Omega}, E) = \sum_{k} \sigma_k(\vec{r}, E')f_k(\vec{r}; \vec{\Omega}', E' \to \vec{\Omega}, E).$$
(2.9)

Considerando-se que apenas os nêutrons que sofrerem colisões no intervalo de tempo  $\Delta t$  sairão de  $dV d\vec{\Omega} dE$ , e sabendo que a distância percorrida por um nêutron no instante  $t + \Delta t$  é  $v\Delta t$ , então o número de partículas em  $dV d\vec{\Omega} dE$  pode ser representado por

$$N(\vec{r} + \vec{\Omega}v\Delta t, \vec{\Omega}, E, t + \Delta t) \, dV \, d\vec{\Omega} \, dE = \boxed{\text{número de nêutrons que não colidiram}} + \\ + \boxed{\text{quantidade de nêutrons que migram para o interior}} + \\ + \boxed{\text{nêutrons gerados pela fonte interna}}. \quad (2.10)$$

Considerando também que a probabilidade de um nêutron sofrer colisão é dada por sua seção de choque total  $\sigma_t(\vec{r}, E)$  multiplicada pela distância percorrida  $v\Delta t$ , então a probabilidade deste nêutron de não sofrer colisão será  $1 - \sigma_t(\vec{r}, E)v\Delta t$ . Desta forma, a quantidade de nêutrons em  $dV d\vec{\Omega} dE$  que não sofrerão colisão é calculada pelo produto da densidade de nêutrons no espaço fase pela probabilidade de que não haja colisão, ou seja

número de nêutrons que não colidiram =  
= 
$$N(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)(1 - \sigma_t(\vec{r}, E)v\Delta t)dVd\vec{\Omega}dE.$$
 (2.11)

Além disso, o número de nêutrons que migram para o interior do elemento  $dV d\vec{\Omega} dE$ por qualquer reação será

$$\begin{array}{l}
\left[ \text{quantidade de nêutrons que migram para o interior} \right] = \\
= \left[ \int_{0}^{\infty} \int_{4\pi} \sigma(\vec{r}, E') f(\vec{r}, \vec{\Omega}', E' \to \vec{\Omega}, E) v' N(\vec{r}, \vec{\Omega}', E', t) d\vec{\Omega}' dE' \right] \Delta t \, dV d\vec{\Omega} dE. \quad (2.12)
\end{array}$$

Por sua vez, a quantia de nêutrons gerados na fonte interna pode ser representada por

$$\boxed{\text{n}\hat{\text{e}}\text{u}\text{trons gerados pela fonte interna}} = Q(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)\Delta t \, dV d\vec{\Omega} dE.$$
(2.13)

Deste modo, a Eq. (2.10) pode ser reescrita como

$$\begin{split} N(\vec{r} + \vec{\Omega}v\Delta t, \vec{\Omega}, E, t + \Delta t) dV \, d\vec{\Omega}dE &= N(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)(1 - \sigma_t(\vec{r}, E)v\Delta t) dV d\vec{\Omega}dE + \\ &+ \left[ \int_0^\infty \int_{4\pi} \sigma(\vec{r}, E') f(\vec{r}, \vec{\Omega'}, E' \to \vec{\Omega}, E) v' N(\vec{r}, \vec{\Omega'}, E', t) d\vec{\Omega'} dE' \right] \Delta t dV d\vec{\Omega} dE + \\ &+ Q(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) \Delta t \, dV d\vec{\Omega} dE. \end{split}$$
(2.14)

Dividindo a Eq. (2.14) por  $\Delta t \, dV d\vec{\Omega} dE$ , rearranjando os termos e fazendo  $\Delta t \to 0$ , tem-se

$$\lim_{\Delta t \to 0} \left[ \frac{N(\vec{r} + \vec{\Omega}v\Delta t, \vec{\Omega}, E, t + \Delta t) - N(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)}{\Delta t} \right] = -vN(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)\sigma_t(\vec{r}, E) + \int_0^\infty \int_{4\pi} \sigma(\vec{r}, E') f(\vec{r}, \vec{\Omega'}, E' \to \vec{\Omega}, E) v'N(\vec{r}, \vec{\Omega'}, E', t) d\vec{\Omega'} dE' + Q(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t), \quad (2.15)$$

resultando em

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt}N(\vec{r},\vec{\Omega},E,t) &= -vN(\vec{r},\vec{\Omega},E,t)\sigma_t(\vec{r},E) + \\ &+ \int_0^\infty \int_{4\pi} \sigma(\vec{r},E')f(\vec{r},\vec{\Omega'},E' \to \vec{\Omega},E)v'N(\vec{r},\vec{\Omega'},E',t)d\vec{\Omega'}dE' + \\ &+ Q(\vec{r},\vec{\Omega},E,t). \end{aligned}$$
(2.16)

Pode-se ainda reescrever a Eq. (2.16) em termos do fluxo angular  $\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t) = vN(\vec{r}, \vec{\Omega}, E, t)$ , de forma que

$$\frac{1}{v}\frac{d}{dt}\Psi(\vec{r},\vec{\Omega},E,t) = -\Psi(\vec{r},\vec{\Omega},E,t)\sigma_t(\vec{r},E) + \\
+ \int_0^\infty \int_{4\pi} \sigma(\vec{r},E')f(\vec{r},\vec{\Omega}',E'\to\vec{\Omega},E)\Psi(\vec{r},\vec{\Omega}',E',t)d\vec{\Omega}'dE' + \\
+ Q(\vec{r},\vec{\Omega},E,t). \quad (2.17)$$

A derivada total presente na Eq. (2.17) pode ser expandida de acordo com a Regra da Cadeia

$$\frac{d}{dt}\Psi(\vec{r},\vec{\Omega},E,t) = \frac{\partial\Psi}{\partial x}\frac{dx}{dt} + \frac{\partial\Psi}{\partial y}\frac{dy}{dt} + \frac{\partial\Psi}{\partial z}\frac{dz}{dt} + \frac{\partial\Psi}{\partial t}\frac{dt}{dt},$$
(2.18)

onde

$$\frac{dx}{dt} = v\Omega_x, \tag{2.19}$$

$$\frac{dy}{dt} = v\Omega_y, \tag{2.20}$$

$$\frac{dz}{dt} = v\Omega_z. \tag{2.21}$$

Sendo assim, o termo diferencial pode ser reescrito como

$$\frac{d}{dt}\Psi(\vec{r},\vec{\Omega},E,t) = v\left[\Omega_x\frac{\partial\Psi}{\partial x} + \Omega_y\frac{\partial\Psi}{\partial y} + \Omega_z\frac{\partial\Psi}{\partial z}\right] = v(\vec{\Omega}\cdot\nabla\Psi) + \frac{\partial\Psi}{\partial t},\qquad(2.22)$$

fazendo com que a Eq. (2.17) assuma o formato

$$\frac{1}{v}\frac{\partial}{\partial t}\Psi(\vec{r},\vec{\Omega},E,t) + \vec{\Omega}\cdot\nabla\Psi(\vec{r},\vec{\Omega},E,t) + \sigma_t(\vec{r},E)\Psi(\vec{r},\vec{\Omega},E,t) = \\
+ \int_0^\infty \int_{4\pi} \sigma(\vec{r},E')f(\vec{r},\vec{\Omega}',E'\rightarrow\vec{\Omega},E)\Psi(\vec{r},\vec{\Omega}',E',t)d\vec{\Omega}'dE' + Q(\vec{r},\vec{\Omega},E,t), \quad (2.23)$$

que caracteriza a forma convencional da equação integro-diferencial parcial de transporte de nêutrons.

#### 2.4.2 Construção de um modelo simplificado

Por conta da dificuldade em lidar diretamente com a Eq. (2.23) costuma-se criar à partir dela uma série de modelos, nos quais são preservadas apenas as características de interesse dos fenômenos a seres estudados. Estes modelos são basicamente versões simplificadas da equação completa e as hipóteses utilizadas permitem a resolução exata destes problemas aproximados. Entre estas simplificações, pode-se considerar, por exemplo,

#### • Estado Estacionário

Neste caso, considera-se que o fenômeno é invariante no tempo. Sendo assim, desconsidera-se a influência do tempo e ainda faz-se

$$\frac{\partial}{\partial t}\Psi\left(\vec{r},\vec{\Omega},E,t\right) = 0 \tag{2.24}$$

resultando em

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) + \sigma_t(\vec{r}, E) \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}, E) = + \int_0^\infty \int_{4\pi} \sigma(\vec{r}, E') f(\vec{r}, \vec{\Omega}', E' \to \vec{\Omega}, E) \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}', E') d\vec{\Omega}' dE' + + Q(\vec{r}, \vec{\Omega}, E). \quad (2.25)$$

#### • Regime Monoenergético

Neste caso, considera-se que as oscilações energéticas do problema pertencem a um único grupo (limitado).

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \sigma_t(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \int_{4\pi} \sigma(\vec{r}) f(\vec{r}, \vec{\Omega}' \to \vec{\Omega}) \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' + Q(\vec{r}, \vec{\Omega}). \quad (2.26)$$

#### • Espalhamento isotrópico

Em um dos casos que serão estudados aqui, será considerado apenas o espalhamento isotrópico, significando que reações como as de fissão e/ou absorção não serão consideradas, e ainda que as partículas não possuem direção preferencial para migração. Sendo assim

$$\sigma(\vec{r})f(\vec{r},\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega}) = \frac{\sigma_s(\vec{r})}{4\pi},$$
 no caso tridimensional, (2.27)

$$\sigma(\vec{r})f(\vec{r},\vec{\Omega}'\to\vec{\Omega}) = \frac{\sigma_s(x)}{2},$$
 no caso unidimensional (2.28)

e portanto

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \sigma_t(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{\sigma_s(\vec{r})}{4\pi} \int_{4\pi} \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' + Q(\vec{r}, \vec{\Omega}). \quad (2.29)$$

• Meio Homogêneo

Em meios homogêneos, as seções de choque macroscópica são independentes da posição. Desta forma

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \sigma_t \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_{4\pi} \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}') d\vec{\Omega}' + Q(\vec{r}, \vec{\Omega}).$$
(2.30)

#### • Geometria Cartesiana Unidimensional

Para estes problemas, além da não dependência da simetria azimutal, o problema passa a ser em função apenas uma variável espacial. Assim

$$\mu \frac{d}{dx} \Psi(x,\mu) + \sigma_t \Psi(x,\mu) = \frac{\sigma_s}{2} \int_{-1}^{1} \Psi(x,\mu') d\mu' + Q(x,\mu).$$
(2.31)

A Eq. (2.31) corresponde ao modelo de transporte de nêutrons que será utilizado em parte deste trabalho, com a variável espacial dimensional.

#### 2.4.3 Adimensionalização da variável espacial

No caso de uma eventual necessidade de adimensionalizar a Eq. (2.31) na variável espacial, para efeito de uma análise de resultados ou comparação desta formulação com outras, parte-se de

$$\mu \frac{d}{dx} \Psi(x,\mu) + \sigma_t \Psi(x,\mu) = \frac{\sigma_s}{2} \int_{-1}^1 \Psi(x,\mu') d\mu' + Q(x,\mu)$$
(2.32)

e propõe-se a mudança de variável

$$\tau = x\sigma_t, \tag{2.33}$$

fazendo com que a Eq. (2.32) fique reescrita na forma

$$\mu \sigma_t \frac{d}{d\tau} \Psi(\frac{\tau}{\sigma_t}, \mu) + \sigma_t \Psi(\frac{\tau}{\sigma_t}, \mu) = \frac{\sigma_s}{2} \int_{-1}^1 \Psi(\frac{\tau}{\sigma_t}, \mu') d\mu' + Q(\frac{\tau}{\sigma_t}, \mu).$$
(2.34)

Rearranjando os termos, chega-se em

$$\mu \frac{d}{d\tau} \Psi(\frac{\tau}{\sigma_t}, \mu) + \Psi(\frac{\tau}{\sigma_t}, \mu) = \frac{\sigma_s}{\sigma_t} \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \Psi(\frac{\tau}{\sigma_t}, \mu') d\mu' + Q(\frac{\tau}{\sigma_t}, \mu),$$
(2.35)

onde, através das mudanças de variáveis

$$c_0 = \frac{\sigma_s}{\sigma_t},\tag{2.36}$$

$$\overline{\Psi}(\tau,\mu) = \Psi(\frac{\tau}{\sigma_t},\mu), \qquad (2.37)$$

$$\overline{Q}(\tau,\mu) = \frac{1}{\sigma_t} Q(\frac{\tau}{\sigma_t},\mu), \qquad (2.38)$$

a equação que representa o modelo de transporte de nêutrons na forma adimensional será

$$\mu \frac{d}{d\tau} \overline{\Psi}(\tau,\mu) + \overline{\Psi}(\tau,\mu) = \frac{c_0}{2} \int_{-1}^{1} \overline{\Psi}(\tau,\mu') d\mu' + \overline{Q}(\tau,\mu).$$
(2.39)

É importante salientar que apesar de ter se dedicado esta subseção para tratar da adimensionalização, todo o trabalho foi desenvolvido utilizando variáveis dimensionais.

# **3 FORMULAÇÃO MATEMÁTICA DO MÉTODO DE ORDENADAS DISCRETAS ANALÍTICO**

Segundo Barichello (1992) e Barichello and Siewert (1999), a equação de transporte de nêutrons unidimensional em regime estacionário monoenergético, aplicada à um meio homogêneo com espalhamento linearmente anisotrópico é dada por

$$\mu \frac{d}{dx} \Psi(x,\mu) + \sigma_t \Psi(x,\mu) = \frac{\sigma_{s0}}{2} \int_{-1}^1 \Psi(x,\mu') d\mu' + \frac{3}{2} \mu \sigma_{s1} \int_{-1}^1 \mu' \Psi(x,\mu') d\mu' + Q(x,\mu), \quad (3.1)$$

onde  $x \in \mu$  correspondem respectivamente a variável que indica a posição e direção em que o fluxo angular  $\Psi$  está sendo calculado,  $\sigma_{s0} \in \sigma_{s1}$  correspondem respectivamente aos coeficientes de espalhamento isotrópico e anisotrópico linear do problema, e Q corresponde à uma fonte interna.

Contudo, de acordo com o método ADO, os termos integrais da Eq. (3.1) devem ser reescritos da seguinte forma

$$\begin{split} \int_{-1}^{1} \Psi(x,\mu')d\mu' &= \int_{-1}^{0} \Psi(x,\mu')d\mu' + \int_{0}^{1} \Psi(x,\mu')d\mu' \\ &= -\int_{0}^{-1} \Psi(x,\mu')d\mu' + \int_{0}^{1} \Psi(x,\mu')d\mu' \\ &= \int_{0}^{1} \Psi(x,-\mu')d\mu' + \int_{0}^{1} \Psi(x,\mu)d\mu' \\ &= \int_{0}^{1} \left[ \Psi(x,\mu') + \Psi(x,-\mu') \right]d\mu', \end{split}$$

$$\begin{split} \int_{-1}^{1} \mu' \Psi(x,\mu') d\mu' &= \int_{-1}^{0} \mu' \Psi(x,\mu') d\mu' + \int_{0}^{1} \mu' \Psi(x,\mu') d\mu' \\ &= -\int_{0}^{-1} \mu' \Psi(x,\mu') d\mu' + \int_{0}^{1} \mu' \Psi(x,\mu') d\mu' \\ &= -\int_{0}^{1} \mu' \Psi(x,-\mu') d\mu' + \int_{0}^{1} \mu' \Psi(x,\mu) d\mu' \\ &= \int_{0}^{1} \mu' \left[ \Psi(x,\mu') + \Psi(x,-\mu') \right] d\mu', \end{split}$$

Além disso, de acordo com o tratamento utilizado no método de ordenadas discretas, estes termos integrais são aproximados por meio de uma quadratura numérica da seguinte maneira

$$\int_0^1 \Psi(x,\mu')d\mu' = \sum_{k=1}^N w_k \left[\Psi(x,\mu_k) + \Psi(x,-\mu_k)\right],$$
(3.2)

e

$$\int_0^1 \mu' \Psi(x,\mu') d\mu' = \sum_{k=1}^N \mu_k w_k \left[ \Psi(x,\mu_k) + \Psi(x,-\mu_k) \right],$$
(3.3)

onde  $w_k$  é o peso associado a direção  $\mu_k$  quando feita a discretização do termo integral pelo esquema de quadratura definido em [0, 1].

Desta forma a variável  $\mu$ , que representa a direção percorrida por um nêutron, será considerada em apenas algumas direções discretas.

Contudo, a quadratura utilizada neste trabalho é a quadratura de Gauss-Legendre, que é aplicável somente para o intervalo de integração [-1, 1], e não [0, 1]. Consequentemente, para trabalhar-se no semi domínio [0, 1] é necessário realizar-se um mapeamento das direções discretas. Para isso, realiza-se as seguintes mudanças de variáveis

$$2\mu_k = y_k + 1, (3.4)$$

e

$$w_k = \frac{1}{2}v_k,\tag{3.5}$$

onde  $y_k$  e  $v_k$  representam respectivamente os pontos e os pesos na quadratura de Gauss-Legendre no intervalo [-1, 1] mapeados respectivamente para nós  $\mu_k$  e pesos  $w_k$  no semi domínio [0, 1].

Segundo Barichello and Siewert (1999), após a discretização dos termos integrais presentes na Eq. (3.1), obtém-se dois sistemas de equações, ambos de i = 1, ..., N, de modo que à um corresponde apenas direções positivas  $\{\mu_i\}$ , e à outro somente direções negativas  $\{-\mu_i\}$ . Desta maneira, durante a resolução dos problemas, são utilizados no total o dobro de termos na quadratura numérica em relação à outros métodos trabalhando com o mesmo valor de N. Portanto, este tratamento constitui uma das maiores vantagens do método ADO, que se beneficia em termos de precisão.

Com esta distinção entre as direções, a Eq. (3.1) pode ser subdividida em

$$\mu_{i} \frac{d}{dx} \Psi(x, \mu_{i}) + \sigma_{t} \Psi(x, \mu_{i}) = \frac{\sigma_{s0}}{2} \sum_{k=1}^{N} w_{k} \left[ \Psi(x, \mu_{k}) + \Psi(x, -\mu_{k}) \right] + \frac{3}{2} \mu_{i} \sigma_{s1} \sum_{k=1}^{N} \mu_{k} w_{k} \left[ \Psi(x, \mu_{k}) - \Psi(x, -\mu_{k}) \right] + Q(x, \mu_{i}) \quad (3.6)$$

e

$$-\mu_{i}\frac{d}{dx}\Psi(x,-\mu_{i}) + \sigma_{t}\Psi(x,-\mu_{i}) = \frac{\sigma_{s0}}{2}\sum_{k=1}^{N}w_{k}\left[\Psi(x,\mu_{k}) + \Psi(x,-\mu_{k})\right] - \frac{3}{2}\mu_{i}\sigma_{s1}\sum_{k=1}^{N}\mu_{k}w_{k}\left[\Psi(x,\mu_{k}) - \Psi(x,-\mu_{k})\right] + Q(x,-\mu_{i}), \quad (3.7)$$

para i, ..., N e  $\alpha = 1, ..., M$ ..

Neste trabalho o problema heterogêneo será considerado como um arranjo de M problemas homogêneos, onde cada região  $\alpha = 1, ..., M$  tem as mesmas características descritas pela Eq. (3.7), que, portanto, pode ser reescrita como

$$\mu_{i}\frac{d}{dx}\Psi_{\alpha}(x,\mu_{i}) + \sigma_{t,\alpha}\Psi_{\alpha}(x,\mu_{i}) = \frac{\sigma_{s0,\alpha}}{2}\sum_{k=1}^{N}w_{k}\left[\Psi_{\alpha}(x,\mu_{k}) + \Psi_{\alpha}(x,-\mu_{k})\right] + \frac{3}{2}\mu_{i}\sigma_{s1,\alpha}\sum_{k=1}^{N}\mu_{k}w_{k}\left[\Psi_{\alpha}(x,\mu_{k}) - \Psi_{\alpha}(x,-\mu_{k})\right] + Q_{\alpha}(x,\mu_{i}) \quad (3.8)$$

$$-\mu_{i}\frac{d}{dx}\Psi_{\alpha}(x,-\mu_{i}) + \sigma_{t,\alpha}\Psi_{\alpha}(x,-\mu_{i}) = \frac{\sigma_{s0,\alpha}}{2}\sum_{k=1}^{N}w_{k}\left[\Psi_{\alpha}(x,\mu_{k}) + \Psi_{\alpha}(x,-\mu_{k})\right] - \frac{3}{2}\mu_{i}\sigma_{s1,\alpha}\sum_{k=1}^{N}\mu_{k}w_{k}\left[\Psi_{\alpha}(x,\mu_{k}) - \Psi_{\alpha}(x,-\mu_{k})\right] + Q_{\alpha}(x,-\mu_{i}), \quad (3.9)$$

para  $i, \ldots, N$  e  $\alpha = 1, \ldots, M$ ..

O ordenamento das direções e a divisão do domínio heterogêneo em camadas homogêneas podem ser melhor compreendidos através da Figura 3.1.



Figura 3.1: Divisão do domínio em camadas.

# 3.1 Solução Homogênea

Seguindo a formulação usual do Método ADO (Barichello and Siewert, 1999), propõe-se que a solução homogênea do sistema descrito pelas Eqs. (3.8) e (3.9) seja da forma

$$\Psi_{\alpha}(x,\pm\mu_i) = \Phi_{\alpha}(\nu_{\alpha},\pm\mu_i)e^{-x/\nu_{\alpha}}, \qquad (3.10)$$

onde  $\Phi$  representa a autofunção que posteriormente integrara o problema de autovalores e  $\nu$  é um parâmetro utilizado na separação de variáveis, chamado de constante de separação.

e

Dessa forma, o sistema de EDO's é transformado em um sistema algébrico

$$-\frac{\mu_{i}}{\nu_{\alpha}}\Phi_{\alpha}(\nu_{\alpha},\mu_{i}) + \Phi_{\alpha}(\nu_{\alpha},\mu_{i}) = \frac{\sigma_{s0,\alpha}}{2}\sum_{k=1}^{N}w_{k}\left[\Phi_{\alpha}(\nu_{\alpha},\mu_{k}) + \Phi_{\alpha}(\nu_{\alpha},-\mu_{k})\right] + \frac{3}{2}\mu_{i}\sigma_{s1,\alpha}\sum_{k=1}^{N}\mu_{k}w_{k}\left[\Phi_{\alpha}(\nu_{\alpha},\mu_{k}) - \Psi_{\alpha}(\nu_{\alpha},-\mu_{k})\right]$$
(3.11)

e

$$\frac{\mu_{i}}{\nu_{\alpha}}\Phi_{\alpha}(\nu_{\alpha},-\mu_{i}) + \Phi_{\alpha}(\nu_{\alpha},-\mu_{i}) = \frac{\sigma_{s0,\alpha}}{2}\sum_{k=1}^{N}w_{k}\left[\Phi_{\alpha}(\nu_{\alpha},\mu_{k}) + \Phi_{\alpha}(\nu_{\alpha},-\mu_{k})\right] - \frac{3}{2}\mu_{i}\sigma_{s1,\alpha}\sum_{k=1}^{N}\mu_{k}w_{k}\left[\Phi_{\alpha}(\nu_{\alpha},\mu_{k}) - \Psi_{\alpha}(\nu_{\alpha},-\mu_{k})\right], \quad (3.12)$$

para  $i,\ldots,N$  e  $\alpha=1,..,M.$ 

Ainda de acordo com a metodologia, define-se as funções auxiliares

$$U_{\alpha}(\nu_{\alpha},\mu_{i}) = \Phi_{\alpha}(\nu_{\alpha},\mu_{i}) + \Phi_{\alpha}(\nu_{\alpha},-\mu_{i}), \qquad (3.13)$$

$$V_{\alpha}(\nu_{\alpha},\mu_{i}) = \Phi_{\alpha}(\nu_{\alpha},\mu_{i}) - \Phi_{\alpha}(\nu_{\alpha},-\mu_{i}), \qquad (3.14)$$

afim de que, quando somadas as Eqs. (3.11) e (3.12), obtenha-se

$$V_{\alpha}(\nu_{\alpha},\mu_{i}) = \frac{\nu_{\alpha}}{\mu_{i}} [\sigma_{t,\alpha}U_{\alpha}(\nu_{\alpha},\mu_{i}) - \sigma_{s0,\alpha}\sum_{k=1}^{N} w_{k}U_{\alpha}(\nu_{\alpha},\mu_{k}), \qquad (3.15)$$

para i = 1, ..., N e  $\alpha = 1, ..., M$ .

De forma equivalente, subtraindo a Eq. (3.12) da Eq. (3.11), chega-se em

$$-\frac{\mu_i}{\nu_\alpha}U_\alpha(\nu_\alpha,\mu_i) + \sigma_{t,\alpha}V_\alpha(\nu_\alpha,\mu_i) = 3\sigma_{s1,\alpha}\mu_i\sum_{k=1}^N\mu_k w_k V(\nu_\alpha,\mu_k), \qquad (3.16)$$

para i = 1, ..., N e  $\alpha = 1, ..., M$ .

As Eqs. (3.15) e (3.16) representam duas relações entre  $U_{\alpha}(\nu_{\alpha}, \mu_{i})$  e  $V_{\alpha}(\nu_{\alpha}, \mu_{i})$  que serão utilizadas para a construção do problema de autovalores. Sendo assim, isolando

 $V_{\alpha}(\nu_{\alpha},\mu_{i})$  na Eq. (3.15) e substituindo na Eq. (3.16) obtém-se

$$\frac{1}{\nu_{\alpha}^{2}}U_{\alpha}(\nu_{\alpha},\mu_{i}) = \frac{\sigma_{t,\alpha}^{2}}{\mu_{i}^{2}}U_{\alpha}(\nu_{\alpha},\mu_{i}) - \sum_{k=1}^{N}w_{k}\left[\frac{\sigma_{t,\alpha}\sigma_{s0,\alpha}}{\mu_{i}^{2}} + 3\sigma_{t,\alpha}\sigma_{s1,\alpha} - 3\sigma_{s0,\alpha}\sigma_{s1,\alpha}(\sum_{j=1}^{N}w_{j})\right]U(\nu_{\alpha},\mu_{k}) \quad (3.17)$$

que, matricialmente também pode ser representada pelo problema de autovalores dado por

$$[D_{\alpha} - A_{\alpha}]\boldsymbol{U}_{\alpha} = \lambda_{\alpha}\boldsymbol{U}_{\alpha}, \qquad (3.18)$$

onde

$$\lambda_{\alpha} = \frac{1}{\nu_{\alpha}^2},\tag{3.19}$$

e as matrizes de dimensão  $N \times N$  tem a forma

$$D_{\alpha} = diag \left\{ \frac{\sigma_{t,\alpha}^2}{\mu_1^2}, \dots, \frac{\sigma_{t,\alpha}^2}{\mu_N^2} \right\}$$
(3.20)

e

$$A_{\alpha}(i,k) = w_k \left[ \frac{\sigma_{t,\alpha}\sigma_{s0,\alpha}}{\mu_i^2} + 3\sigma_{t,\alpha}\sigma_{s1,\alpha} - 3\sigma_{s0,\alpha}\sigma_{s1,\alpha}(\sum_{j=1}^N w_j) \right],$$
(3.21)

para  $i,j,k=1,\ldots,N$ e $\alpha=1,..,M.$ 

Resolvido o problema de autovalores, as constantes de separação são obtidas por meio da Eq. (3.19) e, com base nas Eqs. (3.13) e (3.14), calcula-se as autofunções

$$\Phi_{\alpha}(\nu_{j,\alpha},\mu_{i}) = \frac{1}{2} \left[ U_{\alpha}(\nu_{j,\alpha},\mu_{i}) + V_{\alpha}(\nu_{j,\alpha},\mu_{i}) \right], \qquad (3.22)$$

$$\Phi_{\alpha}(\nu_{j,\alpha}, -\mu_i) = \frac{1}{2} \left[ U_{\alpha}(\nu_{j,\alpha}, \mu_i) - V_{\alpha}(\nu_{j,\alpha}, \mu_i) \right],$$
(3.23)

para i, j = 1, ..., N e  $\alpha = 1, ..., M$ .

Importante salientar que, em um problema de autovalores como o descrito pela Eq. (3.18), as constantes de separação ocorrem aos pares  $\{\pm \nu_{j,\alpha}\}$  e todos os valores são reais.

Além disso, para que a solução homogênea seja constituída por uma base linearmente independente de autofunções  $\Phi_{\alpha}$  de dimensão N, configura-se a simetria

$$\Phi_{\alpha}(\nu_{j,\alpha},\mu_i) = \Phi_{\alpha}(-\nu_{j,\alpha},-\mu_i), \qquad (3.24)$$

$$\Phi_{\alpha}(\nu_{j,\alpha}, -\mu_i) = \Phi_{\alpha}(-\nu_{j,\alpha}, \mu_i), \qquad (3.25)$$

para  $i, j = 1, ..., N, \alpha = 1, ..., M$ ., de forma que a solução homogênea para o problema de transporte definido pela Eqs. (3.8) e (3.9) será

$$\Psi^{h}_{\alpha}(x,\mu_{i}) = \sum_{j=1}^{N} A_{j,\alpha} \Phi_{\alpha}(\nu_{j,\alpha},\mu_{i}) e^{(x-x_{\alpha-1})/\nu_{j,\alpha}} + A_{j+N,\alpha} \Phi_{\alpha}(-\nu_{j,\alpha},\mu_{i}) e^{-(x_{\alpha}-x)/\nu_{j,\alpha}}, \quad (3.26)$$

$$\Psi^{h}_{\alpha}(x,-\mu_{i}) = \sum_{j=1}^{N} A_{j,\alpha} \Phi_{\alpha}(\nu_{j,\alpha},-\mu_{i}) e^{(x-x_{\alpha-1})/\nu_{j,\alpha}} + A_{j+N,\alpha} \Phi_{\alpha}(-\nu_{j,\alpha},-\mu_{i}) e^{-(x_{\alpha}-x)/\nu_{j,\alpha}}, \quad (3.27)$$

para i = 1, ..., N,  $\alpha = 1, ..., M$ .

# 3.2 Solução Particular

Como o problema formulado pela Eqs. (3.8) e (3.9) contém um termo não homogêneo de fonte, soluções particulares precisam ser definidas. Para o tipo de fonte que será utilizada neste trabalho, uma solução particular simples pode ser considerada para cada camada  $\alpha$  e cada direção em termos de constantes. Assim, para i = 1, ...N e  $\alpha = 1, ...M$ ,

$$\Psi^p_\alpha(x,\mu_i) = B_{i,\alpha},\tag{3.28}$$

e

$$\Psi^p_\alpha(x,-\mu_i) = C_{i,\alpha},\tag{3.29}$$

são construídas de modo que substituindo-as nas Eqs. (3.6) e (3.7), um sistema linear acoplado  $N \times N$  é obtido conforme

$$[P_{\alpha} - R_{\alpha}]\boldsymbol{O}_{\alpha} = \boldsymbol{S}_{\alpha}, \qquad (3.30)$$

onde

$$P_{\alpha} = diag[\sigma_{t,\alpha}, ..., \sigma_{t,\alpha}], \qquad (3.31)$$

$$R_{\alpha} = \begin{bmatrix} \left[ \frac{\sigma_{s0,\alpha}}{2} w_{k} + \frac{3}{2} \sigma_{s1,\alpha} \mu_{i} \mu_{k} w_{k} \right] & \left[ \frac{\sigma_{s0,\alpha}}{2} w_{k} - \frac{3}{2} \sigma_{s1,\alpha} \mu_{i} \mu_{k} w_{k} \right] \\ \left[ \frac{\sigma_{s0,\alpha}}{2} w_{k} - \frac{3}{2} \sigma_{s1,\alpha} \mu_{i} \mu_{k} w_{k} \right] & \left[ \frac{\sigma_{s0,\alpha}}{2} w_{k} + \frac{3}{2} \sigma_{s1,\alpha} \mu_{i} \mu_{k} w_{k} \right] \end{bmatrix},$$
(3.32)

$$\boldsymbol{O}_{\alpha} = \begin{bmatrix} B_{i,\alpha} \\ C_{i,\alpha} \end{bmatrix}, \qquad (3.33)$$

e

$$\boldsymbol{S}_{\alpha} = \begin{bmatrix} [Q_{\alpha}(x,\mu_i)] \\ [Q_{\alpha}(x,-\mu_i)] \end{bmatrix}, \qquad (3.34)$$

parai,k=1,..,Ne $\alpha=1,..,M.$ 

Uma vez resolvido este sistema linear e obtidas as soluções particulares, as soluções gerais podem ser expressas por

$$\Psi_{\alpha}(x,\pm\mu_i) = \Psi^h_{\alpha}(x,\pm\mu_i) + \Psi^p_{\alpha}(x,\pm\mu_i)$$
(3.35)

para i = 1, ..., N e  $\alpha = 1, ..., M$ .

### 3.3 Sistema de acoplamento

Para estabelecer a solução geral do problema descrito pela Eqs. (3.8) e (3.9) de forma completa, as expressões para os fluxos angulares são submetidas às condições de contorno. Para a classe de problemas estudados aqui, escolheu-se condições de contorno do tipo

$$\Psi_1(x_0, \mu_i) = F, \tag{3.36}$$

$$\Psi_M(x_M, -\mu_i) = G, \tag{3.37}$$

para i = 1, ..., N, onde F e G correspondem respectivamente as condições à esquerda e à direita do domínio.

Importante observar que os fluxos angulares são conhecidos apenas nas direções incidentes ao dominio, e não há qualquer informação quanto aos fluxos angulares emergentes.

Nos casos onde são impostas condições de contorno reflexivas para os fluxos incidentes nas extremidades do domínio, essas condições de espelhamento são dadas por

$$\Psi_1(x_0,\mu_i) = \Psi_1(x_0,-\mu_i), \tag{3.38}$$

$$\Psi_M(x_M, -\mu_i) = \Psi_M(x_M, \mu_i),$$
(3.39)

para i = 1, ..., N.

Ainda, para assegurar a uniformidade dos fluxos entre regiões vizinhas, a condição de interface é dada por

$$\Psi_{\alpha}(x_{\alpha}, \pm \mu_i) = \Psi_{\alpha+1}(x_{\alpha}, \pm \mu_i) \tag{3.40}$$

para i = 1, ..., N e para  $\alpha = 1, ..., M - 1$ .

Essas equações levam a um sistema  $2MN \times 2MN$  cuja solução prove os valores para todos os coeficientes  $A_{i,\alpha}$  e, consequentemente, torna a Eq. (3.35) completamente

estabelecida. Desta maneira quantidades de grande importância podem enfim ser computadas.

# **3.4** Grandezas de interesse

O fluxo escalar para cada camada  $\alpha$  pode ser definido por

$$\phi_{\alpha}(x) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{1} [\Psi_{\alpha}(x,\mu) + \Psi_{\alpha}(x,-\mu)] d\mu, \qquad (3.41)$$

como sendo a média do fluxo angular em termos da variável direcional.

Assim, após a aproximação do termo integral por uma quadratura numérica, tem-se que o fluxo escalar pode ser dado por

$$\phi_{\alpha}(x) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^{N} w_k [\Psi_{\alpha}(x,\mu_k) + \Psi_{\alpha}(x,-\mu_k)].$$
(3.42)

O coeficiente de albedo, definido como a taxa entre o fluxo incidente na superfície em x = 0, pelo fluxo refletido nessa posição, tanto em domínios finitos como semiinfinitos é matematicamente expresso como

$$A^* = \frac{\int_{-1}^{1} \mu \psi(0, -\mu) d\mu}{\int_{-1}^{1} \mu \psi(0, \mu) d\mu}.$$
(3.43)

Contudo, sabe-se que

$$\frac{\int_{-1}^{1} \mu \psi(0,-\mu) d\mu}{\int_{-1}^{1} \mu \psi(0,\mu) d\mu} = \frac{2 \int_{0}^{1} \mu \psi(0,-\mu) d\mu}{2 \int_{0}^{1} \mu \psi(0,\mu) d\mu},$$
(3.44)

e pode-se aplicar a condição de contorno Eq. (3.36), que define  $\psi(0, \mu) = F$ , obtendo-se

1

$$A^* = \frac{\int_0^1 \mu \psi(0, -\mu) d\mu}{\int_0^1 \mu F d\mu}.$$
(3.45)

Resolvendo a integral no denominador, tem-se

$$A^* = \frac{\int_0^1 \mu \psi(0, -\mu) d\mu}{F/2}.$$
(3.46)

Com base no trabalho de Barichello (1992), o termo integral pode ser aproximado por uma quadratura numérica, de modo que se obtém a equação utilizada neste trabalho para o cálculo do albedo

$$A^* = \frac{2}{F} \sum_{k=1}^{N} \mu_k w_k \Psi(0, -\mu_k).$$
(3.47)

Segundo Damaso and Cabral (2000), o coeficiente de transmissão, ou transmitância, é definido como a fração da corrente de radiação incidente que é transmitida através do meio, atingindo ao extremo do domínio, e pode ser expresso matematicamente como

$$B^* = \frac{\int_{-1}^{1} \mu \psi(x_M, \mu) d\mu}{\int_{-1}^{1} \mu \psi(0, \mu) d\mu}.$$
(3.48)

No entanto, é possível considerar que

$$\frac{\int_{-1}^{1} \mu \psi(x_M, \mu) d\mu}{\int_{-1}^{1} \mu \psi(0, \mu) d\mu} = \frac{2 \int_{0}^{1} \mu \psi(x_M, \mu) d\mu}{2 \int_{0}^{1} \mu \psi(0, \mu) d\mu},$$
(3.49)

e através da condição de contorno  $\psi(0,\mu) = F$ , obtém-se

$$B^* = \frac{\int_0^1 \mu \psi(x_M, \mu) d\mu}{\int_0^1 \mu F d\mu},$$
(3.50)

$$B^* = \frac{\int_0^1 \mu \psi(x_M, \mu) d\mu}{F/2}.$$
(3.51)

Aproximando-se o termo integral por uma quadratura numérica, obtém-se então

$$B^* = \frac{2}{F} \sum_{k=1}^{N} \mu_k w_k \Psi(x_M, \mu_k), \qquad (3.52)$$

correspondendo a equação para o fator de transmissão utilizada neste trabalho.

Segundo Duderstadt and Hamilton (1976) e Stacey (2001), o fator de desvantagem, definido como a razão do fluxo no moderador pelo fluxo no combustível, e representa a desvantagem do núcleo com relação ao moderador na absorção de nêutrons. Em um problema com dois meios pode ser dado por

$$\zeta = \frac{\overline{\phi_2(x)}}{\overline{\phi_1(x)}} \tag{3.53}$$

onde  $\overline{\phi_1}(x)$  representa o fluxo escalar médio na região do combustível e  $\overline{\phi_2}(x)$  representa o fluxo escalar médio na região do moderador.

Conforme Maiorino and Siewert (1980), essa equação pode ser reescrita como

$$\zeta = \frac{a \int_{a}^{b} \phi_{2}(x) dx}{(b-a) \int_{0}^{a} \phi_{1}(x) dx}.$$
(3.54)

Assim, a Eq. (3.54), pode ser expressa em função do fluxo angular, de acordo com o método ADO, como

$$\zeta = \frac{a}{(b-a)} \frac{\int_{a}^{b} \sum_{k=1}^{N} w_{k} [\Psi_{2}(x,\mu_{k}) + \Psi_{2}(x,-\mu_{k})] dx}{\int_{0}^{a} \sum_{k=1}^{N} w_{k} [\Psi_{1}(x,\mu_{k}) + \Psi_{1}(x,-\mu_{k})] dx}$$
(3.55)

para k = 1, ..., N.

# **4 PROBLEMAS E RESULTADOS**

Este capítulo é dedicado à apresentação e discussão dos resultados obtidos neste trabalho. Para tanto, foram estruturadas seis seções, cada uma dedicada à um dos tipos de problemas estudados, com ordem crescente de complexidade.

A primeira seção, portanto, é destinada aos problemas mais simples, onde se calcula os perfis do fluxo escalar em problemas isotrópicos, em meio homogêneo sem fonte interna. Na segunda seção se realiza o cálculo do coeficiente de albedo e a taxa de transferência, considerando-se, ainda, apenas espalhamento isotrópico em um meio homogêneo. Na terceira seção, considera-se os efeitos do espalhamento anisotrópico. Na quarta seção, o domínio é divido em camadas homogêneas, estudando-se, assim, problemas com espalhamento isotrópico e anisotrópico em meio heterogêneos sem fonte interna. Na quinta seção são acrescentados os efeitos de uma fonte interna constante, permitindo, deste modo, a simulação de problemas da blindagem radioativa. A última seção destinase ao cálculo do fator de desvantagem térmica, uma grandeza fundamental na análise de reatores nucleares.

# 4.1 Problemas isotrópicos em meio homogêneo sem fonte interna

Esta seção aborda problemas isotrópicos unidimensionais, sem fonte interna, em meios homogêneos e regime permanente. O enfoque é dado à análise da influência dos principais parâmetros do transporte de nêutrons, em especial à seção de choque de espalhamento isotrópico  $\sigma_{s0}$ . Estuda-se, também, a influência do comprimento do domínio e a concordância dos resultados mediante à alteração da quantidade de termos da quadratura numérica.

Uma pequena introdução à respeito da propriedade de isotropia é oferecida no principio. Depois, os problemas estudados são descritos, e, por fim, os resultados são apresentados conjuntamente com uma discussão sobre seus aspectos mais significativos e interessantes.

#### 4.1.1 Introdução sobre o conceito de isotropia

Do grego *iso* (igual) e *tropo* (caminho), isotropia é a característica dos sistemas em que as propriedades não variam em função do direcionamento. Seu conceito é fundamental para a compreensão de muitos aspectos da natureza.

A teoria do Big Bang pressupôs que o espaço é isotrópico, tanto como homogêneo; mais tarde, a teoria da inflação cósmica explicaria esses fenômenos. Contudo, somente quando tornou-se possível contemplar escalas superiores à trezentos milhões de anosluz, conhecidas em cosmologia como "fim da grandeza", a isotropia do cosmos pode ser verificada (Liddle, 2003; Roos, 2003).

Nas escalas das menores dimensões também averigua-se comportamentos isotrópicos. Na teoria cinética dos gases, por exemplo, o comportamento das moléculas é considerado isotrópico, uma vez que essas se movem em direções aleatórias, com igual probabilidade para cada uma dessas. (Jakobsen, 2014).

Devido à onipresença na natureza, a propriedade de isotropia possui bastante relevância à engenharia. Em eletromagnetismo, um meio eletricamente isotrópico é aquele em que as propriedades dielétricas não são dependentes da direção do campo aplicado, e condutores metálicos, que estão de acordo com a lei de Ohmn, são considerados isotrópicos (Hayt and Buck, 2013). Em dinâmica dos fluidos, na modelagem da turbulência, a isotropia do escoamento em pequenas escalas, inferiores à profundidade, é muito importante (Souza et al., 2011). Em termodinâmica, a análise de sistemas isotrópicos também tem relevância (Merk, 1959). Na ciência dos materiais, a isotropia implica em um comportamento mais previsível e em maior moldabilidade, e entre os materiais que possuem propriedades idênticas em todas direções, se incluem os metais e o vidro (Callister, 2007). Devido a importância de sistemas isotrópicos em tantas áreas, há grande interesse científico no estudo dessa característica, e no campo do transporte de nêutrons, a análise de casos isotrópicos é especialmente importante.

#### 4.1.2 Descrição dos problemas com espalhamento isotrópico em meio homogêneo sem fonte interna

Anulando-se o termo relativo ao espalhamento anisotrópico,  $\sigma_{s1,\alpha} = 0$  e o termo representante da fonte interna  $Q_{\alpha}(x,\mu) = 0$ , e considerando-se um número de camadas M = 1, nas Eqs. (3.8) e (3.9), se têm as equações de transporte em ordenadas discretas para um meio homogêneo, com espalhamento puramente isotrópico e sem fonte interna.

As condições de contorno utilizados nessa classe de problemas são as Eqs. (3.36) e (3.37)

$$\Psi(0,\mu_i) = F,$$
  
$$\Psi(a,-\mu_i) = G,$$

onde F e G correspondem, respectivamente, as condição de contorno à esquerda e à direita do domínio, para i = 1, ..., N, como pode ser visto na Figura 4.1.



Figura 4.1: Condições de contorno à esquerda e direita.

O estudo de casos e a análise dos resultados desta seção foram estruturados de acordo com a Tabela 4.1, e serão baseados nos perfis do fluxo escalar de nêutrons.

Problema	$\sigma_t$	$\sigma_{s0}$	F	G	$X_M$	N	М
1		0.97	2.00	2.00	50.00	Variável	
2		Variável	1	0	5	8	
3		Variável	1	1	5	8	
4a		Variável	1	1	5	8	
4b		0.8	10	-0.1	5	8	
5	1	0.5	1	0	5	Variável	1
6		0.5	1	1	5	Variável	
7		0.5	1	-1	5	Variável	
8		0.5	1	0	Variável	8	
9		0.5	1	1	Variável	8	
10		0.5	1	-1	Variável	8	

Tabela 4.1: Problemas-teste 1 até 10.

Os valores desta seção foram obtidos para os perfis do fluxo escalar de nêutrons.

# 4.1.3 Discussão dos resultados: problemas isotrópicos em meio homogêneo sem fonte interna

Esta seção foi subdivida em 4 partes: comparação com a literatura; análise da seção de choque isotrópica; análise da influência da quantidade de termos na quadratura numérica; e análise da influência do comprimento do domínio.

#### 4.1.3.1 Comparação com a literatura: problemas isotrópicos.

Os dados para o Problema 1 são apresentados na Tabela 4.2.

Tabela 4.2: Dados do Problema 1.							
Problema	$\sigma_t$	$\sigma_{s0}$	F	G	$X_M$	Ν	М
1	1.00	0.97	2.00	2.00	50.00	Variável	1

Os resultados para este problema em comparação com os obtidos no trabalho de Nunes and Barros (2009), são apresentados na Tabela 4.3.

**Tabela 4.3:** Problema 1: Comparação entre diferentes métodos usando o esquema  $S_8$  de quadratura.

Х	0.00	25.00	50.00
DD (Nunes and Barros, 2009)	1.704731	0.001956	1.704731
Degrau (Nunes and Barros, 2009)	1.703435	0.002012	1.703435
Degrau Característico (Nunes and Barros, 2009)	1.704683	0.001958	1.704683
ADO	1.704731	0.001954	1.704731

O Problema 1 foi resolvido por Nunes and Barros (2009) com três métodos numéricos: Método de diferença diamante (DD), método Degrau e método Degrau Característico. Todos esses métodos trabalham com a subdivisão do domínio em células, onde são estabelecidos os fluxos angulares médios. As relações entre células vizinhas são feitas, e então processos iterativos são aplicados para a realização dos cálculos.

Em contrapartida, o método ADO, conforme aplicado neste trabalho, não se utiliza de métodos iterativos ou processo de interpolação, e, em meios homogêneos, não realiza a subdivisão do domínio em células. Além disso, as expressões das soluções são analíticas em termos da variável espacial, o que simplifica o processo de obtenção dos fluxos escalares em qualquer posição de interesse.

Em decorrência desses fatores, os resultados para o método ADO estão mais próximos daqueles obtidos pelo método método DD (com quase cinco dígitos significativos de concordância, como pode ser observado na Tabela 4.3), que se caracteriza como um método de malha fina.

Os resultados da análise de precisão dos resultados obtidos para o método ADO, mediante o aumento da quantidade de termos utilizados na quadratura numérica (N), são apresentada na Tabela 4.4.

х	$S_2$	$S_4$	$S_6$	$S_8$
0.00	1.704731	1.704731	1.704731	1.704731
5.00	0.366976	0.366806	0.366807	0.366807
10.00	0.083274	0.083341	0.083341	0.083341
15.00	0.018941	0.018983	0.018983	0.018983
20.00	0.004507	0.004523	0.004523	0.004523
25.00	0.001945	0.001954	0.001954	0.001954
30.00	0.004507	0.004523	0.004523	0.004523
35.00	0.018941	0.018983	0.018983	0.018983
40.00	0.083274	0.083341	0.083341	0.083341
45.00	0.366976	0.366806	0.366807	0.366807
50.00	1.704731	1.704731	1.704731	1.704731

 Tabela 4.4:
 Problema 1: Análise de precisão do fluxo escalar computados pelo método ADO utilizado neste trabalho.

A análise de precisão revela três à cinco dígitos significativos de concordância entre as soluções para este caso. Observa-se que a simetria dos resultados concorda com os parâmetros propostos, e, consequentemente com o fenômeno físico estudado. Essas análises permitem concluir que a formulação e o código computacionais utilizados neste trabalho são eficazes e capazes de fornecer resultados precisos, conforme atesta-se por essa validação com os métodos estudados por Nunes and Barros (2009).

# 4.1.3.2 Análise da influência da seção de choque de espalhamento isotrópica: problemas isotrópicos

Os problemas apresentados na Tabela 4.5 foram construídos para possibilitar uma análise do impacto da seção de choque de espalhamento isotrópica no comportamento dos perfis do fluxo escalar.
Tabela 4.5:	Dados	dos	Problemas	2.	3.	4a	e 4b.
	2 4400		11001011140	-,	~,		•

Problema	$\sigma_t$	$\sigma_{s0}$	$\sigma_{s1}$	F	G	$X_M$	Ν	М
2	1	Variável	0.00	1	0	5	8	1
3	1	Variável	0.00	1	1	5	8	1
4a	1	Variável	0.00	1	-1	5	8	1
4b	1	0.8	0.00	10	-0.1	5	8	1

Os resultados do Problema 2 são vistos na Tabela 4.6 e a Figura 4.2 representa graficamente estes resultados para o fluxo escalar de nêutrons.

x	$\sigma_{s0}=0.1$	$\sigma_{s0}=0.3$	$\sigma_{s0}=0.5$	$\sigma_{s0}=0.8$	$\sigma_{s0}=0.99$
0.00	0.51317	0.54447	0.58579	0.69091	0.88448
0.50	0.17716	0.21260	0.26453	0.41991	0.76684
1.00	0.82961(-1)	0.10673	0.14515	0.28227	0.67379
1.50	0.41767(-1)	0.56767(-1)	0.83118(-1)	0.19333	0.58844
2.00	0.21848(-1)	0.31111(-1)	0.48616(-1)	0.13341	0.50833
2.50	0.11708(-1)	0.17370(-1)	0.28796(-1)	0.92289(-1)	0.43232
3.00	0.63814(-2)	0.98211(-2)	0.17191(-1)	0.63723(-1)	0.35960
3.50	0.35219(-2)	0.56012(-2)	0.10303(-1)	0.43639(-1)	0.28944
4.00	0.19615(-2)	0.32081(-2)	0.61593(-2)	0.29255(-1)	0.22098
4.50	0.10975(-2)	0.18267(-2)	0.36083(-2)	0.18541(-1)	0.15269
5.00	0.60298(-3)	0.96607(-3)	0.18431(-2)	0.91293(-2)	0.74681(-1)

 Tabela 4.6:
 Resultados do Problema 2: análise do espalhamento isotrópico.



Figura 4.2: Resultados do Problema 2: análise do espalhamento isotrópico.

Quanto à física do problema, pode-se observar na Figura 4.2 que os perfis do fluxo escalar sofrem um decaimento exponencial ao longo do domínio analisado. Este comportamento é esperado de acordo com as condições de contorno utilizadas (F = 1, G = 0) e pelo formato da solução homogênea, uma vez que a fonte externa unitária encontra-se em x = 0 e não há fluxo de entrada em x = 5.00. Desta maneira, os nêutrons incidentes são dissipados conforme avançam no domínio do problema. Neste sentido, pode ser realizada uma analogia com a difusão do calor ao longo de uma superfície, assim como o fluxo de outras grandezas físicas. Neste sentido, deve-se notar que à esquerda do domínio (na região entre  $4.00 \le x \le 5.00$ ), o fluxo é significativamente pequeno, alcançando valores muito próximos à zero.

Em relação ao influência da seção de choque de espalhamento isotrópico no comportamento dos perfis do fluxo escalar, nota-se que conforme há aumento nessa seção, há crescimento nos perfis do fluxo escalar. Este comportamento também era esperado. A seção de choque total corresponde a diferença entre as seções de choque de espalhamento e as seções de choque de absorção (no caso estudado, de acordo com a expressão:  $\sigma_t = \sigma_{s0} - \sigma_a$ ). Com efeito, quanto maior é a seção de choque de espalhamento, menor é a seção de choque de absorção, o que significa que menos nêutrons serão absorvidos ao longo do domínio do problema. Mantendo-se à analogia com a termodinâmica, essa propriedade poderia ser comparada com o coeficiente de difusividade térmica. Conclui-se, portanto, que a seção de choque de espalhamento isotrópica caracteriza a facilidade com que os nêutrons conseguem atravessar ao domínio.

Os resultados para o Problema 3 podem ser visualizados na Tabela 4.7, e dos resultados presentes nesta tabela, foi gerada a Figura 4.3.

x	$\sigma_{s0} = 0.1$	$\sigma_{s0} = 0.3$	$\sigma_{s0} = 0.5$	$\sigma_{s0} = 0.8$	$\sigma_{s0} = 0.99$
0.00	0.51377	0.54543	0.58763	0.70004	0.95916
0.50	0.17826	0.21443	0.26814	0.43845	0.91953
1.00	0.84923(-1)	0.10993	0.15131	0.31152	0.89478
1.50	0.45289(-1)	0.62368(-1)	0.93421(-1)	0.23697	0.87788
2.00	0.28229(-1)	0.40932(-1)	0.65807(-1)	0.19714	0.86793
2.50	0.23416(-1)	0.34739(-1)	0.57593(-1)	0.18458	0.86464
3.00	0.28229(-1)	0.40932(-1)	0.65807(-1)	0.19714	0.86793
3.50	0.45289(-1)	0.62368(-1)	0.93421(-1)	0.23697	0.87788
4.00	0.84923(-1)	0.10993	0.15131	31152	0.89478
4.50	0.17826	0.21443	0.26814	0.43845	0.91953
5.00	0.51377	0.54543	0.58763	0.70004	0.95916

Tabela 4.7: Resultados do Problema 3: análise do espalhamento isotrópico.



Figura 4.3: Resultados do Problema 3: análise do espalhamento isotrópico.

Neste problema observa-se que os perfis do fluxo escalar adquirem seus menores valores no centro do domínio (x = 2.50). Este acontecimento era previsível devido às condições de contorno estipuladas neste problema (F = 1.00, G = 1.00). Neste caso, fontes unitárias de nêutrons se encontram em x = 0.00 e x = 5.00. Portanto, o fluxo médio de nêutrons nas direções estudadas  $\mu_i$  e  $-\mu_i$ , decai de acordo com a distância as fontes, já que reações de absorção e perdas por colisões ocorrem enquanto os nêutrons trafegam. Explica-se, assim, o comportamento apresentado na Figura 4.3. Como as duas metades do domínio possuem propriedades iguais ( $0.00 \le x \le 2.50$  e  $2.50 \le x \le 5.00$ ), e as condições de contorno são iguais em ambas as extremidades do domínio, uma condição de simetria pode ser visualizada.

Com relação à influência do fator de isotropia, os resultados da Tabela 4.7 e da Figura 4.3, confirmam as conclusões prévias: há uma relação diretamente proporcional entre a seção de choque de espalhamento isotrópico e o fluxo escalar de nêutrons. Observa-se a Figura 4.3 que o perfil correspondente aos resultados para um fator de espalhamento isotrópico  $\sigma_{s0} = 0.99$  afasta-se dos demais. Percebe-se que a distância entre os perfis cresce conforme os valores do fator de isotropia aumentam. Isto indica que a influência do coeficiente de isotropia torna-se cada vez maior com a magnitude dessa propriedade. Para verificar essa hipótese, criou-se a Tabela 4.8, onde a variação dos perfis do fluxo escalar em relação à variação do fator de isotropia está dada em porcentagem; e a Tabela 4.9, onde as variações são dadas em valores absolutos.

 Tabela 4.8:
 Problema 3 - Crescimento em porcentagem dos perfis de fluxo escalar conforme a variação de

 $\sigma_{s0}$ .

	Variação de $\sigma_{s0}$						
х	de 0.1 para 0.3	de 0.3 para 0.5	de 0.5 para 0.8	de 0.8 para 0.99			
	(aumento de 66.66%)	(aumento de 40.00%)	(aumento de 37.50%)	(aumento de 19.19%)			
0.00	6.16	7.74	19.13	37.02			
0.50	20.29	25.05	63.52	109.72			
1.00	29.45	37.64	105.88	187.23			
1.50	37.71	49.79	153.66	270.46			
2.00	45.00	60.77	199.57	340.27			
2.50	48.36	65.79	220.49	368.44			
3.00	45.00	60.77	199.57	340.27			
3.50	37.71	49.79	153.66	270.46			
4.00	29.45	37.64	105.88	187.23			
4.50	20.29	25.05	63.52	109.72			
5.00	6.16	7.74	19.13	37.02			

	Variação de $\sigma_{s0}$							
х	de 0.1 para 0.3	de 0.3 para 0.5	de 0.5 para 0.8	de 0.8 para 0.99				
	(aumento de 0.2)	(aumento de 0.2)	(aumento de 0.3)	(aumento de 0.19)				
0.00	0.03	0.04	0.11	0.26				
0.50	0.04	0.05	0.17	0.48				
1.00	0.03	0.04	0.16	0.58				
1.50	0.02	0.03	0.14	0.64				
2.00	0.01	0.02	0.13	0.67				
2.50	0.01	0.02	0.13	0.68				
3.00	0.01	0.02	0.13	0.67				
3.50	0.02	0.03	0.14	0.64				
4.00	0.03	0.04	0.16	0.58				
4.50	0.04	0.05	0.17	0.48				
5.00	0.03	0.04	0.11	0.26				

**Tabela 4.9:** Problema 3 - Crescimento absoluto entre perfis do fluxo escalar conforme a variação de  $\sigma_{s0}$ .

Observa-se nas Tabelas 4.8 e 4.9 que o crescimento do fluxo escalar torna-se cada vez mais intenso do que o crescimento do fator de isotropia. Essa relação é tão acentuada que, ainda que a diferença na variação do coeficiente de isotropia diminua, o crescimento do fluxo escalar aumenta. Dessa maneira, conclui-se que o impacto do fator de isotropia cresce cada vez mais conforme o valor dessa propriedade aumenta. Portanto, quando o fator de isotropia é alto, pequenas variações em sua magnitude são capazes de causar grandes alterações no fluxo escalar de nêutrons. Por outro lado, se o fator de isotropia for muito pequeno, variações em sua magnitude podem não afetar significativamente o fluxo escalar de nêutrons.

Os resultados para o Problema 4a estão contidos na Tabela 4.10 e a Figura 4.4 foi construída à partir desses resultados.

x	$\sigma_{s0} = 0.1$	$\sigma_{s0} = 0.3$	$\sigma_{s0} = 0.5$	$\sigma_{s0}=0.8$	$\sigma_{s0}=0.99$
0.00	0.51256	0.54350	0.58394	0.68178	0.80980
0.50	0.17607	0.21077	0.26093	0.40137	0.61414
1.00	0.81000(-1)	0.10352	0.13899	0.25301	0.45281
1.50	0.38246(-1)	0.51166(-1)	0.72816(-1)	0.14969	0.29899
2.00	0.15466(-1)	0.21289(-1)	0.31425(-1)	0.69691(-1)	0.14872
2.50	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
3.00	-0.15466(-1)	-0.21289(-1)	-0.31425(-1)	-0.69691(-1)	-0.14872
3.50	-0.38246(-1)	-0.51166(-1)	-0.72816(-1)	-0.14969	-0.29899
4.00	-0.81000(-1)	-0.10352	-0.13899	-0.25301	-0.45281
4.50	-0.17607	-0.21077	-0.26093	-0.40137	-0.61414
5.00	-0.51256	-0.54350	-0.58394	-0.68178	-0.80980

Tabela 4.10: Resultados do Problema 4a: análise do espalhamento isotrópico.



Figura 4.4: Resultados do Problema 3: análise do espalhamento isotrópico.

Salienta-se que este problema trata de um caso puramente virtual, tendo fins exclusivamente teóricos. Na Tabela 4.10 e Figura 4.4, deve-se notar em primeira instância a ocorrência de valores negativos para o fluxo escalar de nêutrons; esta situação é impossível na realidade física, pois o fluxo escalar representa uma média em todas as direções da quantidade de nêutrons em dada posição. Isto ocorre devido as condições de contorno estipuladas (F = 1, G = -1); há uma fonte externa unitária de nêutrons em (x = 0) e uma fonte externa unitária negativa de nêutrons em x = 5.

Ambas fontes externas tem intensidade igual em módulo; com efeito, o fluxo escalar é zerado no centro do domínio, tornando-se negativo à partir deste ponto, e uma forma de simetria pode ser observada na Figura 4.4.

Para examinar se o comportamento do perfil do fluxo escalar de nêutrons se manteria com a variação da magnitude das condições de contorno, foram construídas a Tabela 4.11 e a Figura 4.5.

-	
x	$\sigma_{s0} = 0.8$
0.00	6.90817
0.50	4.19728
1.00	2.81973
1.50	1.92894
2.00	1.32776
2.50	0.913664
3.00	0.623887
3.50	0.417062
4.00	0.264328
4.50	0.143418
5.00	0.222022(-1)

 Tabela 4.11: Resultados do Problema 4b.



Figura 4.5: Resultados do Problema 4b.

Observa-se que quando a fonte positiva é suficientemente superior à fonte negativa, os perfis do fluxo escalar apresentam apenas valores positivos. Esta situação foi verificada com as seguintes condições de contorno F = 10 e G = -0.1. Neste caso, os perfis do fluxo escalar apresentaram comportamento semelhante ao do Problema 2, onde ambas as fontes externas são positivas.

Além disso, pode-se verificar que, nos Problemas 4a e 4b, a validade das conclusões à respeito da influência do fator de isotropia se mantém.

Análise da influência da quantidade de termos na quadratura numérica: 4.1.3.3 problemas isotrópicos

Os dados para os Problemas 5, 6 e 7 são dados na Tabela 4.12.

Problema	$\sigma_t$	$\sigma_{s0}$	$\sigma_{s1}$	F	G	$X_M$	Ν	М
5	1	0.5	0.00	1	0	5	Variável	1
6	1	0.5	0.00	1	1	5	Variável	1
7	1	0.5	0.00	1	-1	5	Variável	1

Tabela 4.12: Dados dos Problemas 5, 6 e 7.

Apresenta-se os resultados para o Problema 5 na Tabela 4.13 e uma representação gráfica destes resultados pode ser analisada através da Figura 4.6

x	N=2	N = 4	N = 6	N = 8
0.00	0.58579	0.58579	0.58579	0.58579
0.50	0.25802	0.26507	0.26452	0.26453
1.00	0.14237	0.14517	0.14515	0.14515
1.50	0.83523(-1)	0.83029(-1)	0.83126(-1)	0.83118(-1)
2.00	0.49684(-1)	0.48593(-1)	0.48615(-1)	0.48616(-1)
2.50	0.29636(-1)	0.28806(-1)	0.28795(-1)	0.28796(-1)
3.00	0.17676(-1)	0.17203(-1)	0.17191(-1)	0.17191(-1)
3.50	0.10522(-1)	0.10309(-1)	0.10303(-1)	0.10303(-1)
4.00	0.62239(-2)	0.61608(-2)	0.61595(-2)	0.61593(-2)
4.50	0.35979(-2)	0.36072(-2)	0.36083(-2)	0.36083(-2)
5.00	0.18043(-2)	0.18423(-2)	0.18431(-2)	0.18431(-2)

Tabela 4.13: Resultados do Problema 5: análise de precisão.



Figura 4.6: Resultados do Problema 5: análise de precisão.

Na Tabela 4.14 constam os resultados para a análise de precisão do Problema 5 e a Figura 4.7 é baseada nestes resultados.

x	N=2	N = 4	N = 6	N = 8
0.00	0.58759	0.58763	0.58763	0.58763
0.50	0.26162	0.26868	0.26813	0.26814
1.00	0.14859	0.15133	0.15131	0.15131
1.50	0.94045(-1)	0.93338(-1)	0.93429(-1)	0.93421(-1)
2.00	0.67360(-1)	0.65796(-1)	0.65806(-1)	0.65807(-1)
2.50	0.59273(-1)	0.57611(-1)	0.57590(-1)	0.57593(-1)
3.00	0.67360(-1)	0.65796(-1)	0.65806(-1)	0.65807(-1)
3.50	0.94045(-1)	0.93338(-1)	0.93429(-1)	0.93421(-1)
4.00	0.14859	0.15133	0.15131	0.15131
4.50	0.26162	0.26868	0.26813	0.26814
5.00	0.58759	0.58763	0.58763	0.58763

Tabela 4.14: Resultados do Problema 6: análise de precisão.



Figura 4.7: Resultados do Problema 6: análise de precisão.

A Tabela 4.15 apresenta os resultados para o Problema 7 e a Figura 4.8 ilustra esses valores.

x	N = 2	N = 4	N = 6	N = 8
0.00	0.58398	0.58394	0.58394	0.58394
0.50	0.25442	0.26146	0.26091	0.26093
1.00	0.13614	0.13901	0.13899	0.13899
1.50	0.73001(-1)	0.72721(-1)	0.72823(-1)	0.72816(-1)
2.00	0.32008(-1)	0.31391(-1)	0.31424(-1)	0.31425(-1)
2.50	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
3.00	-0.32008(-1)	-0.31391(-1)	-0.31424(-1)	-0.31425(-1)
3.50	-0.73001(-1)	-0.72721(-1)	-0.72823(-1)	-0.72816(-1)
4.00	-0.13614	-0.13901	-0.13899	-0.13899
4.50	-0.25442	-0.26146	-0.26091	-0.26093
5.00	-0.58398	-0.58394	-0.58394	-0.58394

Tabela 4.15: Resultados do Problema 7: análise de precisão.



Figura 4.8: Resultados do Problema 7: análise de precisão.

Nas Tabelas 4.13 à 4.15 e nas Figuras 4.6 à 4.8 pode-se observar uma tendencia de concordância dos resultados conforme cresce o valor de *N*. Isto é coerente, porque esse parâmetro corresponde à quantidade de termos utilizados na quadratura numérica, de modo que seu aumento implica em uma melhor representação do termo integral. Devese observar que os termos da quadratura, por sua vez, representam as direções discretas do problema de transporte. Pode-se também observar que a concordância dos resultados é maior nos extremos do domínio e nos pontos com menor amplitude do fluxo escalar. Nota-se que nos Problemas 6 e 7, os pontos no centro do domínio, onde o fluxo escalar é próximo de zero, apresentam grande concordância de resultados. Pode-se concluir que a magnitude do fluxo escalar de nêutrons dificulta a concordância.

#### 4.1.3.4 Análise da influência do comprimento do domínio: problemas isotrópicos.

Tabela 4.16:Dados dos Problemas 8, 9 e 10 .								
Problema	$\sigma_t$	$\sigma_{s0}$	$\sigma_{s1}$	F	G	$X_M$	Ν	М
8	1	0.5	0.00	1	0	Variável	8	1
9	1	0.5	0.00	1	1	Variável	8	1
10	1	0.5	0.00	1	-1	Variável	8	1

Os parâmetros utilizados nos Problemas 8, 9 e 10 estão contidos na Tabela 4.16.

As Figuras 4.9 à 4.11 apresentam os resultados obtidos para os Problemas 8, 9 e 10, respectivamente. Nas Figuras 4.9 à 4.11, utilizou-se a taxa de aspecto, que representa a porcentagem do domínio estudado, para analisar a dependência do fluxo escalar em relação tamanho do domínio para cada um dos problemas-teste.



Figura 4.9: Resultados do Problema 8: análise da dimensão do domínio.



Figura 4.10: Resultados do Problema 9: análise da dimensão do domínio.



Figura 4.11: Resultados do Problema 10: análise da dimensão do domínio.

O comportamento obtido está de acordo com o esperado. Nota-se que o fluxo escalar atinge valores baixos em porcentagens menores dos domínios maiores. Este fato é razoável, porque o decaimento do fluxo escalar está relacionado com a distância que os nêutrons percorrem. Quanto maior o caminho percorrido pelos nêutrons, mais desses são dispersos no trajeto.

Quanto ao tempo de processamento, verificou-se que as simulações consumiram frações de segundo em um computador com processador Intel I5 com 8GB de RAM.

# 4.2 Problemas de cálculos do coeficiente de albedo e da taxa de transmissão

Segundo Selph (Selph, 1968), o albedo, ou coeficiente de reflexão, é tradicionalmente caracterizado como a relação que existe entre a corrente de radiação refletida em uma superfície e a corrente incidente sobre esta superfície.

O termo provêm da palavra latina para branco: *albus*. O coeficiente de Albedo corresponde à um valor adimensional, expresso como porcentagem, e atinge seu valor máximo em reflexões perfeitas que ocorrem em superficies brancas, onde toda a radiação incidente é refletida. Em superfícies perfeitamente negras, em que nenhuma reflexão ocorre, tem seu valor mínimo.

O estudo desta quantidade é muito útil devido à sua aplicabilidade nas mais diversas áreas: em ecologia, esse estudo é importante graças aos efeitos da variação do albedo sobre diversos biomas, como a floresta amazônica (Oliveira et al., 2013); em climatologia, é relevante devido ao impacto que essa grandeza exerce nos diversos sistemas terrestres, como os oceanos (Smith et al., 2006); em astronomia, o estudo do albedo desempenha um importante papel quanto à determinação de parâmetros básicos dos corpos celestes (Mallama, 2007); em agronomia, o estudo dessa grandeza é de grande importância para o desenvolvimento de plantações (Beckmann et al., 2006); no projeto de cidades, especialmente quanto à pavimentação das vias, é relevante em consideração aos efeitos da intensidade solar sobre a saúde (Sen, 2015; Wang and Kaloush, 2015); em engenharia, uma das aplicações mais comuns do estudo dessa grandeza está no âmbito da geração de energia solar (Barron-Gafford et al., 2016).

Por fim, na física de reatores o estudo do albedo também possui muita relevância, visto, sobretudo, sua aplicabilidade na área de blindagem, uma vez que é a partir desta grandeza que se consegue estimar a fração de radiação nuclear incidente em um material e a fração que é refletida para fora do mesmo (Selph, 1968).

O fator de transmissão, em contrapartida, representa a razão entre o fluxo incidente em uma superfície pelo fluxo em uma extremidade oposta, na mesma direção. Existem diversas situações em que o cálculo dessa grandeza se faz necessário, como em certos tipos de tomografias (Hernández and Cruzate, 1996), e em alguns cenários no campo de geofísica nuclear (Schulz, 2014).

# 4.2.1 Formulação matemática e descrição dos problemas de cálculos do coeficiente de albedo e da taxa de transmissão

Nesta seção foram solucionados problemas de transporte unidimensionais, em meios homogêneos e não-multiplicativos, considerando-se dois tipos diferentes de domínio: meios semi-infinitos e finitos. Os parâmetros dos problemas resolvidos podem ser vistos na Tabela 4.17.

Problema	$\sigma_{t,\alpha}$	$\sigma_{s0}$	$\sigma_{s1,\alpha}$	F	G	$[X_0, X_M]$	N	М
11	1.00	Variável	0.00	1.00	0.00	$[0.00,\infty)$	Variável	1
12	1.00	Variável	0.00	1.00	0.00	[0.00, 5.00]	50	1

Tabela 4.17: Parâmetros dos problemas-teste 11 e 12.

Para domínios semi-infinitos, segundo Vilhena and Barichello (1991), a formulação matemática dos problemas em questão se dá conforme o equacionamento apresentado à seguir

As seguintes condições de contorno são aplicadas

$$\Psi(0,\mu) = F,\tag{4.1}$$

$$\lim_{x \to +\infty} \Psi(x, \pm \mu) = 0.$$
(4.2)

Primeiramente, observa-se que por não haver fonte interna, tem-se que

$$\Psi^p(x,\pm\mu) = 0,\tag{4.3}$$

fazendo com que a solução geral seja dada por

$$\Psi(x,\pm\mu) = \Psi^h(x,\pm\mu). \tag{4.4}$$

Para a determinação dos coeficientes  $A_j$  necessários para a obtenção da solução homogênea através do método ADO, deve-se aplicar as condições de albedo definidas pelas equações (4.1) e (4.2), nas expressões (3.26) e (3.27). Dessa forma, as seguintes operações são realizadas

$$0 = \lim_{x \to +\infty} \Psi(x, \mu_i) \tag{4.5}$$

$$= \lim_{x \to +\infty} \sum_{j=1}^{N} A_j \Phi(\nu_j, \mu_i) e^{-x/\nu_j} + A_{j+N} \Phi(-\nu_j, \mu_i) e^{x/\nu_j}$$
(4.6)

$$= \sum_{j=1}^{N} A_{j} \Phi(\nu_{j}, \mu_{i}) \lim_{x \to +\infty} e^{-x/\nu_{j}} + A_{j+N} \Phi(-\nu_{j}, \mu_{i}) \lim_{x \to +\infty} e^{x/\nu_{j}} + \infty$$
(4.7)

e, analogamente

$$0 = \lim_{x \to +\infty} \Psi(x, -\mu_i)$$
(4.8)

$$= \lim_{x \to +\infty} \sum_{j=1}^{N} A_j \Phi(\nu_j, -\mu_i) e^{-x/\nu_j} + A_{j+N} \Phi(-\nu_j, -\mu_i) e^{x/\nu_j}$$
(4.9)

$$= \sum_{j=1}^{N} A_{j} \Phi(\nu_{j}, -\mu_{i}) \lim_{x \to +\infty} e^{-x/\nu_{j}} + A_{j+N} \Phi(-\nu_{j}, -\mu_{i}) \lim_{x \to +\infty} e^{x/\nu_{j}} + \infty$$
(4.10)

Portanto, considerando-se que os fluxos angulares  $\Phi(-\nu_j, \pm \mu_i)$  não serão nulos, pode-se concluir que estas expressões só serão verdadeiras se

$$A_{j+N} = 0. (4.11)$$

À partir da primeira condição de contorno, Eq. (4.1), obtêm-se o seguinte sistema

$$\sum_{j=1}^{N} A_j \Phi(\nu_j, \mu_i) = F,$$
(4.12)

que pode ser expresso matricialmente por

$$\left[ \Phi(\nu_j, \mu_i) \right] \times \left[ A_j \right] = \left[ F \right], \qquad (4.13)$$

para  $i, j = 1, \ldots, N$ , cuja solução pode ser obtida facilmente.

Deste modo, os valores dos coeficientes  $A_j$  podem ser obtidos e a solução para problemas em domínio semi-infinitos está completamente estabelecida. Consequentemente, os fluxos angulares de nêutrons podem ser obtidos conforme as expressões

$$\Psi(x,\mu_i) = \sum_{j=1}^{N} A_j \Phi(\nu_j,\mu_i) e^{-x/\nu_j},$$
(4.14)

$$\Psi(x, -\mu_i) = \sum_{j=1}^N A_j \Phi(\nu_j, -\mu_i) e^{-x/\nu_j}.$$
(4.15)

Para os problemas com domínio finitos, (Problema 12), as condições de contorno são definidas por

$$\Psi(0,\mu) = F,\tag{4.16}$$

$$\Psi(x,-\mu) = G. \tag{4.17}$$

Para esse tipo de domínio (finito), a formulação matemática já apresentada no capítulo 3 é suficiente para definir os fluxos angulares.

Com base no trabalho de Barichello (1992), o coeficiente de albedo, definido como a taxa entre o fluxo incidente na superfície em x = 0, pelo fluxo refletido nessa posição, tanto em domínios finitos como semi-infinitos, pode ser matematicamente expresso em ordenadas discretas de acordo com a Eq. (4.18), definida no capítulo 3 como

$$A^* = \frac{2\sum_{k=1}^N \mu_k w_k \Psi(0, -\mu_k)}{F},$$
(4.18)

Deste modo, de acordo com os parâmetros propostos para os problemas solucionados nesta seção (F = 1), a expressão utilizada neste trabalho para determinação dos coeficientes de albedo pode ser finalmente apresentada como

$$A^* = 2\sum_{k=1}^{N} \mu_k w_k \Psi(0, -\mu_k)$$
(4.19)

O fator de transmissão, que é definido como a razão entre o fluxo incidente em uma extremidade (x = 0) pelo fluxo que é transmitido através do domínio, atingindo ao outro extremo ( $x = x_M$ ), pode ser expresso em ordenadas discretas pela Eq. (4.20), dada no capítulo 3 como

$$B^* = \frac{2\sum_{k=1}^{N} \mu_k w_k \Psi(x_M, \mu_k)}{F},$$
(4.20)

Assim, considerando-se que para os problemas solucionados nesta seção F = 1, têm-se que

$$B^* = 2\sum_{k=1}^{N} \mu_k w_k \Psi(x_M, \mu_k)$$
(4.21)

para k = 1, ...N.

## 4.2.2 Discussão dos resultados dos problemas de cálculos do coeficiente de albedo e da taxa de transmissão

Os resultados obtidos para o coeficiente de albedo sob diferentes coeficientes de espalhamento são apresentados na Tabela 4.18, e comparados com aqueles fornecidos por Barichello (1992) para o método  $LTS_N$  e a solução exata.

**Tabela 4.18:** Problema 11: comparação numérica para o coeficiente de albedo obtido pelos métodos ADO e  $LTS_N$  com a solução exata.

		(Bariche	lo, 1992)	(Este trabalho)			
$\sigma_{s0}$	Exata	$LTS_2$	$LTS_4$	$LTS_8$	$ADO_2$	$ADO_4$	$ADO_8$
0.1	0.02170	0.02633	0.02481	0.02267	0.22061(-1)	0.21707(-1)	0.21698(-1)
0.2	0.04626	0.05573	0.05266	0.04825	0.46960(-1)	0.46282(-1)	0.46265(-1)
0.3	0.07445	0.08893	0.08431	0.07747	0.75438(-1)	0.74474(-1)	0.74452(-1)
0.4	0.1073	0.1270	0.1209	0.1114	0.10856	0.10736	0.10734
0.5	0.1465	0.1715	0.1640	0.1518	0.14794	0.14657	0.14654
0.6	0.1947	0.2251	0.2163	0.2011	0.19619	0.19474	0.19472
0.7	0.2566	0.2922	0.2827	0.2641	0.25799	0.25658	0.25656
0.8	0.3419	0.3820	0.3729	0.3508	0.34309	0.34188	0.34187
0.9	0.4780	0.5195	0.5144	0.4882	0.47879	0.47803	0.47802

Observa-se nos resultados da Tabela 4.18 que os valores obtidos para o albedo segundo a formulação utilizada neste trabalho coincidem com aqueles obtidos por meio do método  $LTS_N$  e, assim como esses, se aproximam dos valores obtidos pela formulação Exata, conforme o valor de N aumenta. O que indica, portanto, que o método ADO trabalhado aqui (formulação e código computacional) está fornecendo resultados consistentes com o problema proposto.

Quanto ao comportamento físico, deve-se salientar que o aumento de  $\sigma_{s0}$  leva à maiores coeficientes de albedo, significando que uma maior porcentagem da radiação incidente é refletida.

Este comportamento é coerente com a física do problema, porque conforme maior é a seção de choque de espalhamento isotrópico, maior é o fluxo escalar porque menos nêutrons são dissipados pela superfície. Desta forma, uma porcentagem maior do fluxo de nêutrons é refletida.

Os resultados o Problema 12 dados na Tabela 4.19 foram obtidos pelo método ADO de acordo com a formulação de Schulz (2014) para o coeficiente de albedo. Já os resultados obtidos neste trabalho são fornecidos na Tabela 4.20.

 Tabela 4.19: Problema 12: Resultados para o coeficiente de albedo através método ADO pela formulação de Schulz (2014).

	$\sigma_{s0}=0.20$	$\sigma_{s0} = 0.50$	$\sigma_{s0} = 0.80$	$\sigma_{s0} = 0.99$
0.04	0.00685248	-	-	-
0.05	-	0.0214311	-	-
0.07	-	-	0.0477637	-
0.10	0.0146016	0.0384327	0.0649256	0.0832930
0.33	0.0312185	-	-	-
0.37	-	0.0932575	-	-
0.45	-	-	0.193806	-
0.49	-	-	-	0.266835
0.50	0.0371530	0.107676	0.205616	0.290663
1.00	0.0439345	0.134165	0.280152	0.435962
2.00	0.0460724	0.145085	0.327950	0.588000
5.00	0.0462647	0.146541	0.341680	0.737507

	$\sigma_{s0} = 0.20$	$\sigma_{s0} = 0.50$	$\sigma_{s0} = 0.80$	$\sigma_{s0} = 0.99$
0.04	0.68525(-2)	0.17576(-1)	0.28871(-1)	0.36342(-1)
0.05	0.83150(-2)	0.21431(-1)	0.35386(-1)	0.44695(-1)
0.07	0.11017(-1)	0.28651(-1)	0.47764(-1)	0.60721(-1)
0.10	0.14602(-1)	0.38433(-1)	0.64926(-1)	0.83293(-1)
0.33	0.31219(-1)	0.87683(-1)	0.16025	0.21810
0.37	0.32929(-1)	0.93258(-1)	0.17235	0.23674
0.45	0.35735(-1)	0.10272	0.19381	0.27102
0.49	0.36887(-1)	0.10674	0.20334	0.28683
0.50	0.37153(-1)	0.10768	0.20562	0.29066
1.00	0.43934(-1)	0.13417	0.28015	0.43596
2.00	0.46072(-1)	0.14509	0.32795	0.58800
5.00	0.46265(-1)	0.14654	0.34168	0.73751

 

 Tabela 4.20: Problema 12: Resultados para o coeficiente de albedo através do método ADO pela formulação deste trabalho.

Nas Tabelas 4.19 e 4.20, pode ser observada uma concordância, entre os resultados de Schulz (2014) e os obtidos neste trabalho, que varia entre dois a quatro dígitos significativos, dependendo do comprimento do domínio e do coeficiente de espalhamento isotrópico.

A Figura 4.12 ilustra os resultados obtidos com a formulação desenvolvida neste trabalho para o coeficiente de albedo.



Figura 4.12: Resultados do Problema 12: comportamento do coeficiente de albedo.

Por meio da Figura 4.12 pode-se observar o comportamento do coeficiente de albedo em relação ao tamanho do domínio  $[0, 00, X_M]$  e o coeficiente de espalhamento isotrópico.

A análise da Figura 4.12 confirma a conclusão de que o coeficiente de albedo cresce proporcionalmente ao acréscimo no coeficiente de espalhamento isotrópico.

Com relação à influência do comprimento do domínio, se observa os seguintes comportamentos: (i) o valor do coeficiente de albedo é maior em domínios maiores, (ii) para um mesmo coeficiente de espalhamento, existe uma tendência à estabilização dos valores do albedo à partir de certos comprimentos do domínio, quando a influência desta grandeza torna-se insignificante e (iii) coeficientes de espalhamentos maiores são mais afetados pelo comprimento do domínio, de modo que a estabilização do albedo ocorre à partir de comprimentos maiores. Os resultados para o fator de transmissão obtidos com o método ADO pela formulação de Schulz (2014) são dados na Tabela 4.21, enquanto os resultados obtidos neste trabalho são dados na Tabela 4.22.

 Tabela 4.21: Problema 12: Resultados para o fator de transmissão de acordo com o método ADO pela formulação de Schulz (2014).

	$\sigma_{s0} = 0.20$	$\sigma_{s0} = 0.50$	$\sigma_{s0}=0.80$	$\sigma_{s0} = 0.99$
0.04	0.933474	-	-	-
0.05	-	0.931156	-	-
0.07	-	-	0.925022	-
0.10	0.846956	0.870438	0.896574	0.914711
0.33	0.601103	-	-	-
0.37	-	0.622668	-	-
0.45	-	-	0.648991	-
0.49	-	-	-	0.703442
0.50	0.474323	0.534993	0.621975	0.699417
1.00	0.246269	0.306709	0.416245	0.544352
2.00	0.0727415	0.107055	0.197270	0.373347
5.00	0.00244614	0.00528758	0.0229218	0.173152

 Tabela 4.22:
 Problema 12:
 Resultados para o fator de transmissão conforme o método ADO pela formula 

 ção deste trabalho.
 100 metodo anticidade en trabalho.
 100 metodo anticidade en trabalho.

	$\sigma_{s0} = 0.20$	$\sigma_{s0} = 0.50$	$\sigma_{s0} = 0.80$	$\sigma_{s0} = 0.99$
0.04	0.93347	0.94416	0.95541	0.96286
0.05	0.91811	0.93116	0.94504	0.95431
0.07	0.88858	0.90606	0.92502	0.93788
0.10	0.84696	0.87044	0.89657	0.91471
0.33	0.60110	0.65305	0.72075	0.77534
0.37	0.56798	0.62267	0.69565	0.75590
0.45	0.50803	0.56687	0.64899	0.72004
0.49	0.48085	0.54120	0.62726	0.70344
0.50	0.47432	0.53499	0.62197	0.69942
1.00	0.43934(-1)	0.30671	0.41624	0.54435
2.00	0.72742(-1)	0.10706	0.19727	0.37335
5.00	0.24461(-2)	0.52876(-2)	0.22922(-1)	0.17315

Se observa na comparação dos resultados das Tabelas 4.21 e 4.22, uma concordância de dois a cinco dígitos significativos para os valores do fator de transmissão. Essa concordância é ligeiramente maior do que a obtida nos resultados para o coeficiente de albedo.

Com base na Tabela 4.22 foi gerada a Figura 4.13.



Figura 4.13: Resultados do Problema 12: comportamento do fator de transmissão.

Examinando-se a Figura 4.13 e a Tabela 4.22, se conclui que o fator de transmissão sofre uma diminuição de acordo com o aumento de  $\sigma_{s_0}$ . Esse comportamento é contrário ao do coeficiente de albedo.

O fator de transmissão representa a taxa do fluxo incidente em relação ao fluxo no fim do domínio. Se espera que para comprimentos maiores do domínio, uma parcela menor do fluxo inicial reste no fim do domínio devido as perdas de nêutrons que ocorrem durante o trajeto. Desta maneira, domínios maiores devem apresentar valores menores para o fator de transmissão. A Figura 4.13 confirma essas conclusões.

A estabilização do fator de transmissão à partir de certos comprimentos do domínio é menos perceptível do que para os valores do coeficiente de albedo. Nota-se ainda que a maior inclinação das linhas na Figura 4.13 indica que o fator de transmissão sofre maior influência do comprimento do domínio.

## 4.3 Problemas linearmente anisotrópicos sem fonte interna em meio homogêneo

Esta seção tem como objetivo investigar a influência da seção de choque de espalhamento anisotrópica em problemas de transporte de nêutrons unidimensionais, sem fonte interna, em meio homogêneo e regime permanente.

## 4.3.1 Introdução sobre o conceito de anisotropia

Anisotropia é a característica que determina dependência direcional, em oposição à isotropia; implica na diferença de alguma propriedade mecânica ou física em função da orientação. Trata-se de uma condição presente em todas as escalas dos fenômenos naturais, cujo entendimento já proporcionou inúmeras inovações e sustêm muitas tecnologias.

Com relação às maiores escalas, a anisotropia já foi detectada na radiação cósmica de fundo em micro-ondas (Smoot et al., 1977), na rotação das galáxias e até nos ângulos de polarização dos quasares, as maiores fontes de energia do universo (Singal, 2015).

Na constituição do planeta Terra, comportamentos anisotrópicos são observados em diversas casos. A anisotropia sísmica, definida como a variação da velocidade da onda sísmica em uma direção, já foi identificada na crosta, no manto e até no núcleo terrestre (Bianchi, 2010). Formações geológicas com distintas camadas de material sedimentário apresentam anisotropia elétrica, uma propriedade que é utilizada na exploração de gás e óleo (Armstrong et al., 1984; Mendelson and Cohen, 1982). Anisotropia elástica também é induzida pela estratificação dos minerais em camadas (Helbig, 1998).

A anisotropia é uma característica presente no corpo humano. Os ossos, por exemplo, quanto à tensão, são mais resistentes à compressão do que à torção (Vignolia and Kenedib, 2016). Até mesmo o tecido do cérebro contém anisotropia mecânica (Feng et al., 2013).

Em eletro-óptica, a anisotropia ótica é muito estudada (Saleh and Teich, 2011). Os cristais, sólidos e líquidos, notoriamente, apresentam essa propriedade.

Muitos materiais, naturais e sintéticos, conduzem calor de maneira anisotrópica. como, por exemplo, rochas sedimentares, metais, madeira, compósitos de fibras e cristais. Deste modo, os componentes de diversos sistemas utilizados para troca térmica são constituídos de materiais anisotrópicos, como os empregados em eletrônica (Ozisik, 1993).

Mecanicamente, diversos materiais apresentam alguma forma de comportamento anisotrópico, como a dependência do módulo de elasticidade quanto à direção da carga. Em sólidos policristalinos a anisotropia pode ser oriunda da fabricação do material, devido, à direção do rolamento dos cilindros em processos de laminação. Materiais como compostos de fibra e a madeira são muito anisotrópicos. Até mesmo elementos geralmente isotrópicos, como os metais, em algumas situações podem apresentar comportamento anisotrópico (Hibbeler, 2010).

No campo do transporte de nêutrons, os efeitos da anisotropia também são muito importantes, porque a hipótese de isotropia não pode ser assumida em meios que contenham elementos leves, como ocorre nos moderadores em reatores heterogêneos. A importância do emprego adequado da condição de anisotropia já foi atestada por Enyde (2005). Seus efeitos têm sido, portanto, estudados por muitos pesquisadores, entre os quais cita-se Bond and Siewert (1969) e Mika (1961).

## **4.3.2** Descrição dos problemas linearmente anisotrópicos em meios homogêneos sem fonte interna

Considerando-se nulo o termo relativo à fonte interna  $Q_{\alpha}(x,\mu) = 0$ , e atribuindo-se a quantidade de camadas no domínio como M = 1, nas Eqs. (3.8) e (3.9), segundo Barichello (1992) e Barichello and Siewert (1999), se obtém a versão em ordenadas discretas da equação de transporte de nêutrons unidimensional em regime estacionário, aplicada à um meio homogêneo com espalhamento anisotrópico linear. Essa equação é dada por

$$\mu_{i} \frac{d}{dx} \Psi(x, \mu_{i}) + \sigma_{t} \Psi(x, \mu_{i}) = \frac{\sigma_{s0}}{2} \sum_{k=1}^{N} w_{k} \left[ \Psi(x, \mu_{k}) + \sigma_{t} \Psi(x, -\mu_{k}) \right] + \frac{3}{2} \mu_{i} \sigma_{s1} \sum_{k=1}^{N} \mu_{k} w_{k} \left[ \Psi(x, \mu_{k}) - \Psi(x, -\mu_{k}) \right],$$
(4.22)

$$-\mu_{i}\frac{d}{dx}\Psi(x,-\mu_{i})) + \sigma_{t}\Psi(x,-\mu_{i})) = \frac{\sigma_{s0}}{2}\sum_{k=1}^{N}w_{k}\left[\Psi(x,\mu_{k}) + \sigma_{t}\Psi(x,-\mu_{k})\right] - \frac{3}{2}\mu_{i}\sigma_{s1}\sum_{k=1}^{N}\mu_{k}w_{k}\left[\Psi(x,\mu_{k}) - \Psi(x,-\mu_{k})\right], \quad (4.23)$$

para i = 1, ..., N.

São consideradas fontes externas constantes. Assim, as condições de contorno são dadas pelas Eqs. (3.36) e (3.37)

$$\Psi(0,\mu_i) = F,$$
$$\Psi(a,-\mu_i) = G,$$

onde F e G correspondem, respectivamente, as condição de contorno à esquerda e à direita do domínio (como podem ser vistas na Figura 4.14), para i = 1, ..., N.



Figura 4.14: Condições de contorno do problema unidimensional.

Na Tabela 4.23 são apresentados os parâmetros prescritos para todos os problemas estudados nesta seção.

Problema	$\sigma_t$	$\sigma_{s0}$	$\sigma_{s1}$	F	G	$X_M$	N	M
13	1	0.99	0.8	1	0	100	Variável	1
14	1	Variável	0.5	1	0	5	8	1
15	1	Variável	0.5	1	1	5	8	1
16	1	Variável	0.5	1	-1	5	8	1
17	1	0.5	0.5	1	0	5	Variável	1
18	1	0.5	0.5	1	1	5	Variável	1
19	1	0.5	0.5	1	-1	5	Variável	1
20	1	0.5	Variável	1	0	5	8	1
21	1	0.5	Variável	1	1	5	8	1
22	1	0.5	Variável	1	-1	5	8	1
23	1	0.5	0.5	1	0	Variável	8	1
24	1	0.5	0.5	1	1	Variável	8	1
25	1	0.5	0.5	1	-1	Variável	8	1

Tabela 4.23: Parâmetros dos Problemas-teste 13 até 25.

Os parâmetros utilizados nos problemas anisotrópicos são semelhantes àqueles da seção que tratava de problemas isotrópicos, com exceção dos valores para a seção de choque de espalhamento anisotrópica.

Os resultados desta seção são relativos aos valores dos perfis do fluxo escalar de nêutrons.

# 4.3.3 Discussão dos resultados dos problemas linearmente anisotrópicos sem fonte interna em meio homogêneo

4.3.3.1 Validação do Código e do Método: Problemas linearmente anisotrópicos sem fonte interna em meio homogêneo.

Os parâmetros do Problema 13 são fornecidos na Tabela 4.24.

Tabela 4.24:Dados do Problema 13.								
Problema	$\sigma_t$	$\sigma_{s0}$	$\sigma_{s1}$	F	G	$X_M$	N	M
13	1	0.99	0.8	1	0	100	Variável	1

Os resultados com métodos SGF<sub>2</sub>(Barichello, 1992), LTS<sub>2</sub>(Barichello, 1992) e ADO  $S_2$  são apresentados na Tabela 4.25.

**Tabela 4.25:** Problema 13 - Comparação do método ADO com os métodos SGF<sub>2</sub>(Barichello, 1992) e LTS<sub>2</sub>(Barichello, 1992).

x	SGF <sub>2</sub> (Barichello, 1992)	LTS <sub>2</sub> (Barichello, 1992)	Método ADO $S_2$
0	0.81726	0.81726	0.82306
10	-	-	0.36020
20	-	-	0.16649
30	-	-	0.76956(-1)
40	-	-	0.35570(-1)
50	0.16991(-1)	0.16991(-1)	0.16438(-1)
60	-	-	0.75909(-2)
70	-	-	0.34934(-2)
80	-	-	0.15816(-2)
90	-	-	0.65936(-3)
100	0.12918(-3)	0.12918(-3)	0.12192(-3)

Os resultados com métodos SGF<sub>4</sub>(Barichello, 1992), LTS<sub>4</sub>(Barichello, 1992) e ADO  $S_4$  estão disponíveis na Tabela 4.26.

x	SGF <sub>4</sub> (Barichello, 1992)	LTS <sub>4</sub> (Barichello, 1992)	Método ADO $S_4$
0	0.82226	0.82226	0.82299
10	-	-	0.36023
20	-	-	0.16654
30	-	-	0.76993(-1)
40	-	-	0.35593(-1)
50	0.16538(-1)	0.16538(-1)	0.16452(-1)
60	-	-	0.75989(-2)
70	-	-	0.34977(-2)
80	-	-	0.15838(-2)
90	-	-	0.66038(-3)
100	0.12353(-3)	0.12353(-3)	0.12222(-3)

**Tabela 4.26:** Problema 13 - Comparação do método ADO com os métodos SGF<sub>4</sub>(Barichello, 1992) e LTS<sub>4</sub>(Barichello, 1992).

Os resultados com métodos SGF<sub>8</sub>(Barichello, 1992), LTS<sub>8</sub>(Barichello, 1992) e ADO  $S_8$  são apresentados na Tabela 4.27.

x	SGF <sub>8</sub> (Barichello, 1992)	LTS <sub>8</sub> (Barichello, 1992)	Método ADO $S_8$
0	0.82284	0.82284	0.82299
10	-	-	0.36024
20	-	-	0.16654
30	-	-	0.76994(-1)
40	-	-	0.35594(-1)
50	0.16470(-1)	0.16471(-1)	0.16452(-1)
60	-	-	0.75989(-2)
70	-	-	0.34977(-2)
80	-	-	0.15838(-2)
90	-	-	0.66038(-3)
100	0.12250(-3)	0.12251(-3)	0.12222(-3)

**Tabela 4.27:** Problema 13 - Comparação do método ADO com os métodos SGF<sub>8</sub>(Barichello, 1992) e LTS<sub>8</sub>(Barichello, 1992).

Na comparação dos resultados apresentados nas Tabela 4.25 à 4.27, observa-se a boa concordância do método ADO com outras formulações existentes na literatura. Esta validação é importante para mostrar a eficiência do método e do código computacional na simulação desta classe de problemas.

A concordância dos resultados através do método ADO mediante o aumento do parâmetro N pode ser observada na Tabela 4.28 e Figura 4.15

x	N=2	N = 4	N = 6	N = 8
0	0.82306	0.82299	0.82299	0.82299
10	0.36020	0.36023	0.36023	0.36024
20	0.16649	0.16654	0.16654	0.16654
30	0.76956(-1)	0.76993(-1)	0.76993(-1)	0.76994(-1)
40	0.35570(-1)	0.35593(-1)	0.35594(-1)	0.35594(-1)
50	0.16438(-1)	0.16452(-1)	0.16452(-1)	0.16452(-1)
60	0.75909(-2)	0.75989(-2)	0.75989(-2)	0.75989(-2)
70	0.34934(-2)	0.34977(-2)	0.34977(-2)	0.34977(-2)
80	0.15816(-2)	0.15838(-2)	0.15838(-2)	0.15838(-2)
90	0.65936(-3)	0.66038(-3)	0.66038(-3)	0.66038(-3)
100	0.12192(-3)	0.12222(-3)	0.12222(-3)	0.12222(-3)

 Tabela 4.28:
 Problema 13 - Convergência dos resultados.



Figura 4.15: Resultados do Problema 13: Análise de precisão.

Por meio da Tabela 4.28 e Figura 4.15, pode ser observada a concordância pela estabilização do fluxo escalar entre dois e três dígitos conforme o valor de N aumenta. É importante salientar que a quadratura utilizada neste trabalho é a de Gauss-Legendre e que, mesmo para pequenos valores de N, consegue-se resultados com uma razoável taxa de concordância.

Na Figura 4.15 pode-se observar, além da concordância, que o fluxo escalar tem comportamento físico coerente com os parâmetros propostos para o Problema 13.

## 4.3.3.2 Estudo da influência do coeficiente de espalhamento isotrópico: Problemas linearmente anisotrópicos sem fonte interna em meio homogêneo.

Os parâmetros para os Problemas 14, 15 e 16 são dados na Tabela 4.29.

Problema	$\sigma_t$	$\sigma_{s0}$	$\sigma_{s1}$	F	G	$X_M$	N	M
14	1	Variável	0.5	1	0	5	8	1
15	1	Variável	0.5	1	1	5	8	1
16	1	Variável	0.5	1	-1	5	8	1

**Tabela 4.29:** Dados do Problema 14, 15 e 16.

Os resultados obtidos na solução do Problema 14 são dados na Tabela 4.30 e a Figura 4.16 foi gerada à partir destes resultados. Os resultados para o Problema 15 podem ser visualizados na Tabela 4.31, enquanto a Figura 4.17 é embasada nesses resultados. A Tabela 4.32 contém os resultados alcançados para o Problema 16 e a Figura 4.18 representa-os de maneira gráfica.

x	$\sigma_{s0} = 0.1$	$\sigma_{s0} = 0.3$	$\sigma_{s0} = 0.5$	$\sigma_{s0} = 0.8$	$\sigma_{s0} = 0.99$
0.00	0.44949	0.47912	0.51905	0.62530	0.82803
0.50	0.18235	0.21623	0.26548	0.41185	0.72343
1.00	0.10359	0.12946	0.16997	0.30677	0.64852
1.50	0.62939(-1)	0.81953(-1)	0.11360	0.23334	0.57978
2.00	0.39417(-1)	0.53186(-1)	0.77376(-1)	0.17886	0.51441
2.50	0.25109(-1)	0.34997(-1)	0.53242(-1)	0.13743	0.45137
3.00	0.16180(-1)	0.23245(-1)	0.36876(-1)	0.10552	0.39009
3.50	0.10535(-1)	0.15567(-1)	0.25673(-1)	0.80663(-1)	0.33004
4.00	0.69573(-2)	0.10536(-1)	0.17966(-1)	0.61033(-1)	0.27041
4.50	0.47239(-2)	0.72590(-2)	0.12633(-1)	0.45019(-1)	0.20924
5.00	0.34279(-2)	0.50765(-2)	0.85134(-2)	0.28784(-1)	0.13003

 Tabela 4.30: Resultados do Problema 14: análise quanto ao espalhamento isotrópico.



Figura 4.16: Resultados do Problema 14: análise quanto ao espalhamento isotrópico.
x	$\sigma_{s0} = 0.1$	$\sigma_{s0} = 0.3$	$\sigma_{s0} = 0.5$	$\sigma_{s0}=0.8$	$\sigma_{s0} = 0.99$
0.00	0.45292	0.48420	0.52756	0.65408	0.95806
0.50	0.18708	0.22348	0.27811	0.45687	0.93268
1.00	0.11055	0.14000	0.18793	0.36780	0.91893
1.50	0.73474(-1)	0.97520(-1)	0.13928	0.31401	0.90981
2.00	0.55597(-1)	0.76430(-1)	0.11425	0.28438	0.90450
2.50	0.50217(-1)	0.69994(-1)	0.10648	0.27487	0.90275
3.00	0.55597(-1)	0.76430(-1)	0.11425	0.28438	0.90450
3.50	0.73474(-1)	0.97520(-1)	0.13928	0.31401	0.90981
4.00	0.11055	0.14000	0.18793	0.36780	0.91893
4.50	0.18708	0.22348	0.27811	0.45687	0.93268
5.00	0.45292	0.48420	0.52756	0.65408	0.95806

 Tabela 4.31: Resultados do Problema 15: análise quanto ao espalhamento isotrópico.



Figura 4.17: Resultados do Problema 15: análise quanto ao espalhamento isotrópico.

x	$\sigma_{s0} = 0.1$	$\sigma_{s0}=0.3$	$\sigma_{s0}=0.5$	$\sigma_{s0} = 0.8$	$\sigma_{s0}=0.99$
0.00	0.44607	0.47405	0.51053	0.59651	0.69801
0.50	0.17763	0.20897	0.25284	0.36683	0.51419
1.00	0.96632(-1)	0.11893	0.15200	24574	0.37811
1.50	0.52404(-1)	0.66386(-1)	0.87931(-1)	0.15268	0.24974
2.00	0.23237(-1)	0.29941(-1)	0.40500(-1)	0.73339(-1)	0.12431
2.50	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
3.00	-0.23237(-1)	-0.29941(-1)	-0.40500(-1)	-0.73339(-1)	-0.12431
3.50	-0.52404(-1)	-0.66386(-1)	-0.87931(-1)	-0.15268	-0.24974
4.00	-0.96632(-1)	-0.11893	-0.15200	-24574	-0.37811
4.50	-0.17763	-0.20897	-0.25284	-36683	-0.51419
5.00	-0.44607	-0.47405	-0.51053	-59651	-0.69801

Tabela 4.32: Resultados do Problema 16: análise quanto ao espalhamento isotrópico.



Figura 4.18: Resultados do Problema 16: análise quanto ao espalhamento isotrópico.

Analisando-se as Tabelas 4.30 à 4.32 e as Figuras 4.16 à 4.18 pode-se notar que a influência do coeficiente de espalhamento isotrópico se mantém, mesmo com o acréscimo do coeficiente de anisotropia ( $\sigma_{s0} = 0.5$ ). O aumento no coeficiente de espalhamento isotrópico teve como efeito a amplificação do fluxo escalar de nêutrons. Os efeitos da anisotropia no fluxo de nêutrons serão estudados posteriormente nesta seção.

## 4.3.3.3 Análise de precisão: Problemas linearmente anisotrópicos sem fonte interna em meio homogêneo.

Os valores para as propriedades dos Problemas 17, 18 e 19 são apresentadas na Tabela 4.33

Problema	$\sigma_t$	$\sigma_{s0}$	$\sigma_{s1}$	F	G	$X_M$	N	M
17	1	0.5	0.5	1	0	5	Variável	1
18	1	0.5	0.5	1	1	5	Variável	1
19	1	0.5	0.5	1	-1	5	Variável	1

Tabela 4.33: Dados dos Problemas 17,18 e 19.

A Tabela 4.34 apresenta os resultados obtidos para o Problema 17, que levaram a construção da Figura 4.19.

x	N=2	N = 4	N=6	N=8
0.00	0.51935	0.51905	0.51905	0.51905
0.50	0.25845	0.26601	0.26547	0.26548
1.00	0.16595	0.17001	0.16996	0.16997
1.50	0.11330	0.11351	0.11361	0.11360
2.00	0.78307(-1)	0.77342(-1)	77375(-1)	0.77376(-1)
2.50	0.54267(-1)	0.53246(-1)	53240(-1)	0.53242(-1)
3.00	0.37653(-1)	0.36888(-1)	36876(-1)	0.36876(-1)
3.50	0.26170(-1)	0.25682(-1)	25673(-1)	0.25673(-1)
4.00	0.18242(-1)	0.17969(-1)	17966(-1)	0.17966(-1)
4.50	0.12737(-1)	0.12631(-1)	12633(-1)	0.12633(-1)
5.00	0.84920(-2)	0.85126(-2)	85134(-2)	0.85134(-2)

 Tabela 4.34:
 Resultados do Problema 17: análise de precisão.



Figura 4.19: Resultados do Problema 17: análise de precisão.

Os resultados para o Problema 18 são apresentados na Tabela 4.20, e a Figura 4.20 é baseada nestes resultados.

x	N=2	N = 4	N = 6	N = 8
0.00	0.52784	0.52756	0.52756	0.52756
0.50	0.27119	0.27865	0.27810	0.27811
1.00	0.18419	0.18798	0.18793	0.18793
1.50	0.13947	0.13919	0.13929	0.13928
2.00	0.11596	0.11423	0.11425	0.11425
2.50	0.10853	0.10649	0.10648	0.10648
3.00	0.11596	0.11423	0.11425	0.11425
3.50	0.13947	0.13919	0.13929	0.13928
4.00	0.18419	0.18798	0.18793	0.18793
4.50	0.27119	0.27865	0.27810	0.27811
5.00	0.52784	0.52756	0.52756	0.52756

Tabela 4.35: Resultados do Problema 18: análise de precisão.



Figura 4.20: Resultados do Problema 18: análise de precisão.

x	N=2	N = 4	N = 6	N = 8
0.00	0.51086	0.51054	0.51053	0.51053
0.50	0.24571	0.25338	0.25284	0.25284
1.00	0.14771	0.15204	0.15200	0.15200
1.50	0.87129(-1)	0.87828(-1)	87939(-1)	0.87931(-1)
2.00	0.40654(-1)	0.40454(-1)	40500(-1)	0.40500(-1)
2.50	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
3.00	-0.40654(-1)	-0.40454(-1)	-0.40500(-1)	-0.40500(-1)
3.50	-0.87129(-1)	-0.87828(-1)	-0.87939(-1)	-0.87931(-1)
4.00	-0.14771	-0.15204	-15200	-0.15200
4.50	-0.24571	-0.25338	-25284	-0.25284
5.00	-0.51086	-0.51054	-51053	-0.51053

Tabela 4.36: Resultados do Problema 19: análise de precisão.



Figura 4.21: Resultados do Problema 19: análise de precisão.

Pela análise das Tabelas 4.34 à 4.36 e Figuras 4.19 à 4.21 pode-se observar que a concordância dos resultados foi alcançada pelo aumento do parâmetro N. A quantidade de dígitos significativos, contudo, não se manteve igual em relação ao problema isotrópico. A precisão dos resultados foi diminuída pela presença da anisotropia. A concordância máxima entre os resultados obtidos nesta seção foi de três casas decimais, enquanto nos problemas isotrópicos foram obtidas até 5 casas decimais.

Nos problemas isotrópicos, as maiores concordâncias foram obtidas nos extremos do domínio. Com o efeito do coeficiente de espalhamento anisotrópico, observa-se que apenas o contorno à esquerda (em que G = 0), no Problema 17, apresenta valores elevados de concordância. A concordância nas outras regiões extremas (onde há presença de uma fonte externa) foi dificultada. Assim, conclui-se que a anisotropia afeta à concordância dos resultados principalmente nas regiões próximas à uma fonte de nêutrons.

## 4.3.3.4 Análise da influência do comprimento do domínio: Problemas linearmente anisotrópicos sem fonte interna em meio homogêneo.

As propriedades para os Problemas 20, 21 e 22 são listadas na Tabela 4.37.

Problema	$\sigma_t$	$\sigma_{s0}$	$\sigma_{s1}$	F	G	$X_M$	N	M
20	1	0.5	0.5	1	0	Variável	8	1
21	1	0.5	0.5	1	1	Variável	8	1
22	1	0.5	0.5	1	-1	Variável	8	1

Tabela 4.37: Dados dos Problemas 20, 21 e 22.

Os resultados para estes problemas são apresentados através das Figuras 4.22 à 4.24.



Figura 4.22: Resultados do Problema 20: análise da dimensão do domínio.



Figura 4.23: Resultados do Problema 21: análise da dimensão do domínio.



Figura 4.24: Resultados do Problema 22: análise da dimensão do domínio.

Para os três problemas-teste, conforme mostram as Figuras 4.22 à 4.24, os perfis do fluxo escalar para diferentes comprimentos de domínio apresentam comportamento equivalente aos obtidos para os problemas isotrópicos.

#### 4.3.3.5 Análise da influência da seção de choque de espalhamento anisotrópico: Problemas linearmente anisotrópicos sem fonte interna em meio homogêneo.

Para estudar a influência da seção de choque de espalhamento anisotrópico, são resolvidos três problemas, cujos dados são demonstrados na Tabela 4.38

Problema	$\sigma_t$	$\sigma_{s0}$	$\sigma_{s1}$	F	G	$X_M$	N	M
23	1	0.5	Variável	1	0	5	8	1
24	1	0.5	Variável	1	1	5	8	1
25	1	0.5	Variável	1	-1	5	8	1

Tabela 4.38: Dados dos Problemas 23, 24 e 25.

Obteve-se os resultados visíveis na Tabela 4.39 e ilustrados na Figura 4.25 para o Problema 23.

x	$\sigma_{s1} = 0.0$	$\sigma_{s1} = 0.1$	$\sigma_{s1}=0.3$	$\sigma_{s1} = 0.5$	$\sigma_{s1} = 0.8$	$\sigma_{s1} = 0.99$
0.00	0.58579	0.57560	0.55131	0.51905	0.43635	0.30266
0.50	0.26453	0.26615	0.26778	0.26548	0.24004	0.15995
1.00	0.14515	0.15009	0.16024	0.16997	0.17512	0.13619
1.50	0.83118(-1)	0.88307(-1)	0.10003	0.11360	0.13441	0.12647
2.00	0.48616(-1)	0.53036(-1)	0.63664(-1)	0.77376(-1)	0.10539	0.12113
2.50	0.28796(-1)	0.32235(-1)	0.40961(-1)	0.53242(-1)	0.83677(-1)	0.11760
3.00	0.17191(-1)	0.19735(-1)	0.26526(-1)	0.36876(-1)	0.67114(-1)	0.11502
3.50	0.10303(-1)	0.12126(-1)	0.17242(-1)	0.25673(-1)	0.54430(-1)	0.11304
4.00	0.61593(-2)	0.74382(-2)	0.11217(-1)	0.17966(-1)	0.44774(-1)	0.11152
4.50	0.36083(-2)	0.44894(-2)	0.72498(-2)	0.12633(-1)	0.37503(-1)	0.11028
5.00	0.18431(-2)	0.24136(-2)	0.43427(-2)	0.85134(-2)	0.30906(-1)	0.10539

Tabela 4.39: Resultados do Problema 23: análise do fator de anisotropia.



Figura 4.25: Resultados do Problema 23: análise do fator de anisotropia.

Os resultados disponibilizados na Tabela 4.39 e Figura 4.25 demonstram o efeito do coeficiente de espalhamento anisotrópico nesta classe de problemas. Observa-se que o aumento desse coeficiente leva as seguintes consequências: (i) grande diminuição do fluxo nas regiões próximas à fonte externa e (ii) dissipação menor de nêutrons ao longo do domínio. Isto leva à um efeito de achatamento nos perfis do fluxo escalar. A linha relativa ao perfil do fluxo escalar com maior coeficiente de espalhamento anisotrópico ( $\sigma_{s1} =$ 0.99), parte de valores iniciais menores, mas também possui uma taxa de decaimento menor, mantendo-se relativamente estável à partir de x = 1.00. A observação das linhas dos perfis para  $\sigma_{s1} = 0.8$ ,  $\sigma_{s1} = 0.5$ ,  $\sigma_{s1} = 0.3$ ,  $\sigma_{s1} = 0.1$  e  $\sigma_{s1} = 0.0$  confirma essas conclusões. Os perfis com maior coeficiente de espalhamento anisotrópico apresentam valores iniciais menores, mas têm menor decaimento ao longo do domínio.

Os resultados para o Problema 24 podem ser contemplados na Tabela 4.40. A Figura 4.26 os representa.

x	$\sigma_{s1} = 0.0$	$\sigma_{s1} = 0.1$	$\sigma_{s1} = 0.3$	$\sigma_{s1} = 0.5$	$\sigma_{s1} = 0.8$	$\sigma_{s1} = 0.99$
0.00	0.58763	0.57802	0.55565	0.52756	0.46726	0.40805
0.50	0.26814	0.27064	0.27503	0.27811	0.27754	0.27023
1.00	0.15131	0.15753	0.17146	0.18793	0.21989	0.24771
1.50	0.93421(-1)	0.10043	0.11727	13928	0.18884	0.23951
2.00	0.65807(-1)	0.72771(-1)	0.90190(-1)	0.11425	0.17251	0.23614
2.50	0.57593(-1)	0.64470(-1)	0.81922(-1)	0.10648	0.16735	0.23520
3.00	0.65807(-1)	0.72771(-1)	0.90190(-1)	0.11425	0.17251	0.23614
3.50	0.93421(-1)	0.10043	0.11727	0.13928	0.18884	0.23951
4.00	0.15131	0.15753	0.17146	0.18793	0.21989	0.24771
4.50	0.26814	0.27064	0.27503	0.27811	0.27754	0.27023
5.00	0.58763	0.57802	0.55565	0.52756	0.46726	0.40805

Tabela 4.40: Resultados do Problema 24: análise do fator de anisotropia.



Figura 4.26: Resultados do Problema 24: análise do fator de anisotropia.

A análise da Figura 4.26 e Tabela 4.40 revela que no Problema 24 os efeitos da anisotropia foram equivalentes aos do Problema 23. Nota-se que a anisotropia causa uma redução do fluxo na região nos entornos das fontes externas em x = 0.00 e x = 5.00 e uma menor dissipação de nêutrons ao longo do comprimento do domínio.

Os perfis com maior anisotropia são mais baixos antes de x = 0.60 e depois de x = 4.40. Na região entre estes pontos, os fluxos dos perfis com maior anisotropia são maiores. Isto ocorre devido a redução do decaimento, ou da dissipação de nêutrons durante seu trajeto pelo domínio, e leva ao efeito de achatamento dos perfis mais anisotrópicos, como pode ser observado na Figura 4.26.

Os resultados para o Problema 25 podem ser analisados na Tabela 4.41 e na Figura 4.27.

x	$\sigma_{s1} = 0.0$	$\sigma_{s1} = 0.1$	$\sigma_{s1}=0.3$	$\sigma_{s1} = 0.5$	$\sigma_{s1} = 0.8$	$\sigma_{s1} = 0.99$
0.00	0.58394	0.57319	0.54697	0.51053	0.40544	0.19728
0.50	0.26093	0.26166	0.26053	0.25284	0.20253	0.49664(-1)
1.00	0.13899	0.14265	0.14902	0.15200	0.13035	0.24678(-1)
1.50	0.72816(-1)	0.76181(-1)	0.82783(-1)	0.87931(-1)	0.79983(-1)	0.13430(-1)
2.00	0.31425(-1)	0.33301(-1)	0.37138(-1)	0.40500(-1)	0.38281(-1)	0.61078(-2)
2.50	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000	0.00000
3.00	-0.31425(-1)	-0.33301(-1)	-0.37138(-1)	-0.40500(-1)	-0.38281(-1)	-0.61078(-2)
3.50	-0.72816(-1)	-0.76181(-1)	-0.82783(-1)	-0.87931(-1)	-0.79983(-1)	-0.13430(-1)
4.00	-0.13899	-0.14265	-0.14902	-0.15200	-0.13035	-0.24678(-1)
4.50	-0.26093	-0.26166	-0.26053	-0.25284	-0.20253	-0.49664(-1)
5.00	-0.58394	-0.57319	-0.54697	-0.51053	-0.40544	-0.19728

 Tabela 4.41: Resultados do Problema 25: análise do fator de anisotropia.



Figura 4.27: Resultados do Problema 25: análise do fator de anisotropia.

Segundo a Tabela 4.41 e Figura 4.27, pode-se novamente afirmar que a anisotropia contribui para a diminuição na variação das amplitudes dos fluxos escalares.

Além disso, fica evidente o efeito físico esperado de que os resultados se aproximem aos do caso isotrópico conforme o valor de  $\sigma_{s1}$  diminui.

### 4.4 Problemas heterogêneos com anisotropia linear sem fonte interna

Nesta seção resolve-se um problema unidimensional de transporte de nêutrons em regime permanente, com espalhamento isotrópico e anisotrópico linear, sem presença de uma fonte interna de nêutrons, com domínio heterogêneo divido em camada homogêneas. Essa divisão tem como proposito caracterizar à um domínio heterogêneo com distintas propriedades por região, e servirá como base para as formulações das seções posteriores.

#### 4.4.1 Estado da arte: problemas heterogêneos sem fonte interna

Comumente, o transporte de nêutrons ocorre em meios onde as propriedades variam entre diferentes pontos ou regiões. Diversas situações incorporam esses tipos de domínio, com destaque para a área da física de reatores nucleares Neto (2016).

Desta maneira, muitos trabalhos podem ser encontrados na literatura científica à respeito de problemas de transporte de nêutrons em meios heterogêneos, onde cita-se os trabalhos de Leal (2008), Tomaschewski (2012) e Ceolin et al. (2009).

#### 4.4.2 Descrição dos problemas heterogêneos sem fonte interna

A construção do domínio heterogêneo dos problemas é realizada através da divisão do espaço em uma série de camadas com propriedades diferentes.

Na Figura 4.28 um esquema genérico do domínio heterogêneo dos problemas estudados nesta seção pode ser observado.



Figura 4.28: Divisão do domínio heterogêneo em camadas

Nesta subseção, o termo que corresponde à fonte interna presente nas Eqs. (3.8) e (3.9) é considerado nulo,  $Q_{\alpha}(x, \mu) = 0$ ), de modo que dessa equação se obtém

$$\mu_{i} \frac{d}{dx} \Psi_{\alpha}(x,\mu_{i}) + \sigma_{t,\alpha} \Psi_{\alpha}(x,\mu_{i}) = \frac{\sigma_{s0,\alpha}}{2} \sum_{k=1}^{N} w_{k} \left[ \Psi_{\alpha}(x,\mu_{k}) + \Psi_{\alpha}(x,-\mu_{k}) \right] + \frac{3}{2} \mu_{i} \sigma_{s1,\alpha} \sum_{k=1}^{N} \mu_{k} w_{k} \left[ \Psi_{\alpha}(x,\mu_{k}) - \Psi_{\alpha}(x,-\mu_{k}) \right], \quad (4.24)$$

e

$$-\mu_{i}\frac{d}{dx}\Psi_{\alpha}(x,-\mu_{i}) + \sigma_{t,\alpha}\Psi_{\alpha}(x,-\mu_{i}) = \frac{\sigma_{s0,\alpha}}{2}\sum_{k=1}^{N}w_{k}\left[\Psi_{\alpha}(x,\mu_{k}) + \Psi_{\alpha}(x,-\mu_{k})\right] - \frac{3}{2}\mu_{i}\sigma_{s1,\alpha}\sum_{k=1}^{N}\mu_{k}w_{k}\left[\Psi_{\alpha}(x,\mu_{k}) - \Psi_{\alpha}(x,-\mu_{k})\right], \quad (4.25)$$

para  $i, \ldots, N$  e  $\alpha = 1, \ldots, M$ .. representando a equação de transporte unidimensional, em regime permanente, escrita em ordenadas discretas, para um meio heterogêneo em camadas, considerando-se espalhamento isotrópico e anisotrópico linear.

Para a classe de problemas estudada nesta seção são consideradas condições prescritas conforme as Eqs. (3.36) e (3.37) na forma

$$\Psi_1(0,\mu_i) = F,$$
  
$$\Psi_M(a,-\mu_i) = G,$$

onde F e G correspondem, respectivamente, as condição de contorno à esquerda e à direita do domínio, para i = 1, ..., N, e a seguinte condição de interface entre os meios

$$\Psi_{\alpha}(x_{\alpha}, \pm \mu_i) = \Psi_{\alpha+1}(x_{\alpha}, \pm \mu_i)$$

para i = 1, ..., N e para  $\alpha = 1, ..., M - 1$ .

#### 4.4.3 Discussão dos resultados do problema heterogêneo sem fonte interna

Os parâmetros do problema estudado nesta seção é dado na tabela 4.42.

Problema	$\sigma_t$	$\sigma_{s0}$	$\sigma_{s1}$	F	G	$[X_0, X_M]$	Ν	Μ
	1.00	0.90	0.80			[0.00, 20.00)		
26	0.60	0.40	0.30	1.00	0.00	[20.00, 70.00)	50	3
	1.00	0.90	0.80			[70.00, 100.00]		

Tabela 4.42: Parâmetros do Problema 26.

Um esquema das seções do domínio pode ser visualizado na Figura 4.29.



Figura 4.29: Esquema das seções do domínio dos problemas estudados nesta seção.

Os resultados obtidos pelo método ADO são apresentados em comparação com aqueles obtidos pelo método SGF em Barros and Larsen (1990) e  $LTS_N$  em Barichello (1992) na Tabela 4.43.

X	0.00	20.00	70.00	100.00
$SGFS_2$ Barros and Larsen (1990)	0.58578	$0.40531 \mathrm{x} 10^{-2}$	$026614 x 10^{-11}$	$0.14190 \mathrm{x} 10^{-14}$
$LTS_2$ Barichello (1992)	0.58578	$0.40531 \mathrm{x} 10^{-2}$	$0.17281 \mathrm{x} 10^{-9}$	$0.14190 \mathrm{x} 10^{-14}$
$ADOS_2$	0.58578	$0.40530 \mathrm{x} 10^{-2}$	$0.26614 \mathrm{x} 10^{-11}$	$0.14189 \mathrm{x} 10^{-14}$
$SGFS_4$ Barros and Larsen (1990)	0.60819	$0.41468 \mathrm{x} 10^{-2}$	$0.31817 \mathrm{x} 10^{-10}$	$0.24196 \mathrm{x} 10^{-13}$
$LTS_4$ Barichello (1992)	0.60819	$0.41468 \mathrm{x} 10^{-2}$	$0.31816 \mathrm{x} 10^{-10}$	$0.24196 \mathrm{x} 10^{-13}$
$ADOS_4$	0.60818	$0.41485 \mathrm{x} 10^{-2}$	$0.31816 \times 10^{-10}$	$0.24195 \mathrm{x} 10^{-13}$
$SGFS_8$ Barros and Larsen (1990)	0.61112	$0.41033 x 10^{-2}$	$0.32316 \times 10^{-10}$	$0.24323 x 10^{-13}$
$LTS_8$ Barichello (1992)	0.61112	$0.41033 \mathrm{x} 10^{-2}$	$0.32316 \mathrm{x} 10^{-10}$	$0.24323 x 10^{-13}$
$ADOS_8$	0.61111	$0.41032 \mathrm{x} 10^{-2}$	$0.32315 \mathrm{x10}^{-10}$	$0.24323 x 10^{-13}$

 Tabela 4.43: Resultados do Problema 26: Comparação dos perfis do fluxo escalar obtidos com diferentes métodos e ordem de quadratura variável.

Convergência dos resultados do perfis do fluxo escalar obtidos pelo método ADO são fornecidos na Tabela 4.44.

 Tabela 4.44:
 Concordância dos resultados do perfis do fluxo escalar através do método ADO utilizado neste trabalho.

х	$S_2$	$S_4$	$S_6$	$S_8$
0.00	0.58578	0.60818	0.61042	0.61111
10.00	0.50548(-1)	0.48107(-1)	0.47804(-1)	0.47709(-1)
20.00	0.40530(-2)	0.41485(-2)	0.41137(-2)	0.41032(-2)
30.00	0.58240(-4)	0.87158(-4)	0.86488(-4)	0.86336(-4)
40.00	0.83689(-6)	0.20980(-5)	0.20911(-5)	0.20872(-5)
50.00	0.12025(-7)	0.50501(-7)	0.50617(-7)	0.50525(-7)
60.00	0.17280(-9)	0.12156(-8)	0.12252(-8)	0.12231(-8)
70.00	0.26614(-11)	0.31816(-10)	0.32341(-10)	0.32315(-10)
80.00	0.22977(-12)	0.34169(-11)	0.34755(-11)	0.34705(-11)
90.00	0.19813(-13)	0.32375(-12)	0.32933(-12)	0.32885(-12)
100.00	0.14189(-14)	0.24195(-13)	0.24419(-13)	0.24323(-13)

Os resultados para o perfil de fluxo escalar obtidos pelo método ADO com S = 8 pode ser observado na Figura 4.30.



Figura 4.30: Perfil do fluxo escalar com S = 8 para o Problema 26.

Observa-se na Tabela 4.43 que o método retornou valores para o fluxo escalar semelhantes com os dos outros métodos, com uma concordância entre três e cinco dígitos significativos. Ainda que este problema envolvesse regiões com diferentes propriedades, a utilização da condição de interface fez com que a curva do perfil de fluxo escalar da Figura 4.30 fosse suave. A concordância representada pela Tabela 4.44 mostra que, utilizando-se até N = 8, se consegue fixar os resultados apenas entre 2 e 3 dígitos significativos. Essa dificuldade já foi verificada em problemas anteriores e é provocada principalmente pelo efeito da anisotropia presente no problema.

# 4.5 Problemas heterogêneos com anisotropia linear e fonte interna constante

Esta seção é dedicada à formulação e resolução de problemas heterogêneos com anisotropia linear e fonte interna constante, capazes de caracterizar problemas comuns de blindagem radioativa. Em relação à seção anterior, acrescenta-se a presença de uma fonte interna de nêutrons em determinadas regiões do domínio, caracterizando-se, assim, essa classe de problemas. Essa seção se divide em duas subseções: uma para a introdução, outra para a descrição dos problemas, apresentação dos resultados e sua análise.

#### 4.5.1 Estado da arte sobre problemas de blindagem radioativa

Os problemas de blindagem detém especial importância no contexto de engenharia nuclear, onde o risco de contaminação por vazamentos de radiação constitui uma grave preocupação. A necessidade de proteção pessoal, ambiental e dos equipamentos demanda grande precisão no projeto da blindagem radiativa (Oliveira, 2007). Com efeito, a determinação do fluxo de nêutrons nas células do reator deve ser realizada com bastante exatidão.

Visando reproduzir essa classe de problemas da área de ciência nuclear, esta seção trata de meios não-multiplicativos heterogêneos com espalhamento anisotrópico e fonte interna. Problemas de penetração profunda, caracterizados pela extensão de seus livres caminhos médios, são utilizados por representarem de maneira mais adequada as situações presentes em cálculos de blindagem.

O cálculo dos perfis do fluxo escalar de nêutrons em problemas de blindagem foi tratado de diferentes maneiras por uma série de pesquisadores. Tratamentos para resolver problemas em meios tridimensionais foram apresentados por Veselov (1967) através do método de harmonia esférica, e por Marchuk and Bel'skaya (1967) com equações conjugadas. Problemas bidimensionais foram estudados por Vargas et al. (2003) pelo mé-

todo de decomposição. Já problemas de blindagem unidimensionais, como os estudados nesta seção, foram apresentados por Wagner and Haghighat (1998) utilizando o método de Monte Carlo com uma função adjunta de ordenas discretas, por Giacomazzi (2000) através do método  $LTS_N$ , e por Santoro et al. (1988) através do método de ordenadas discretas.

Métodos experimentais para a investigação de blindagem radiativa foram aplicados em Avayev et al. (1967), onde o uso de traçadores radiativos foi explorado, e em Dulin et al. (1967), onde detectores de radiação foram utilizados.

As propriedades de blindagem dos materiais foram estudadas nos trabalhos de Elmahroug et al. (2013), que apresentaram um exame de resinas, e em Kaplan (1989), onde as propriedades do concreto são averiguadas.

À luz da severidade dos desastres nucleares, e da consequente importância dos cálculos de blindagem radioativa, essa seção foi realizada a fim de fornecer no método de ordenadas discretas analítico uma alternativa para o tratamento de problemas de blindagem.

## **4.5.2** Descrição dos problemas, resultados e discussão dos problemas heterogêneos com anisotropia linear e fonte interna constante.

Para a classe de problemas estudada nesta seção são consideradas condições prescritas conforme as Eqs. (3.36) e (3.37) na forma

$$\Psi_1(0,\mu_i) = F,$$
$$\Psi_M(a,-\mu_i) = G,$$

onde F e G correspondem, respectivamente, as condição de contorno à esquerda e à direita do domínio, para i = 1, ..., N.

A condição de interface entre os meios é dada pela Eq. (3.40)

$$\Psi_{\alpha}(x_{\alpha}, \pm \mu_i) = \Psi_{\alpha+1}(x_{\alpha}, \pm \mu_i)$$

para i = 1, ..., N e para  $\alpha = 1, ..., M - 1$ .

A fim de simular casos com potencial aplicação em blindagem radiativa em reatores nucleares, nesta seção são abordados dois problemas. No primeiro problema, o domínio é dividido em três camadas, enquanto no segundo é dividido em cinco.

Os parâmetros atribuídos ao Problema 27 são dados na Tabela 4.45.

Tabela 4.45:Parâmetros utilizados no Problema 27.									
Problema	$\sigma_t$	$\sigma_{s0}$	$\sigma_{s1}$	F	G	$[X_0, X_M]$	Ν	М	$Q_{\alpha}(x_i, \pm \mu_i)$
	1.00	0.97	0.00			[0.00, 15.00)			0
27	1.00	0.95	0.00	1.00	0.00	(15.00, 30.00)	50	3	0
	1.00	0.99	0.00			(30.00, 40.00]			1

A domínio deste problema pode ser visto na Figura 4.31.



Figura 4.31: Domínio do Problema 27.

Primeiro foi estudada a concordância dos resultados obtidos através do método ADO, que ser vista na Tabela 4.46, abaixo.

**Tabela 4.46:** Problema 27 - Convergência dos perfis do fluxo escalar computados pelo método ADO (este trabalho).

x	$S_2$	$S_4$	$S_6$	$S_8$
0.00	0.852605	0.852638	0.852638	0.852637
20.00	0.459243	0.481301	0.481703	0.481821
40.00	7.045806	7.086130	7.089433	7.090392

Quanto à concordância dos resultados do método ADO obtidos com diferentes valores de N, observou-se a fixação entre 1 e 5 dígitos significativos, em comparação ao perfil com N = 8. Em especial, salienta-se que a concordância pode ser melhorada com o aumento do número de termos na quadratura.

Em seguida, na Tabela 4.47, se realiza uma comparação entre diferentes métodos sob um esquema de quadratura  $S_8$ , com relação ao método ADO. Para tanto, utilizou-se o trabalho de Nunes and Barros (2009), para obtenção dos resultados com os métodos DD, Degrau e Degrau Característico .

**Tabela 4.47:** Problema 27 - Comparação entre diferentes métodos usando um esquema da quadratura  $S_8$ .

v						
х	DD	DD Degrau Degrau Característico				
0.00	0.852638	0.851075	0.850716	0.852637		
20.00	0.481766	0.512658	0.504515	0.481821		
40.00	7.090416	7.126999	7.245023	7.090392		

Em termos de concordância entre os resultados obtidos neste trabalho com os de Nunes and Barros (2009), o método ADO encontra-se mais próximo do método DD, com três à cinco dígitos significativos de concordância, e mais distante do método Degrau Característico, com no máximo duas casas decimais de concordância. Essas relações salientam a precisão do método utilizado neste trabalho.



A partir destes resultados foi gerada a Figura 4.32.

Figura 4.32: Perfil do fluxo escalar para o Problema 28.

Examinando a Tabela 4.46 e Figura 4.32, pode-se constatar que os resultados estão de acordo com a física do fenômeno conforme os parâmetros propostos.

Observa-se também que a fonte interna  $Q_3(x, \pm \mu_i) = 1$ , na região 3, causa maior impacto no fluxo escalar de nêutrons do que a fonte externa F = 1.00 em x = 0.0. Isto ocorre porque a fonte interna está presente em toda zona  $30.00 \le x \le 40.00$ , enquanto a fonte externa é pontual, residindo apenas em x = 0.00.

Além disso, deve-se salientar que o coeficiente de espalhamento isotrópico é maior na região 3 do que na região 1, o que também contribui para a diferença entre os valores do fluxo escalar entre essas zonas.

O Problema 28 tem como objetivo amparar um estudo do comportamento de algumas propriedades que governam o transporte de nêutrons. Os valores destes parâmetros constam na Tabela 4.48, enquanto a geometria do problema é ilustrada na Figura 4.33.

Problema	$\sigma_t$	$\sigma_{s0}$	$\sigma_{s1}$	F	G	$[X_0, X_M]$	Ν	Μ	$Q_{\alpha}(x,\pm\mu_i)$
		0.98	0.90			[0.00, 10.00)			0.00
		0.96	0.92			(10.00, 20.00)			1.00
28	1.00	0.94	0.94	1.00	0.00	(20.00, 30.00)	50	5	0.00
		0.92	0.96			(30.00, 40.00)			1.00
		0.90	0.98			(40.00, 50.00]			0.00

Tabela 4.48: Parâmetros utilizados no Problema 28.



Figura 4.33: Domínio do Problema 28.

Os resultados para este problema são apresentados na Tabela 4.49 e Figura 4.34.

 Tabela 4.49: Problema 28 - Convergência dos perfis do fluxo escalar de acordo com o método ADO (este trabalho)

x	$S_2$	$S_4$	$S_6$	$S_8$
0.00	1.866138	1.760767	1.752773	1.750319
10.00	10.939594	11.044818	11.050256	11.051874
20.00	9.789710	9.812068	9.813365	9.813713
30.00	7.146850	7.127936	7.128151	7.128202
40.00	5.038048	5.074692	5.075679	5.075948
50.00	0.721845	0.674190	0.668338	0.666519



Figura 4.34: Perfil do fluxo escalar para o Problema 28.

Antes de realizar uma análise deste problema, deve-se notar que o coeficiente de espalhamento isotrópico diminui da região 1 para a região 2 e assim por diante, enquanto que o coeficiente de anisotropia, por sua vez, aumenta. Também deve-se recordar que todas as regiões tem dimensões iguais, e que as fontes internas possuem a mesma intensidade  $Q_2(x, \pm \mu_i) = 1 = Q_4(x, \pm \mu_i)$ .

Deve-se notar, então, que o fluxo de nêutrons na região 2 é maior do que na região 4. Isso ocorre devido a duas razões: (i) o coeficiente de espalhamento isotrópico, que contribui para a magnitude do fluxo, é maior na região 2; (ii) o coeficiente de espalhamento anisotrópico é menor nesta seção, e este parâmetro tem o efeito de atenuar o fluxo nas regiões onde existe uma fonte geradora de nêutrons.

O efeito da anisotropia de atenuar a intensidade das fontes já havia sido constatado com fontes externas na discussão dos resultados de problemas anisotrópicos.

#### 4.6 Problemas de determinação do fator de desvantagem térmica

Esta seção também trata de problemas heterogêneos com anisotropia linear e fonte interna constante. No entanto, neste caso dá-se enfoque à domínios que representam células heterogêneas de combustível e moderador em reatores nucleares, e os cálculos são realizados tendo-se em vista a análise do fator de desvantagem térmica.

#### 4.6.1 Estado da arte sobre o cálculo do fator de desvantagem térmica

Na ciência de reatores nucleares, um dos problemas mais relevantes trata-se do cálculo do fator de desvantagem térmica, definido como a razão entre a média espacial e angular do fluxo de nêutrons no combustível e no moderador (Duderstadt and Hamilton, 1976).

Essa quantidade é importante não somente para o design de reatores heterogêneos, mas também para cálculos de criticalidade e avaliações de fluxo em reatores operacionais. Além disso, estudos sobre o comportamento deste fator em relação as dimensões do reator são atualmente muito relevantes, pois ainda não há concordância na literatura sobre se o fator de desvantagem decai monotonicamente com a diminuição da espessura do moderador (Fukai, 1966; Kobayashi, 1966; Pennington, 1964; Pomraning and Clark, 1963; Weiss and Stammler, 1964).

Neste contexto, muitos autores contribuíram para a física de reatores calculando o fator de desvantagens com diferentes abordagens. Weiss (1965) utilizou uma generalização no método ABH para calcular o fator de desvantagem em células de dois meios. Ferziger and Robinson (1965), através de expansões singulares de autofunções contidas no método de Case, calcularam o fator de desvantagem considerando um espalhamento puramente isotrópico. Em seguida, Bond and Siewert (1969) estenderam essa abordagem ao incluir efeitos de anisotropia com dois termos no moderador. Seguindo esse estudo, ainda através do método de Case, Eccleston and McCormick (1970) concluíram que um

segundo momento angular no núcleo de espalhamento influencia significantemente os resultados para o fator de desvantagem.

Posteriormente, no entanto, Laletin et al. (1974), empregando o método de Galerkin, alcançaram resultados diferentes, argumentando que não haveria a necessidade da inclusão de um segundo e mais elevado momento angular. Maiorino and Siewert (1980), aplicando o método  $F_N$ , também discordaram de Eccleston e McCormick em alguns casos testes. Por fim, continuando essa pesquisa através do método de expansão espacial, Abdallah et al. (1994) incluíram efeitos de anisotropia também no combustível.

Resultados experimentais para o fator de desvantagem foram obtidos por alguns autores, e podem ser encontrados no trabalho de Pennington (1964), onde diferentes elementos foram estudados, e no trabalho de Kobayashi (1966), onde são apresentados resultados para malhas de  $UO_2 - H_2O$  com células pequenas.

Por meio desta seção pretende-se oferecer uma alternativa capaz de alcançar soluções concisas com grande velocidade para o cálculo do fator de desvantagens em reatores com duas células. Procura-se, portanto, estudar a performance do método ADO, analisando sua viabilidade como opção para cálculos do fator de desvantagem térmica em reatores nucleares.

#### 4.6.2 Descrição dos problemas de determinação do fator de desvantagem térmica

As equações que definem os problemas estudados nesta seção são as Eqs. (3.8) e (3.9)

$$\mu_{i} \frac{d}{dx} \Psi_{\alpha}(x,\mu_{i}) + \sigma_{t,\alpha} \Psi_{\alpha}(x,\mu_{i}) = \frac{\sigma_{s0,\alpha}}{2} \sum_{k=1}^{N} w_{k} \left[ \Psi_{\alpha}(x,\mu_{k}) + \Psi_{\alpha}(x,-\mu_{k}) \right] + \frac{3}{2} \mu_{i} \sigma_{s1,\alpha} \sum_{k=1}^{N} \mu_{k} w_{k} \left[ \Psi_{\alpha}(x,\mu_{k}) - \Psi_{\alpha}(x,-\mu_{k}) \right] + Q_{\alpha}(x,\mu_{i})$$

$$-\mu_{i}\frac{d}{dx}\Psi_{\alpha}(x,-\mu_{i}) + \sigma_{t,\alpha}\Psi_{\alpha}(x,-\mu_{i}) = \frac{\sigma_{s0,\alpha}}{2}\sum_{k=1}^{N}w_{k}\left[\Psi_{\alpha}(x,\mu_{k}) + \Psi_{\alpha}(x,-\mu_{k})\right] - \frac{3}{2}\mu_{i}\sigma_{s1,\alpha}\sum_{k=1}^{N}\mu_{k}w_{k}\left[\Psi_{\alpha}(x,\mu_{k}) - \Psi_{\alpha}(x,-\mu_{k})\right] + Q_{\alpha}(x,-\mu_{i}),$$

para  $i, \ldots, N$  e  $\alpha = 1, \ldots, M$ ..

Contudo, para adequar a formulação deste trabalho com aquela utilizada pelos autores com os quais são realizadas comparações, é necessário considerar que

$$\sigma_{s0,\alpha} = \sigma_{t,\alpha} - \sigma_{a,\alpha},\tag{4.26}$$

$$\sigma_{s1,\alpha} = \frac{\beta_{\alpha}\sigma_{s0,\alpha}}{3},\tag{4.27}$$

para  $\alpha = 1, ..., M$ , onde  $\beta_{\alpha}$  representa o coeficiente de Legendre na expansão do núcleo de espalhamento, e  $\sigma_{a,\alpha}$  seria a reação de choque macroscópica de absorção na camada  $\alpha$ .

Nos problemas desta seção são consideradas condições de contorno reflexivas para os fluxos incidentes nas extremidades do domínio, dadas pelas Eqs. (3.38) e (3.39)

$$\Psi_1(x_0, \mu_i) = \Psi_1(x_0, -\mu_i),$$
  
$$\Psi_M(x_M, -\mu_i) = \Psi_M(x_M, \mu_i),$$

para i = 1, ..., N e  $\alpha = 1, ..., M$ , e entre os meios, é utilizada a condição de interface, Eq. (3.40)

$$\Psi_{\alpha}(x_{\alpha}, \pm \mu_i) = \Psi_{\alpha+1}(x_{\alpha}, \pm \mu_i) \tag{4.28}$$

para i = 1, ..., N e para  $\alpha = 1, ..., M - 1$ .

O domínio dos problemas desta seção são divididos em duas regiões: a primeira [0, a] ou  $(0 \le x \le a)$  representa o combustível; a segunda [a, b] ou  $(a \le x \le b)$ , representa o moderador. Na Figura 4.35, as células estudadas, com as regiões do combustível e do moderador, são ilustradas.

115

e



Figura 4.35: Ilustração das células de dois meios estudadas nesta seção.

O fator de desvantagem, cuja expressão é dada pela Eq. (3.55), será calculado de acordo com os parâmetros apresentados na Tabela 4.50.

Problema b Região β  $Q_{\alpha}(x, \pm \mu_i)$ Ν a  $\sigma_{t,\alpha}$  $\sigma_{a,\alpha}$ 0.717 0.00 0.00 Combustível 0.32 29 Variável Variável 80 Moderador 2.33 0.0195 Variável  $\sigma_{t,2}(1-\sigma_{s0,2}/\sigma_{t,2})$ Combustível 0.717 0.32 0.00 0.00 30 Variável Variável 80 Moderador 2.33 0.0195 0.60  $\sigma_{t,2}(1 - \sigma_{s0,2}/\sigma_{t,2})$ Combustível 0.717 0.32 0.00 0.00 31 0.30 Variável 80 Moderador 2.33 0.0195 0.60  $\sigma_{t,2}(1-\sigma_{s0,2}/\sigma_{t,2})$ Combustível 0.717 0.32 0.00 0.00 32 0.90 Variável 80 2.33 0.0195 0.60 Moderador  $\sigma_{t,2}(1-\sigma_{s0,2}/\sigma_{t,2})$ 

Tabela 4.50: Parâmetros usados na solução dos problemas propostos 29, 30, 31 e 32.

## 4.6.3 Resultados dos problemas de determinação do fator de desvantagem térmica e discussão.

#### 4.6.3.1 Validação e análise da anisotropia e do tamanho das células.

Em prol de validar os resultados obtidos para o fator de desvantagem apresentados nesta seção, assim como para fundamentar análises da influência da anisotropia e do tamanho das células no fator de desvantagem, construiu-se o Problema 29.

Os parâmetros utilizados na solução do Problema 29 visualizados na Tabela 4.51.

Problema	а	b	Região	$\sigma_{t, \alpha}$	$\sigma_{a, \alpha}$	β	$Q_{\alpha}(x,\pm\mu_i)$	N
29 Variável	N7 1/ 1	Combustível	0.717	0.32	0.00	0.00	80	
	variavei	ariável Variável	Moderador	2.33	0.0195	Variável	$\sigma_{t,2}(1-\sigma_{s0,2}/\sigma_{t,2})$	80

 Tabela 4.51: Parâmetros usados na solução do problema 29.

Observa-se que os resultados na resolução deste problema foram obtidos com 80 pontos na quadratura de Gauss Legendre, utilizando-se dupla precisão computacional. Além disso, em termos de concordância, os 4 dígitos significativos para o método ADO apresentados na Tabela 4.52, não se modificam a partir de N = 80, o que garante a confiabilidade dos resultados.

Os resultados para o Problema 29 estão presentes na Tabela 4.52.

Tabela 4.52:         Problema 29 - Resultados do fator de desvantagem:	análise do tamanho das células e do
coeficiente de anisotropia.	

		Célula 1	Célula 2	Célula 3	Célula 4
Modelo computacional		a = 0.10	a = 0.20	a = 0.30	a = 0.40
		b = 0.45	b = 0.90	b = 1.35	b = 1.80
Teoria P <sub>1</sub> (Bond and Siewert, 1969)		1.028	1.113	1.253	1.447
Método de Case (Bond and Siewert, 1969)		1.0978	1.2317	1.4077	1.6284
Aproximação espacial $P_1$ (Abdallah et al., 1994)		1.1033	1.2311	1.3870	1.5742
Método de Difusão Assintótica (Pomraning and Clark, 1963)		1.06	1.18	1.34	1.56
Método ABH modificado (Stroud and Secrest, 1966)	0.0	1.08	1.20	1.36	1.58
Método $S_8$ (Stroud and Secrest, 1966)		1.09	1.23	1.43	1.64
Teoria de transporte integral (Carlvik, 1967)		1.0979	1.2318	1.408	1.629
ADO - S <sub>80</sub>		1.0978	1.2317	1.4077	1.6284
Teoria $P_1$ (Bond and Siewert, 1969)		1027	1.110	1.245	1.433
Método de Case (Bond and Siewert, 1969)	0.1	1.0970	1.2283	1.4001	1.6151
Aproximação espacial $P_1$ (Abdallah et al., 1994)	0.1	1.1026	1.2285	1.3812	1.5638
ADO - S <sub>80</sub>		1.0970	1.2283	1.4001	1.6151
Teoria $P_1$ (Bond and Siewert, 1969)		1.026	1.103	1.230	1.407
Método de Case (Bond and Siewert, 1969)	0.2	1.0953	1.2215	1.3849	1.5885
Aproximação espacial $P_1$ (Abdallah et al., 1994)	0.5	1.1013	1.2233	1.3695	1.5431
ADO - S <sub>80</sub>		1.0953	1.2215	1.3849	1.5885
Teoria $P_1$ (Bond and Siewert, 1969)		1.023	1.093	1.207	1.366
Método de Case (Bond and Siewert, 1969)	0.6	1.0927	1.2113	1.3848	1.5884
Aproximação espacial $P_1$ (Abdallah et al., 1994)	0.0	1.0994	1.2156	1.3521	1.5121
ADO - S <sub>80</sub>		1.0927	1.2113	1.3621	1.5485
Teoria $P_1$ (Bond and Siewert, 1969)		1.021	1.082	1.184	1.326
Método de Case (Bond and Siewert, 1969)	0.0	1.0901	1.2010	1.3392	1.5083
Aproximação espacial $P_1$ (Abdallah et al., 1994)	0.9	1.0974	1.2078	1.3346	1.4810
ADO - S <sub>80</sub>		1.0901	1.2010	1.3392	1.5084
Teoria $P_1$ (Bond and Siewert, 1969)		-	1.1634.	-	1.3599
Método de Case (Bond and Siewert, 1969)	20	-	1.1114	-	1.3114
Aproximação espacial $P_1$ (Abdallah et al., 1994)	2.0	1.0903	1.1793	12706	1.3672
ADO - S <sub>80</sub>		1.0807	1.1634	1.2551	1.3599

As Figuras 4.36 à 4.39 representam os resultados para o fluxo escalares nas células 1, 2, 3 e 4, respectivamente.



Figura 4.36: Resultados para o fluxo escalar: célula 1.



Figura 4.37: Resultados para o fluxo escalar: célula 2.



Figura 4.38: Resultados para o fluxo escalar: célula 3.



Figura 4.39: Resultados para o fluxo escalar: célula 4.

Observa-se que o aumento do fator de anisotropia leva à uma ligeira diminuição do fluxo escalar na região do moderador ( $a \le x \le b$ ), onde se localiza a fonte interna de nêutrons ( $Q_2(x, \pm \mu_i)$ ). Este efeito está em concordância com as análises realizadas nos capítulos anteriores, onde constatou-se que a anisotropia atenua o fluxo escalar nas regiões onde há presença de uma fonte de nêutrons.

Na região do combustível ( $0 \le x \le a$ ), nota-se que o fator de anisotropia produz um efeito contrário, causando uma pequena amplificação do fluxo escalar. Este efeito também está de acordo com as conclusões efetuadas nos prévios capítulos, já que a anisotropia causa, ao longo do domínio, uma diminuição no decaimento dos nêutrons provindos da fonte.

Ambos efeitos resultam no achatamento dos perfis com maiores níveis de anisotropia para o fluxo escalar de nêutrons.

Com relação a célula 1, comprimento total da célula 2 equivale ao dobro; o da célula 3, ao triplo; e o da célula 4, ao quádruplo. Pode-se então observar que o aumento da dimensões das células causa uma intensificação nos efeitos da anisotropia nos perfis do fluxo escalar. Nota-se que a discrepância entre os resultados com diferentes níveis de anisotropia se amplia.

O comportamento do fator de desvantagem em relação à espessura do moderador e do combustível, e ao fator de anisotropia, pode ser analisado através da Figura 4.40. Nesta, os valores para o fator de desvantagem são dados para as quatro células, considerando diferentes magnitudes de anisotropia.



Figura 4.40: Resultados para o fator de desvantagem para diversos níveis de anisotropia.

Em primeiro lugar, na Figura 4.40 nota-se que a anisotropia causa uma redução no fator de desvantagem independentemente da dimensão das células. Isto ocorre porque a anisotropia causa o crescimento do fluxo no combustível e sua diminuição no moderador. A taxa de decaimento do fator de desvantagem, causada pelo efeito da anisotropia, é representada pela inclinação das linhas na Figura 4.40. Portanto, conclui-se que o aumento do comprimento das células resulta numa intensificação nos efeito da anisotropia sobre o fator de desvantagem, conforme observa-se que essa inclinação torna-se mais acentuada em células maiores.

Sobre os efeitos da dependência dimensional, com base nas Figuras 4.36 à 4.40, pode-se afirmar que um aumento nas regiões do combustível e moderador induz à diminuição do fluxo na região do combustível, e um crescimento do fluxo no moderador. O fator de desvantagem é definido como a razão entre o fluxo escalar de nêutrons nas regiões do moderador e combustível; portanto, aumenta de acordo com a ampliação das células, uma vez que o numerador dessa fração (fluxo no moderador) aumenta, e o denominador (fluxo no combustível) diminui.

Em resumo, conclui-se que: (i) a anisotropia causa uma redução no fator de desvantagem, (ii) o aumento das células causa a intensificação do efeito da anisotropia, e (iii) o crescimento das células causa um aumento no fator de desvantagem.

Isto significa que o aumento das células leva ao crescimento do fator de desvantagem, mas também ao aumento do efeito da anisotropia, cuja ação é diminuir esse fator.

Contudo, como o aumento das células levou à um aumento do fator de desvantagem em todos os casos estudados, se sobrepondo à intensificação no efeito da anisotropia, pode-se constatar que a influência do crescimento das dimensões é maior do que a influência da anisotropia.

Na subseção seguinte, será estudada a influência da espessura do combustível.

#### 4.6.3.2 Análise da espessura do combustível.

Para embasar um estudo da relação do fluxo escalar e do fator de desvantagem com a espessura do combustível, construiu-se o Problema 30. Neste contexto, as células analisadas contém espessuras do moderador iguais ((b - a) = 0.3 cm), enquanto a espessura da região do combustível é alterada. Os valores de *b* são modificados de forma à manter o comprimento do moderador constante.

Tabela 4.53: Parâmetros usados na solução do Problema 30.

Problema	а	b	Região	$\sigma_{t, \alpha}$	$\sigma_{a, \alpha}$	β	$Q_{lpha}(x,\pm\mu_i)$	N
30 Variável	Variánal	Variánal	Combustível	0.717	0.32	0.00	0.00	80
	variavei vari	Variavel Moderador	2.33	0.0195	0.60	$\sigma_{t,2}(1-\sigma_{s0,2}/\sigma_{t,2})$	80	

Os resultados obtidos na solução deste problema encontram-se na Tabela 4.54 e 4.55, enquanto a Figura 4.41 se embasa nos dados dessas tabelas.
$x_i$	a = 0.1	a = 0.2	a = 0.3	a = 0.4
1	0.151377	0.813214(-1)	0.551658(-1)	0.414381(-1)
2	0.151406	0.813569(-1)	0.552063(-1)	0.414829(-1)
3	0.151493	0.814641(-1)	0.553288(-1)	0.416184(-1)
4	0.151639	0.816452(-1)	0.555357(-1)	0.418474(-1)
5	0.151849	0.819042(-1)	0.558317(-1)	0.421752(-1)
6	0.152128	0.822474(-1)	0.562241(-1)	0.426100(-1)
7	0.152482	0.826848(-1)	0.567244(-1)	0.431650(-1)
8	0.152927	0.832324(-1)	0.573511(-1)	0.438609(-1)
9	0.153484	0.839183(-1)	0.581367(-1)	0.447345(-1)
10	0.154203	0.848034(-1)	0.591509(-1)	0.458643(-1)
11	0.155321	0.861746(-1)	0.607217(-1)	0.476175(-1)

 Tabela 4.54:
 Análise da espessura do combustível - Resultados para o fluxo escalar no combustível.

Tabela 4.55: Análise da espessura do combustível - Resultados para o fluxo escalar no moderador.

$x_i$	a = 0.1	a = 0.2	a = 0.3	a = 0.4
1	0.155321(-1)	0.861746(-1)	0.607217(-1)	0.476175(-1)
2	0.160654(-1)	0.903854(-1)	0.643595(-1)	0.509100(-1)
3	0.163153(-1)	0.926580(-1)	0.664539(-1)	0.528782(-1)
4	0.164867(-1)	0.943002(-1)	0.680088(-1)	0.543636(-1)
5	0.166144(-1)	0.955586(-1)	0.692198(-1)	0.555326(-1)
6	0.167120(-1)	0.965382(-1)	0.701726(-1)	0.564587(-1)
7	0.167864(-1)	0.972940(-1)	0.709132(-1)	0.571820(-1)
8	0.168415(-1)	0.978580(-1)	0.714685(-1)	0.577263(-1)
9	0.168796(-1)	0.982497(-1)	0.718554(-1)	0.581064(-1)
10	0.169019(-1)	0.984805(-1)	0.720839(-1)	0.583312(-1)
11	0.169093(-1)	0.985568(-1)	0.721595(-1)	0.584056(-1)



**Figura 4.41:** Análise da espessura do combustível - Resultados para o fluxo escalar no combustível e moderador.

A Figura 4.41 está subdivida em quatro imagens: Figura 4.41 a), Figura 4.41 b), Figura 4.41 c) e Figura 4.41 d). A diferença nas espessuras do combustível entre imagens contíguas é de 0.1cm, estando ordenadas de modo crescente quanto à essa dimensão.

A observação mais relevante refere-se à magnitude do fluxo escalar de nêutrons: diminui em ambas as regiões com o crescimento da espessura do combustível. Por outro lado, a diminuição do combustível leva à um aumento do fluxo em ambas regiões.

Este efeito ocorre porque a região do combustível não contém a fonte interna, e portanto apenas dispersa aos nêutrons oriundos da região do moderador. O fluxo angular do combustível na direção do moderador, consequentemente, também é diminuído devido a perda de nêutrons. Como efeito, a quantidade de nêutrons que adentram no moderador

provindos do combustível, é reduzida. Então, têm-se como resultado que o fluxo escalar no moderador também seja afetado pela espessura do combustível.

O fator de desvantagem, estando em função apenas do fluxo escalar de nêutrons e das medidas das regiões do domínio, pode sofrer modificações. A Figura 4.42 apresenta os valores para o fator de desvantagem segundo a espessura do combustível.



Figura 4.42: Resultados para o fator de desvantagem de acordo com a espessura do combustível.

Sobre a Figura 4.42, deve-se chegar à duas conclusões: (i) o fator de desvantagem aumenta com a ampliação da espessura do combustível, (ii) para a escala de comprimentos analisada, o crescimento desse coeficiente é monotônico. Analogamente, para essa escala de tamanhos, sabe-se que o fator de desvantagem decresce monotonicamente com a redução da espessura do combustível.

A explicação destas consequências é simples: o aumento do combustível sempre leva à redução do fluxo escalar em todos os pontos do meio (conforme concluído anteriormente), enquanto as formas geométricas dos perfis do fluxo escalar das células de diferentes comprimentos são equivalentes. Então, a média do fluxo no combustível sempre diminui mais do que a média do fluxo no moderador, isto porque a espessura do combustível aumenta, enquanto a do moderador permanece constante.

Para averiguar estas conclusões, deve-se observar a definição do fator de desvantagem. Assim, para facilitar a compreensão, a equação que descreve esse coeficiente no capítulo 3, a Eq. (3.54), é reescrita nesta seção como

$$\zeta = \frac{\frac{\int_{a}^{b} \phi_{2}(x)dx}{(b-a)}}{\frac{\int_{0}^{a} \phi_{1}(x)dx}{a}}.$$
(4.29)

Os resultados obtidos com o método ADO para os termos presentes nessa equação são dados na Tabela 3.54.

Tabela 4.56: Análise do moderador - Termos da Eq. (3.54), que expressa o fator de desvantagem.

a	(b-a)	$\int_0^a \phi_1(x) dx$	$\int_{a}^{b} \phi_2(x) dx$	$\frac{\int_a^b \phi_2(x) dx}{(b-a)}$	$\frac{\int_0^a \phi_1(x) dx}{a}$	ζ
0.1	0.3	0.015248	0.049772	0.165908	0.152482	1.088047
0.2	0.3	0.016537	0.028629	0.095429	0.082683	1.154148
0.3	0.3	0.017017	0.020744	0.069147	0.056724	1.219016
0.4	0.3	0.017267	0.016648	0.055494	0.043167	1.285563

Deve-se notar em primeiro lugar que *a* (comprimento do combustível) aumenta, enquanto (b - a) (comprimento do moderador) permanece constante.

O termo  $\int_0^a \phi_1(x) dx$  (fluxo total no combustível) aumenta. Isto ocorre porque o aumento do comprimento *a* compensa à diminuição de  $\phi_1(x)$  (fluxo em cada ponto *x* do combustível). O termo  $\frac{\int_0^a \phi_1(x) dx}{a}$  (fluxo médio nessa região) diminui porque *a* aumenta mais do que  $\int_0^a \phi_1(x) dx$ .

O termo  $\frac{\int_a^b \phi_2(x) dx}{(b-a)}$  (fluxo total no moderador) diminui, porque  $\phi_2(x)$  (fluxo em cada ponto x do moderador) é reduzido, mas (b-a) permanece constante. Dessa forma, o termo  $\frac{\int_a^b \phi_2(x) dx}{(b-a)}$  (média do fluxo no moderador) decresce porque o numerador da fração torna-se menor e o denominador se mantém igual.

O fluxo médio no combustível  $(\frac{\int_0^a \phi_1(x)dx}{a})$  sofre uma redução maior do que o fluxo médio no moderador  $(\frac{\int_a^b \phi_2(x)dx}{(b-a)})$ , porque a diminuição do fluxo total no moderador  $(\int_a^b \phi_2(x)dx)$ , e o crescimento do fluxo total no combustível  $(\int_0^a \phi_1(x)dx)$ , não são suficientes para compensar o aumento de *a*.

Uma análise física sobre a razão da variação do fator de desvantagem pode também ser realizada. Como a região do combustível não possui fonte interna, os fluxos escalares maiores ocorrem em posições mais próximas do moderador (que possui fonte interna), devido à dispersão dos nêutrons. Em decorrência disso, células com regiões do combustível maiores apresentam médias do fluxo escalar menores, porque os pontos extremos do combustível encontram-se mais distantes do moderador, de forma que para alcançá-los os nêutrons sofrem mais efeitos de dissipação. Por outro lado, o fluxo escalar no moderador é pouco afetado pelo aumento do combustível, e como a espessura dessa região não varia, sua média espacial reduz menos que a do combustível. O fator de desvantagem é definido como uma divisão entre a média espacial do fluxo no moderador e do combustível. Portanto esse fator aumenta conforme o denominador da fração diminui em relação ao numerador.

## 4.6.3.3 Análise da espessura do moderador.

Visando analisar à influência da espessura do moderador, sobre a qual existem aspectos sem consenso, ainda discutidos na literatura (i.e. se o decaimento do fator de desvantagem causado pela diminuição da espessura do moderador apresenta comportamento monotônico), construiu-se o Problema 31. Neste sentido, as células estudadas sustentam espessuras iguais na região do combustível, mas diferentes na região do moderador.

Problema	а	b	Região	$\sigma_{t,lpha}$	$\sigma_{a,lpha}$	β	$Q_{lpha}(x,\pm\mu_i)$	N
31	0.30 V	Maniferal	Combustível	0.717	0.32	0.00	0.00	80
		variavei	Moderador	2.33	0.0195	0.60	$\sigma_{t,2}(1-\sigma_{s0,2}/\sigma_{t,2})$	80

Tabela 4.57: Parâmetros do Problema 31.

$x_i$	b = 0.4	b = 0.5	b = 0.6	b = 0.7
1	0.191782(-1)	0.376098(-1)	0.551658(-1)	0.718564(-1)
2	0.191949(-1)	0.376390(-1)	0.552063(-1)	0.719076(-1)
3	0.192454(-1)	0.377272(-1)	0.553288(-1)	0.720621(-1)
4	0.193309(-1)	0.378763(-1)	0.555357(-1)	0.723231(-1)
5	0.194536(-1)	0.380898(-1)	0.558317(-1)	0.726962(-1)
6	0.196173(-1)	0.383733(-1)	0.562241(-1)	0.731905(-1)
7	0.198275(-1)	0.387355(-1)	0.567244(-1)	0.738200(-1)
8	0.200936(-1)	0.391903(-1)	0.573511(-1)	0.746076(-1)
9	0.204317(-1)	0.397624(-1)	0.581367(-1)	0.755932(-1)
10	0.208771(-1)	0.405049(-1)	0.591509(-1)	0.768624(-1)
11	0.215964(-1)	0.416671(-1)	0.607217(-1)	0.788177(-1)

Tabela 4.58: Análise da espessura do moderador - Resultados para o fluxo escalar no combustível.

Tabela 4.59: Análise da espessura do moderador - Resultados para o fluxo escalar no moderador.

$x_i$	b = 0.4	b = 0.5	b = 0.6	b = 0.7
1	0.215964(-1)	0.416671(-1)	0.607217(-1)	0.788177(-1)
2	0.223433(-1)	0.436746(-1)	0.643595(-1)	0.843733(-1)
3	0.228038(-1)	0.448655(-1)	0.664539(-1)	0.874996(-1)
4	0.231540(-1)	0.457578(-1)	0.680088(-1)	0.898095(-1)
5	0.234301(-1)	0.464554(-1)	0.692198(-1)	0.916077(-1)
6	0.236489(-1)	0.470051(-1)	0.701726(-1)	0.930239(-1)
7	0.238195(-1)	0.474325(-1)	0.709132(-1)	0.941263(-1)
8	0.239478(-1)	0.477529(-1)	0.714685(-1)	0.949543(-1)
9	0.240372(-1)	0.479760(-1)	0.718554(-1)	0.955319(-1)
10	0.240900(-1)	0.481078(-1)	0.720839(-1)	0.958734(-1)
11	0.241075(-1)	0.481514(-1)	0.721595(-1)	0.959864(-1)



**Figura 4.43:** Análise da espessura do moderador - Resultados para o fluxo escalar no combustível e no moderador.

A Figura 4.43 contém 4 divisões: Figura 4.43 a), Figura 4.43 b), Figura 4.43 c) e Figura 4.43 d). Em todas, a espessura do combustível corresponde à a = 0.3cm. O comprimento do moderador, contudo, varia 0.1 cm entre imagens consecutivas, que estão ordenadas de maneira crescente conforme essa dimensão.

A observação mais importante que deve ser realizada à respeito da Figura 4.43 é a seguinte: (i) o aumento do comprimento do moderador causa a amplificação do fluxo escalar de nêutrons. Este comportamento já estava previsto de acordo com a literatura sobre o tema.

A causa deste fenômeno é a localização da fonte interna de nêutrons, presente apenas na região do moderador. Assim sendo, essa zona caracteriza-se como a geradora do fluxo. De acordo com as propriedades estabelecidas para este problema, a fonte interna  $(Q_2(x, \pm \mu_i) = \sigma_{t,2}(1 - \sigma_{s0,2}/\sigma_{t,2}))$ , está intrinsecamente vinculada as seções de choque, ficando totalmente dependente das características do meio, e como a fonte interna é aplicada à toda região, conforme se aumenta esse comprimento, maior será sua contribuição.

Uma vez realizada essa análise, é possível estudar o comportamento da taxa em que o fator de desvantagem decaí com a diminuição da espessura do moderador. A Figura 4.42 serve para explorar esse fenômeno, e apresenta os valores para o fator de desvantagem de acordo com a espessura do moderador.



Figura 4.44: Resultados para o fator de desvantagem conforme a espessura do moderador.

Da Figura 4.44 deve-se notar primariamente dois aspectos: (i) o fator de desvantagem decai com a diminuição da espessura do moderador e (ii) esse decaimento tem comportamento monotônico para a faixa de comprimentos estudada até aqui. Essa conclusão já constituí uma contribuição significativa à literatura. O fator de desvantagem decai com a espessura do moderador principalmente devido à duas propriedades inerentes à este tipo de problema: (i) apenas o moderador contém uma fonte interna de nêutrons e (ii) são prescritas condições de contorno reflexivas à direita e esquerda do domínio, então os nêutrons não são perdidos por deixarem a região estudada nos contornos do problema e, ao invés disso, nestes pontos os nêutrons sofrem total reflexão.

Graças a estes fatores, a contribuição de nêutrons efetuada pela fonte interna tornase mais significativa com o aumento do domínio. A média espacial do fluxo escalar de nêutrons no moderador cresce com maior intensidade, distanciando-se em magnitude da média espacial do fluxo no combustível.

Assim, é importante notar que, para quaisquer tamanhos de célula, os pontos mais à direita do moderador devem apresentar maior magnitude no valor do fluxo escalar, já que são menos afetados pelo combustível. Isto acontece devido à condição reflexiva e a fonte interna. O aumento do comprimento do moderador intensifica esse efeito, tornando a variação no fluxo entre os pontos mais à direita e a esquerda do domínio gradativamente maior.

Deve-se observar ainda que com o crescimento da espessura, a distância entre os pontos do moderador mais afastados ao combustível também cresce. Então, devido as razões citadas, as maiores diferenças no fluxo se dão nesses pontos, caracterizados como as regiões mais extremas do combustível e do moderador.

Para compreender esses efeitos matematicamente, é interessante relembrar a Eq. (4.29), que determina o fator de desvantagem

$$\zeta = \frac{\frac{\int_a^b \phi_2(x)dx}{(b-a)}}{\frac{\int_0^a \phi_1(x)dx}{a}}.$$

Os valores calculados neste trabalho, para os termos dessa expressão, são dados na Tabela 4.60.

a	(b-a)	$\int_0^a \phi_1(x) dx$	$\int_{a}^{b} \phi_{2}(x) dx$	$\frac{\int_a^b \phi_2(x) dx}{b}$	$\frac{\int_0^a \phi_1(x) dx}{a}$	ζ
0.30	0.10	0.015248	0.005951	0.002342	0.050827	1.180753
0.30	0.20	0.016537	0.011622	0.009284	0.055122	1.198281
0.30	0.30	0.017017	0.017017	0.020744	0.056724	1.219016
0.30	0.40	0.017267	0.022145	0.036599	0.057556	1.239538

Tabela 4.60: Análise do moderador - Valor dos termos da Eq. (3.54), que expressa o fator de desvantagem.

Deve-se notar em primeiro lugar que *a* (comprimento do combustível) é mantido constante, enquanto (b-a) (comprimento do moderador) é progressivamente aumentado.

O termo  $\int_0^a \phi_1(x) dx$  (que representa o fluxo total no combustível) cresce porque  $\phi_1(x)$  (o fluxo escalar em cada ponto x do combustível) aumenta e a permanece constante. Desta forma,  $\frac{\int_0^a \phi_1(x) dx}{a}$  (a média espacial do fluxo no combustível) cresce porque o numerador da fração aumenta, enquanto o denominador permanece constante.

O termo  $\int_a^b \phi_2(x) dx$  (que corresponde ao fluxo total no moderador) aumenta, porque tanto  $\phi_2(x)$  (o fluxo em cada ponto x do moderador) como (b - a) aumentam. O termo  $\frac{\int_a^b \phi_2(x) dx}{(b-a)}$  (que representa a média do fluxo no moderador) também cresce, porque o aumento no numerador é superior ao crescimento no denominador da fração.

O fluxo médio no combustível  $(\frac{\int_0^a \phi_1(x)dx}{a})$  sofre um aumento menor do que o fluxo médio no moderador  $(\frac{\int_a^b \phi_2(x)dx}{(b-a)})$ , causando o aumento do fator de desvantagem. Isto ocorre porque a influência do crescimento do fluxo total no moderador  $(\int_a^b \phi_2(x)dx)$  é mais elevada do que a influência do aumento de (b-a) e do fluxo total no combustível  $(\int_0^a \phi_1(x)dx)$ .

Ademais, as conclusões retiradas no estudo do efeito da espessura do combustível também podem ser consideradas na análise deste caso, possuindo aqui valor complementar.

Ainda pode-se observar, comparando as Tabelas (4.56) e (4.60), que a diferença dos fluxos escalares médios entre as regiões do combustível e do moderador, ocasionada

pela variação de 0.1 cm na espessura do moderador, foi menor do que aquela causada pelo aumento no comprimento do combustível. Por esta razão, a variação do fator de desvantagem causada pelo crescimento da espessura do combustível deve ser maior do que aquela ocasionada pelo aumento da região do moderador.

Com base nessas considerações, deve-se realizar ainda outra observação importante: (iii) a taxa de decaimento do fator de desvantagem em decorrência da diminuição do comprimento do moderador é menos acentuada do que àquela causada pela diminuição da espessura do combustível.

A Figura 4.45 apresenta os valores para o fator de desvantagem de acordo com a espessura do moderador.



Figura 4.45: Resultados para o fator de desvantagem conforme a espessura das regiões.

Observa-se, com base na Figura 4.45, que a inclinação correspondente à taxa do decaimento no fator de desvantagem devido à diminuição do comprimento do combustível é mais elevada do que a taxa referente ao decaimento causado pela diminuição do moderador. Pode-se admitir, mediante esses resultados, que o comprimento do combustível é mais relevante ao fator de desvantagem do que o comprimento do moderador.

Em síntese, sobre a influência das dimensões no fator de desvantagem concluiu-se até aqui que: (i) o fator de desvantagem decai com a diminuição do comprimento das células; (ii) para a escala de tamanho das células estudadas aqui, o fator de desvantagem decai monotonicamente com a diminuição da espessura do combustível; (iii) para as faixas de comprimentos estudadas até aqui, este fator também decai monotonicamente com a diminuição da espessura do moderador; e (iv) a variação no comprimento do combustível apresenta maior impacto no fator de desvantagem.

Contudo, a faixa de comprimento das células estudadas até este momento é muito limitada para que se possa afirmar com rigor que o fator de desvantagem decai monotonicamente com a redução do moderador. Assim, se decidiu verificar as conclusões dos trabalhos de Weiss and Stammler (1964), e de Fukai (1961), na qual afirmam que deve existe um comprimento mínimo para o moderador, a partir do qual a redução leva à um aumento no fator de desvantagem.

Os resultados para o fator de desvantagem de (b-a) = 0.9 até (b-a) = 0.25, com N = 80, são dados na Tabela 4.61. Relembra-se que os demais parâmetros do Problema 31 estão dados na Tabela 4.57, dos quais se salienta que a = 0.3 cm.

(b-a)	ζ
0.90	1.334965
0.85	1.325809
0.80	1.316589
0.75	1.307299
0.70	1.297931
0.65	1.288477
0.60	1.278927
0.55	1.269270
0.50	1.259494
0.45	1.249587
0.40	1.239538
0.35	1.229343
0.30	1.219016
0.25	1.208608

**Tabela 4.61:** Valores para o fator de desvantagem de (b-a) = 0.9 cm até (b-a) = 0.25 cm, com N = 20

Até estes comprimentos, pode-se observar que o fator de desvantagem decai monotonicamente com a espessura do moderador. Contudo, o requisito de precisão se torna mais rigoroso com a necessidade de estudar valores mais baixos. Por isto, se considerou conveniente realizar um teste da independência dos resultados em relação à quantidade de termos na quadratura numérica (N). Esse estudo é fornecido na Tabela 4.62.

N	Tempo de processamento [s]	ζ
2	0.04	1.14166599567665
8	0.43	1.18076784890610
20	2.38	1.18075301237579
40	10.57	1.18075300845796
60	26.20	1.18075300796233
80	50.68	1.18075300793856
100	83.31	1.18075300788827
160	324.07	1.18075300777095
200	523.11	1.18075300801350
300	1440.27	1.18075300657345

**Tabela 4.62:** Valores para o fator de desvantagem com (b - a) = 0.1 cm

Na Tabela 4.62 pode-se constatar que a diferença entre os resultados obtidos com valores de N maiores do que 40 é muito pequena. Consequentemente, é possível concluir que a utilização destes parâmetros é suficiente para fornecer resultados confiáveis em termos de precisão. Assim, pôde-se priorizar ao tempo de processamento, e se decidiu continuar utilizando N = 80 (sustentando por meio deste valor uma razoável margem de segurança) para o cálculo do fator de desvantagem no Problema 31, para células de pequena espessura. Os tempos de processamento são relativos à um computador com processador Intel I5 com 8GB de RAM.

Os resultados para o fator de desvantagem de (b - a) = 0.2 cm até  $(b - a) = 10^{-7}$  cm, com N = 200, são dados na Tabela 4.63.

(b-a)	ζ
0.2000000	1.198281
0.1000000	1.180753
0.0900000	1.179814
0.0800000	1.179261
0.0700000	1.179251
0.0699000	1.179255
0.0695000	1.179269
0.0692500	1.179278
0.0690000	1.179289
0.0675000	1.179360
0.0650000	1.179522
0.0600000	1.180032
0.0500000	1.182015
0.0400000	1.185942
0.0100000	1.242444
0.0010000	1.415950
0.0001000	1.625925
0.0000100	1.735469
0.0000010	1.751256
0.0000001	1.782937

**Tabela 4.63:** Valores para o fator de desvantagem de (b - a) = 0.2 cm até  $(b - a) = 10^{-7}$  cm, com N = 80,

Nota-se que de (b - a) = 0.2 cm até (b - a) = 0.07 cm, o fator de desvantagem  $(\zeta)$  mantem o decaimento com a redução da espessura do moderador. No entanto, a partir de (b - a) = 0.0699, o fator de desvantagem começa a aumentar com a espessura do moderador. Isso significa que em algum valor entre 0.07 cm e 0.699 cm, o comportamento do fator de desvantagem se inverte, e consequentemente pode-se afirmar que o decaimento do fator de desvantagem com a diminuição da espessura do moderador não é monotônico para todos os casos. Essa conclusão coloca este trabalho em concordância com Weiss and

Stammler (1964), e Fukai (1961), e em oposição, entre outros, à Pomraning and Clark (1963). A dimensão onde ocorre a mudança do comportamento de  $\zeta$  foi obtida à partir de simulações teste.

O fator de desvantagem continua aumentando com a redução do moderador até (b - a) = 0.0000100cm (ou  $10^{-5}$ cm). Contudo, sofre uma diminuição entre  $10^{-5}$  e  $10^{-6}$ cm. Portanto, sabe-se que em algum ponto entre esses valores seu comportamento se altera novamente, e assim o fator volta a diminuir com a diminuição de (b - a). Em seguida, sofre um aumento entre  $(b - a) = 10^{-6}$  e  $10^{-7}$ cm, alterando seu comportamento ainda mais uma vez. A quantidade dessas inversões dentro da escala estudada indica que o comportamento do fator de desvantagem pode sofrer mais modificações em valores menores de (b - a).

Segundo Weiss and Stammler (1964), a razão matemática para a alteração do comportamento do fator de desvantagem é uma singularidade logarítmica negativa presente na primeira derivada do fator de desvantagem, definido no trabalho desses autores de acordo com o método  $P_N$ .

Para explicar esse comportamento de acordo com os resultados obtidos neste trabalho, a Eq. (4.30) foi reescrita como

$$\zeta = \frac{a}{b-a} \frac{\int_{a}^{b} \phi_{2}(x) dx}{\int_{0}^{a} \phi_{1}(x) dx}.$$
(4.30)

Pode-se ainda fazer que

$$T_1 = \frac{a}{b-a},\tag{4.31}$$

$$T_2 = \frac{\int_a^b \phi_2(x) dx}{\int_0^a \phi_1(x) dx},$$
(4.32)

para que se possa escrever o fator de desvantagem como

$$\zeta = T_1 T_2. \tag{4.33}$$

Os resultados obtidos neste trabalho para os termos desta expressão são dados na Tabela 4.64.

i	(b-a)	$T_{1,i}$	$T_{2,i}$	$\frac{T_{1,(i+1)}}{T_{1,i}}$	$\frac{T_{2,i}}{T_{2,(i+1)}}$	ζ
1	0.90	0.33333	0.35394	1.12500	1.179814	1.12553
2	0.80	0.37500	0.31447	1.14286	1.179261	1.14287
3	0.70	0.42857	0.27516	1.16667	1.179251	1.16589
4	0.60	0.50000	0.23601	1.20000	1.180032	1.19799
5	0.50	0.60000	0.19700	1.25000	1.182015	1.24586
6	0.40	0.75000	0.15813	1.33333	1.185942	1.32509
7	0.30	1.00000	0.11933	-	-	1.19332

**Tabela 4.64:** Análise do moderador - Valor dos termos da Eq. (4.30), com N = 80.

Pode-se observar na Tabela 4.64 que  $T_1$  aumenta, enquanto  $T_2$  decresce. Dessa maneira, a redução do moderador leva ao decaimento do fator de desvantagem, porque  $T_2$ diminui mais do que  $T_1$  cresce ( $\zeta = T_1T_2$ ), conforme pode ser observado pelas variações nos parâmetros  $\frac{T_{1,(i+1)}}{T_{1,i}}$  (crescimento de  $T_1$ ) e  $\frac{T_{2,i}}{T_{2,(i+1)}}$  (diminuição de  $T_2$ ). Contudo, é importante constatar que a diferença entre o crescimento de  $T_1$  e a diminuição de  $T_2$  torna-se cada vez menor conforme a espessura do moderador é reduzida. Pode-se concluir que quando  $T_1$  começar a crescer mais do que  $T_2$  diminui, o fator de desvantagem irá crescer com a diminuição da espessura do comprimento. Esse fenômeno ocorre quando (b - a)< 0.7 cm.

O estudo da dependência dimensional do fator de desvantagem, entretanto, ainda não está completo, pois se desconhece qual a proporção entre a espessura do combustível e moderador que fornece o menor valor para esse fator. Além disso, deve-se examinar se o comportamento do decrescimento do fator de desvantagem sofrerá uma mudança em células com dimensões diferentes das estudadas até aqui.

## 4.6.3.4 Análise da razão entre a espessura do moderador e do combustível.

Neste contexto, construiu-se o Problema 32, pelo qual pretende-se estudar diversas relações entre os comprimentos do combustível e moderador em células com tamanho total de 0.9 cm (b = 0.9 cm). Os graus de liberdade neste problema são formados pe-

las espessuras dessas regiões. As demais propriedades deste problema são iguais às do problemas anteriores.

Problema	а	b	Região	$\sigma_{t,\alpha}$	$\sigma_{a,\alpha}$	β	$Q_{\alpha}(x,\pm\mu_i)$	N
32	Variável (	Variával 0.00	Combustível	0.717	0.32	0.00	0.00	80
		Variável 0.9	0.90	Moderador	2.33	0.0195	0.60	$\sigma_{t,2}(1-\sigma_{s0,2}/\sigma_{t,2})$

Tabela 4.65: Parâmetros usados na solução do Problema 32.

Os resultados para o Problema 32 estão contidos nas Tabelas 4.66 e 4.67, e com base nestes resultados, realiza-se a Figura 4.46.

$x_i$	$\frac{(b-a)}{a} = 8$	$\frac{(b-a)}{a} = 5$	$\frac{(b-a)}{a} = 2$	$\frac{(b-a)}{a} = 1$
1	0.312480	0.222074	0.102744	0.537668(-1)
2	0.312536	0.222138	0.102815	0.538322(-1)
3	0.312708	0.222332	0.103028	0.540297(-1)
4	0.312997	0.222659	0.103388	0.543633(-1)
5	0.313410	0.223127	0.103903	0.548404(-1)
6	0.313958	0.223746	0.104584	0.554726(-1)
7	0.314656	0.224535	0.105451	0.562783(-1)
8	0.315529	0.225522	0.106534	0.572867(-1)
9	0.316623	0.226756	0.107887	0.585490(-1)
10	0.318034	0.228345	0.109624	0.601741(-1)
11	0.320222	0.230799	0.112287	0.626706(-1)

Tabela 4.66: Estudo de proporções - Resultados para o fluxo escalar no combustível.

$x_i$	$\frac{(b-a)}{2} = 8$	$\frac{(b-a)}{2} = 5$	$\frac{(b-a)}{2} = 2$	$\frac{(b-a)}{a} = 1$
	a	a	a – 0.112287	a = -
1	0.320222	0.230799	0.112287	0.020700(-1)
2	0.338508	0.246918	0.122324	0.684613(-1)
3	0.345957	0.254277	0.127800	0.719032(-1)
4	0.351118	0.259481	0.131843	0.745108(-1)
5	0.355061	0.263486	0.135006	0.765733(-1)
6	0.358156	0.266638	0.137512	0.782157(-1)
7	0.360572	0.269100	0.139474	0.795043(-1)
8	0.362394	0.270957	0.140955	0.804775(-1)
9	0.363669	0.272258	0.141992	0.811590(-1)
10	0.364425	0.273028	0.142607	0.815628(-1)
11	0.364676	0.273284	0.142810	0.816966(-1)

Tabela 4.67: Estudo de proporções - Resultados para o fluxo escalar no moderador.



Figura 4.46: Estudo de proporções - Resultados para o fluxo escalar no combustível e no moderador.

Observa-se que o fluxo escalar apresenta maior magnitude para maiores razões entre o comprimento do moderador em relação ao combustível  $\frac{(b-a)}{a}$ . Este comportamento

а	(b-a)	$\frac{(b-a)}{a}$	ζ
0.01	0.89	89/1	1.019783
0.10	0.80	8/1	1.126824
0.15	0.75	5/1	1.171713
0.30	0.60	2/1	1.278927
0.45	0.45	1/1	1.360008
0.60	0.30	1/2	1.427062
0.75	0.15	1/5	1.553460
0.80	0.10	1/8	1.505901
0.89	0.01	1/89	1.968111

Tabela 4.68: Fator de desvantagem de acordo com a relação dos comprimentos combustível/moderador.

ocorre devido à localização da fonte interna, que está presente apenas na região do mode-

rador.

Observa-se que o decaimento do fator de desvantagem, com a diminuição da espessura do moderador, para um célula com tamanho total de 0.9cm é monotônico para a escala estudada. Deve-se notar que isto aconteceu apesar de terem sido analisados comprimentos do moderador menores do que 0.699cm, onde ocorreu a inflexão no Problema 31. Isto acontece porque a tendência do fator de desvantagem ter seu comportamento alterado é maior em células menores, de acordo com Weiss and Stammler (1964).

Finalmente, pode-se afirmar que o fator de desvantagem é menor nas células com maiores razões entre o comprimento do moderador em relação à espessura do combustível  $\frac{(b-a)}{a}$ , para uma célula com b = 0.9cm, conforme os parâmetros propostos e dentro das escalar estudadas.

A razão deste comportamento é a seguinte: com a diminuição da distância entre os ponto mais extremos do combustível dos primeiros pontos do moderador, onde existe a fonte interna de nêutrons, o fluxo na região do combustível torna-se menos afetado pela dissipação de nêutrons. O caminho que os nêutrons percorrem nesta região é menor, portanto, menos reações que ocasionam perdas ocorrem. Assim, a média do fluxo no combustível aumenta mais do que a média do fluxo no moderador. Esse comportamento

também está de acordo com a conclusão de que o aumento do combustível tem mais influência sobre o fator de desvantagem. Como o aumento de ambos comprimentos causa um crescimento no fator de desvantagem, é interessante que a espessura à ser aumentada seja a que possui menos influência nesse fator.

Afirmar que o fator de desvantagem é menor nas células com menores razões  $\frac{(b-a)}{a}$  significa, dentro de casos semelhantes ao estudado, que é vantajoso em termos do fator de desvantagem que o comprimento do combustível seja o menor possível.

Nota-se, todavia, que o fator de desvantagem trata das média espaciais dos fluxos escalares, e não da quantidade de nêutrons total de nêutrons em uma região. Sob esta perspectiva, é importante notar que tanto o fluxo total no combustível  $(\int_0^a \phi_1(x)dx)$ , como no moderador  $(\int_a^b \phi_2(x)dx)$ , aumentam com o crescimento do comprimento do combustível.

Em vista disso, um estudo sobre a espessura ótima do combustível que fornece o menor fator de desvantagem e o maior fluxo total de nêutrons nessa região é bastante interessante.

## 5 CONCLUSÃO

Ao término deste trabalho, foi possível constatar que o Método ADO é uma excelente alternativa para o tratamento de problemas de transporte de partículas em meios homogêneos e heterogêneos com propriedades isotrópicos e anisotrópicas, em regime estacionário. Ressalta-se também que foi possível reproduzir com o método apresentado neste trabalho uma série de resultados existentes na literatura, obtidos por outras formulações, e produzir muitos outros resultados *benchmark* para a classe de problemas-teste abordados.

Entre as vantagens detectadas na utilização do Método ADO, pode-se destacar a versatilidade quanto à quadratura utilizada na descrição do termo integral de espalhamento, na qual, mesmo para um número pequeno de direções, conseguiu-se uma convergência nos perfis de fluxo escalar de até cinco dígitos dependendo do problema e parâmetros utilizados.

Levando-se em consideração que as soluções obtidas neste trabalho, para todos os problemas-teste analisados, são analíticas em termos da variável espacial e que os problemas de autovalores associados possuem um tamanho reduzido em comparação à outras formulações baseadas no método de ordenadas discretas tradicional, conclui-se que o método ADO é vantajoso em termos do custo computacional. A independência de vínculos com esquemas iterativos, de métodos de interpolação ou de malhas computacionais finas, também contribui para a rapidez de processamento.

A possibilidade de utilizar softwares de livre distribuição para implementar e desenvolver esta metodologia também contribuem para que o Método ADO seja economicamente viável e acessível à todos os níveis acadêmicos.

Quanto aos resultados obtidos, destaca-se a importância deste trabalho devido principalmente a sua contribuição à literatura quanto a análise individual das propriedades do meio. Nos problemas isotrópicos, percebeu-se que o coeficiente de espalhamento isotrópico é responsável pela amplitude dos fluxos escalares, onde observou-se que os perfis crescem conforme esse parâmetro aumenta. Em especial, quando este fator é elevado, pequenas variações são capazes de causar grandes alterações no fluxo escalar de nêutrons. Com relação à quadratura numérica, observou-se que a diferença entre os resultados obtidos foi menor do que 0.1%.

Sobre os problemas anisotrópicos, conclui-se os que o fator de anisotropia não influência os efeitos já atestados para a isotropia. Quanto à quadratura numérica, observouse que a anisotropia causa um aumento na dificuldade de convergência dos resultados. Com relação aos efeitos da anisotropia, observou-se que grandes valores deste fator causam uma grande diminuição do fluxo nas regiões próximas à fonte externa e uma dissipação menor de nêutrons ao longo do domínio, levando à um efeito de achatamento nos perfis do fluxo escalar. Constatou-se também que a influência deste fator cresce significativamente com sua magnitude.

Quanto ao problemas relativos ao coeficiente de albedo e fator de transmissão, neste trabalho concluiu-se que o aumento de  $\sigma_{s0}$  leva à maiores coeficientes de albedo, portanto uma maior porcentagem da radiação incidente é refletida. Com relação à influência do comprimento do domínio, se observa que os valores do coeficiente de albedo são mais altos para domínio maiores. Quanto ao fator de transmissão, notou-se que este apresenta comportamento contrário ao do albedo, sofrendo uma diminuição de acordo com o aumento de  $\sigma_{s0}$  e com a ampliação do meio.

Nos problemas de blindagem, onde se utilizou uma fonte interna de nêutrons, observouse que os resultados obtidos com o método ADO encontram-se mais próximos daqueles alcançados com o método DD fornecido por Nunes and Barros (2009). Concluiu-se também, à respeito do efeito da anisotropia, que da mesma forma que nos problemas onde se utilizava apenas fontes externas, esta causa uma atenuação da contribuição de fonte internas, diminuindo, à seguir, a taxa de decaimento do fluxo ao longo do domínio. Além destas, contribuições relevantes também foram fornecidas na seção dedicada ao cálculo do fator de desvantagem, construída à partir do modelo de transporte completo. Desta maneira, as observações feitas previamente contribuíram com a análise dos problemas desta seção.

Observou-se que o aumento do fator de anisotropia levou à diminuição do fluxo escalar na região do moderador, onde há a presença da fonte interna de nêutrons. Na região do combustível, notou-se que a anisotropia causou uma amplificação do fluxo escalar. Ambos efeitos resultaram no achatamento dos perfis com maiores níveis de anisotropia. Concluiu-se que o aumento das células do combustível e do moderador, causa uma intensificação nos efeitos da anisotropia sobre os perfis do fluxo escalar.

Quanto ao fator de desvantagem, concluiu-se que este coeficiente cresce de acordo com a ampliação das células. Observou-se que a anisotropia causa uma redução neste fator. Notou-se, além disso, que o crescimento das células também resulta numa intensificação no efeito da anisotropia, mas que, para os casos estudados, o impacto do aumento das células se sobrepõe ao efeito contrário causado pela anisotropia.

Sobre a dimensão da região do combustível, verificou-se que o fluxo escalar de nêutrons diminui com o aumento dessa região. Observou-se que a diminuição do fluxo causada sobre o combustível é mais intensa. Concluiu-se que o fator de desvantagem aumenta com a ampliação da espessura do combustível e que o crescimento desse coeficiente é monotônico para a faixa de comprimentos do moderador de a = 0.1 cm até a = 0.4 cm, em uma célula com (b - a) = 0.3 cm e os demais parâmetros conforme o Problema 31. Quanto a influência da região do moderador, observou-se que o aumento do comprimento dessa região causa a amplificação do fluxo escalar de nêutrons, e que esse crescimento é maior no moderador. Concluiu-se que o fator de desvantagem decai com a diminuição da espessura do moderador e que esse decaimento tem comportamento monotônico para a escala de comprimentos do moderador (b - a) na faixa de 0.1 à 0.4 cm. Observou-se que taxa de decaimento deste fator em decorrência da diminuição do comprimento do moderador é menos acentuada do que àquela causada pela diminuição da espessura do combustível, e assim foi deduzido que o comprimento do moderador exerce maior influência sobre o fator de desvantagem. Finalmente, verificou-se que o decaimento do fator de desvantagem não é monotônico para todos os casos. Determinou-se, nos problemas estudados, que uma redução no moderador para valores abaixo de 0.07 cm, causa o aumento do fator de desvantagem.

A quantidade de células estudadas neste trabalho, contudo, não foi suficiente para averiguar se o decrescimento do fator de desvantagem com a espessura do moderador sempre sofrerá uma mudança de comportamento à partir de uma espessura suficientemente pequena. Além disso, foi possível verificar que existem vários pontos de inflexão para o comportamento desse fator. Também não foram estudadas células muito grandes, ou com diferentes propriedades nucleares.

Concluiu-se, ainda, que o fator de desvantagem é menor nas células em que a proporção do moderador em relação ao combustível é maior, e que, em células maiores do que as estudadas anteriormente, o comportamento desse fator se manteve monotônico, mesmo em espessuras menores do que 0.07 cm. Entendeu-se que para obter-se menores fatores de desvantagem, dentro da escala de tamanho analisada, é interessante que o comprimento do combustível seja o menor possível.

Todas as conclusões à respeito do fator de desvantagem contribuem para a discussão científica deste tema, à que ainda se dedicam muitas pesquisas. Ademais, o caráter das análises pode ser considerado exclusivo a este trabalho, em vista das observações feitas e as razões fornecidas para cada uma delas.

Portanto, entende-se que os objetivos propostos para este trabalho foram alcançados com sucesso, considerando-se que foram obtidas soluções comparáveis com a literatura, uma série de resultados *benchmark* foi gerada, e que muitas conclusões fornecidas sobre o comportamento de diversos parâmetros caracterizam-se como contribuições à discussão científica, em especial aquelas sobre o fator de desvantagem, possuindo caráter único.

Como sugestão para continuação deste trabalho propõe-se que a formulação apresentada para o tratamento de problemas isotrópicos e anisotrópicos, com fonte interna e em meios heterogêneos, seja ampliada para envolver maiores graus de anisotropia. Além disso, propõe-se que outros parâmetros importantes na física de reatores nucleares sejam estudados, como o fator de utilização térmica, calculado à partir do fator de desvantagem térmica. Principalmente, se considera que uma análise do comportamento do decaimento do fator de desvantagem em relação à influência de diversas propriedades nucleares, diferentes tamanhos de células e proporções entre as regiões dessas, diferentes condições de contorno, e intensidade e tipos de fontes de nêutrons, seria de grande interesse científico.

## **Referências Bibliográficas**

- A.M. Abdallah, E.M. El-Sherbiny, and M. Sobhy. Calculation of the thermal utilization factor in a heterogeneous slab cell scattering neutrons anisotropically. *Proceedings of the Second Arab Conference on the Peaceful Uses of Atomic Energy*, vol. 1:pp. 65–75, 1994.
- M.P. Abreu. A discrete ordinates scheme for void fraction evaluation with nonstandard reflective conditions and weakly divergent beams. *Kerntchnik*, vol. 74:pp. 55–59, 2009.
- Z. Altac. *The SK(N) approximation: a new method for solving integral transport equations.* PhD thesis, Iowa State University, Iowa, 1989.
- P. Armstrong, D. Ireson, B. Chmela, K. Doods, C. Esmeroy, D. Miller, B. Hornby, C. Sayers, M. Schoenberg, S. Leaney, and H. Lynn H. The promise of elastic anisotropy. vol. 6(no. 4):pp. 26–47, 1984.
- V.N. Avayev, Ye.V Voskresenskiy, Yu.A. Yegorov, and Yu.V. Orlov. Application of radioactive tracers in the investigation of shielding. Technical Report NASA TTF-411, NASA, Washington, DC, 1967.
- Y.Y. Azmy. The weighted diamond-difference form of nodal transport methods. *Nuclear Science and Engineering*, vol. 98:pp. 29–40, 1988.
- A. Badruzzaman. Performance of three-dimensional nodal discrete ordinates methods. *Progress in Nuclear Energy*, vol. 18,:pp. 137–144, 1986.
- L.B. Barichello. Formulação analítica para soluções do problema de ordenada discreta unidimensional. PhD thesis, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, 1992.
- L.B. Barichello. Explicit formulations for radiative transfer problems. in: Thermal measurements and inverse techniques (h. r. b. orlande; o. fudyin; d. maillet; r. m. cotta). *CRC Press*, 2011.

- L.B. Barichello and C.E. Siewert. A discrete-ordinates solution for a nongrey model with complete frequency redistribution. *JQSRT*, vol. 62:pp.645–675, 1999.
- L.B. Barichello, R.D.M. Garcia, and C.E. Siewert. Particular solution for the discreteordinates method. *JQSRT*, vol. 64:pp.219–226, 2000.
- L.B. Barichello, M. Camargo, P. Rodrigues, and C.E. Siewert. Unified solutions to classical flow problems based on the bgk model. *Z. Angew. Math. Phys.*, vol. 52:pp.517–534, 2001.
- L.B. Barichello, L.C. Cabrera, and J.F. Prolo Filho. An analytical discrete ordinates solution for two dimensional problems based on nodal schemes. *International Nuclear Atlantic Conferente*, 2009.
- L.B. Barichello, L.C. Cabrera, and J.F. Prolo Filho. An analytical approach for a nodal scheme of two-dimensional neutron transport problems. *Annals of Nuclear Energy*, vol. 38:pp. 1310–1317, 2011.
- G.A. Barron-Gafford, R.L. Minor, N.A. Allen, A.D. Cronin, A.E. Brooks, and M.A. Pavao-Zuckerman. The photovoltaic heat island effect: Larger solar power plants increase local temperatures. *Scientific Reports*, vol. 6, 2016.
- R.C. Barros and E.W. Larsen. A numerical method for one-group slab-geometry discrete ordinates problems with no spatial truncation error. *Nuclear Science Engineering*, vol. 104:pp. 199–208, 1990.
- R.C. Barros and E.W. Larsen. A spectral nodal method for one-group x,y geometry discrete ordinates problems. *Nuclear Science and Engineering*, vol. 111:pp. 34–35, 1992.
- R.C. Barros, F.C. da Silva, and H. Alves Filho. Recent advances in spectral nodal methods for x,y-geometry discrete ordinates deep penetration and eigenvalue problems. *Progress in Nuclear Energy*, vol. 35:pp. 229–331, 1999.

- R.C. Barros, H. Alves Filho, F.C. Silva, C.G. Hernandez, E.T.V. Orellana, N. Couto, and D.S. Dominguez. The application of spectral nodal methods to discrete ordinates and diffusion problems in cartesian geometry for neutron multiplying systems. *Progress in Nuclear Energy*, vol. 42:pp. 385–426, 2003.
- M.Z. Beckmann, G.R.B. Duarte, V.A. De Paula, M.E.G. Mendez, and R.B.M. Peil. Radiação solar em ambiente protegido cultivado com tomateiro nas estações verão-outono do rio grande do sul. *Ciência Rural*, vol. 26:pp. 86–92, 2006.
- G.L. Bell and S. Glasstone. *Nuclear Reactor Theory*. Litton Educational Publishing, New York, 1970.
- I. Bianchi. Velocity structure and seismic anisotropy in the crust and upper mantle from Receiver Function analysis: three case studies in Italy. PhD thesis, Programa de Pós-Doutorado em Geofísica, Universita Degli Studi Di Bologna, Bologna, Itália, 2010.
- G.R. Bond and C.E. Siewert. Effect of linearly anisotropic neutrons scattering on disavantage factor calculations. *Nuclear Science And Engineering*, vol. 35:pp. 277–282, 1969.
- L.C. Cabrera. Solução espectral para modelos bidimensionais da equação linear de Boltzmann. PhD thesis, Programa de Pós-Graduação em Matemática, UFRGS, Porto Alegre, 2009.
- L.C. Cabrera and L.B. Barichello. Unified solutions to some classical problems in rarefied gas dynamics based on the one-dimensional linearized smodel equations. *Z. Angew. Math. Phys.*, vol. 57:pp. 285–312, 2006.
- W.D. Callister. *Materials Science and Engineering*. John Wiley and Sons, New York, 2007.
- M. Camargo. Soluções unificadas para modelos com frequência de colisão variável da dinâmica de gases rarefeitos. PhD thesis, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, 2003.

- I. Carlvik. Calculations of neutron flux distributions by means of integral transport methods. Technical Report AE-279, Aktiebolaget Atomenergi, Stockholm, Sweden, 1967.
- K.M Case and P.F. Zweifel. Linear transport theory. Addison Wesley Reading, 1967.
- C. Ceolin, T.M. Vilhena, S.B. Leite, and C.Z. Petersen. Analytical solution of the onedimensional neutron diffusion equation in cartesian geometry. *International Nuclear Atlantic Conference*, 2009.
- C. Cercignani. *Theory and application of the Boltzmann equation*. Elsevier, New York, 1975.
- C. Cercignani. Mathematical methods in kinetic theory. Plenum Press, New York, 1990.
- C. Cercignani, R. Illner, and M. Pulvirenti. *The mathematical theory of diluted gases*. Springer, New York, 1994.
- S. Chandrasekhar. Radiative Transfer. Oxford University Press, London, 1950.
- A.X. Chen, A.J. Antolak, and K.N. Leung. Electronic neutron sources for compensated porosity well logging. *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research A*, vol. 684:pp. 52–56, 2012.
- B. Comby. Environmentalists for Nuclear Energy. TNR Editions, 2001.
- V.C. Damaso and R.G. Cabral. Método de albedo a um grupo de energia aplicado à blindagem de radiação gama. *Revista Militar de Ciência e Tecnologia*, vol. 17:pp. 5–15, 2000.
- J. Deutch. The future of nuclear power an interdisciplinary mit report. Technical report, Massachusetts Institute of Technology, 2003.
- A. Doicu and T. Trautmann. Discrete-ordinate method with matrix exponential for a pseudo-spherical atmosphere: scalar case. *JQSRT*, vol. 110:pp.146–158, 2009.

- D. S. Dominguez, C. R. G. Hernandez, and R. C. Barros. Spectral nodal method for numerically solving two-energy group x, y geometry neutron diffusion eigenvalue. *Journal of Nuclear Energy Science and Technology*, vol. 5:pp. 66–79, 2010a.
- D. S. Dominguez, F. B. S. Oliveira, H. Alves Filho, and R. C Barros. Composite spatial grid spectral nodal method for one-speed discrete ordinates deep penetration problems in x, y geometry. *Progress in Nuclear Energy*, vol. 52:pp. 298–303, 2010b.
- D.S. Dominguez. Método espectro-nodal linear para problemas de transporte de neutrons na formulação de ordenadas discretas em geometria bidimensional cartesiana.
  PhD thesis, Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional, UERJ, Rio de Janeiro, 2006.
- D.S. Dominguez, Iglesias, and R.C. Barros. Reconstrucao analitica intronodal do fluxo escalar de neutrons com o metodo espectro-nodal constante. *International Nuclear Atlantic Conference*, 2005.
- J. J. Dongarra, J. R. Bunch, C. B. Moler, and G. W. Stewart. *LINPACK, User's guide*. SIAM, Philadelphia, 1979.
- J.J. Duderstadt. Transport Theory. John Wiley, New York, 1979.
- J.J. Duderstadt and L.J. Hamilton. *Nuclear Reactor Analisys*. John Wiley and Sons Inc, New York, 1976.
- V. A. Dulin, Yu. A. Kazanskiy, and Ye. S. Matusevich. Experimental methods of investigating shielding (radiation detectors). Technical Report NASA TTF-411, NASA, Washington DC, 1967.
- G.W. Eccleston and N.J. McCormick. One-speed transport disadvantage factor calculations for general anisotropic scattering. *Journal of Nuclear Energy*, vol. 24(1):pp. 23–34, 1970.

- Y. Elmahroug, B. Telili, and C. Souga. Calculation of gamma and neutron shielding parameters for some materials polyethylene-based. *International Journal of Physics* and Research (IJPR), vol. 2:pp. 22–40, 2013.
- G.V. Enyde. *Neutron Transport with Anisotropic Scattering Theory and Applications*. PhD thesis, ULB, 2005.
- R. Fattal. Participating media illumination using light propagation maps. *ACM Transactions on Graphics (TOG)*, vol. 28, 2009.
- Y. Feng, R.J. Okamoto, R. Namani, G. M. Genin, and P. V. Baylya. Measurements of mechanical anisotropy in brain tissue and implications for transversely isotropic material models of white matter. *J Mech Behav Biomed Mater.*, vol. 23:pp. 117–132, 2013.
- J. Ferziger and A. Robinson. A transport theoretic calculation of the disadvantage factor. *Nuclear Science and Engineering*, vol. 21(no. 3):pp. 382–389, 1965.
- J.F. Prolo Filho. A equação de botzmann e a modelagem de fluidos em micro e macroescalas. Master's thesis, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), Porto Alegre, 2007.
- J.F. Prolo Filho. Abordagens Espectronodais para Modelos Multidimensionais em Transporte de Partículas. PhD thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), Porto Alegre, 2011.
- W. Friedland and P. Kundrát. Modeling of radiation effects in cells and tissues. Comprehensive Biomedical Physics, vol. 9:pp. 105–142, 2014.
- Y. Fukai. A comparison of some one-velocity transport approximations in lattices. Technical Report BNL 669(T-222), Brookhaven National Laboratory, 1961.
- Y. Fukai. On the disadvantage factor in a closely packed cylindrical lattice. *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 3(no. 4):pp. 165–168, 1966.

- R.D.M. Garcia. Métodos para solução da equação de transporte de partículas integrodiferencial. Escola de Versão em Teoria de Transporte de Partículas Neutras, PUC, 2002.
- R.D.M. Garcia and C.E. Siewert. The mccormack model for gas mixtures: Heat transfer in a plane channer. *Physics of Fluids*, vol. 16:pp. 3393–3402, 2004.
- R.D.M. Garcia and C.E. Siewert. The linearized boltzmann equation: sound-wave propagation in a rarefied gas. Z. Angew. Math. Phys., vol. 57:pp. 94–112, 2006.
- R.D.M. Garcia, C.E. Siewert, and A.M. Yacout. Radiative transfer in a multi-layer medium subject to fresnel boundary and interface conditions and uniform illumination by obliquely incident parallel rays. *JQSRT*, vol. 109:pp. 2151–2170, 2008.
- E.T.P. Giacomazzi. Cálculo de dose absorvida em blindagens múltiplas, devido a nêutrons monoenergéticos, usando o método ltsn. Master's thesis, UFRGS, Porto Alegre, Brasil, 2000.
- S. Golub. Nuclear energy: Past, present and future. Technical report, U.S. Department of Energy, Purdue University, 2014.
- M. Gonzales, C.G. Fernandez, and P. Velarde. 2d numerical comparison between sn and m1 radiation transport methods. *Annals of Nuclear Energy*, vol. 36:pp. 886–895, 2009.
- E.P. Gross and E.A. Jackson. Kinetic models and the linear boltzmann equation. *The Physics of Fluids*, vol. 2:pp. 432–441, 1959.
- L.S. Guimaraes and J.R.L. de Mattos. A opção nuclear para contribuir com uma produção limpa e sustentável de eletricidade. *3a International Workshop of Advances in Cleaner Production*, 2011.
- M. Gunay, B. Sarer, and A. H. Cerliogullari. Three-dimensional monte carlo calculation of gas production in structural material of apex reactor for some evaluated data file. *Annals of Nuclear Energy*, vol. 55:pp. 292–296, 2013.

- T. Y. Han, H. G. Joo, H. C. Lee, and C. H. Kim. Multi-group unified nodal method with two-group coarse-mesh finite difference formulation. *Annals of Nuclear Energy*, vol. 35:pp. 1975–1985, 2008.
- W. H. Hayt and J.A. Buck. *Eletromagnetismo*. The McGraw-Hill Companies, New York, 2013.
- K. Helbig. Layer-induced elastic anisotropy part 1: forward relations between constituent parameters and compound medium parameters. *Revista Brasileira de Geofísica*, vol. 16:pp., 1998.
- J. Hennart and E. Valle. Nodal finite element approximations for the neutron transport equations. *Mathematics and Computers in Simulation*, vol. 80:pp. 2168–2176, 2010.
- D.G. Hernández and J.A. Cruzate. Transmission factors for the neutrons from some radioisotope production reactions for pet. *International congress on radiation protection*. *Proceedings*, vol. 4:pp. 571–573, 1996.
- R.C. Hibbeler. Resistência dos materiais. Pearson Prentice Hall, São Paulo, 2010.
- B.X. Hu, Y.W. Wu, W.X. Tian, G.H. Su, and S.Z. Qiu. Development of a transient thermal-hydraulic code for analysis of china demonstration fast reactor. *Annals of Nuclear Energy*, vol. 55:pp. 302–311, 2013.
- B. Hunter and Z. Guo. Dependence of numerical smearing and ray effect in discrete ordinates method. *Proceedings of CHT-15 ICHMT International Symposium on Advances in Computational Heat Transfer*, 2015.
- H.A. Jakobsen. *Chemical Reactor Modeling*. Springer International Publishing, Switzerland, 2014.
- T. Jevremovic. Nuclear principles in Engineering. Springer Science and Busness Media, Nova York, 2005.

- S. Jin, M. Tang, and H. Han. On a uniformly second order numerical method for the onedimensional discrete-ordinate transport equation and its diffusion limit with interface. *University of Wisconsin*, 2010.
- H.T. Ju, H.C. Wu, Y.Q. Zhou, L. Z. Cao, D. Yao, and C.Y. Xian. A least squares finiteelement sn method for solving first-order neutron transport equation. *Nuclear Engineering and Design*, vol. 237:pp. 823–829, 2007.
- M.F. Kaplan. *Concrete radiation shielding: nuclear physics, concrete properties, design and construction.* Longman Scientific and Technical, London, 1989.
- R.F. Knackfuss. Efeitos de superfície na dinâmica de gases rarefeitos: uma análise baseada no núcleo de espalhamento de Cercignani-Lampis. PhD thesis, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, UFRGS, Porto Alegre, 2005.
- R.F. Knackfuss and L.B. Barichello. On the temperature-jump problem in rarefied gas dynamics: The effect of the cercignani-lampis boundary condition. *Siam J. Appl. Math.*, vol. 66:pp. 2149–2186, 2006.
- S. Kobayashi. Measurement and analysis of thermal disadvantage factor for uo2-h20 lattices. *Journal of Nuclear Science and Technology*, vol. 3:pp. 363–372, 1966.
- K.D. Kok. Nuclear Engineer Handboook. CRC Press, New York, 2009.
- N.I. Laletin, N.V. Sultanov, Yu.A. Vlasov, and S.I. Koniaev. The effect of the anisotropic scattering on the thermal utilization factor. *Annals of Nuclear Science and Engineering*, vol. 1(no. 5):pp. 333–338, 1974.
- A.L.C. Leal. Método analítico de aproximação polinomial para problemas de ordenas discretas em geometria cartesiana unidimensional. Master's thesis, Instituto de Engenharia Nuclear, Rio de Janeiro, 2008.
- M.R. Leitao, H. Alves Filho, and R.C. Barros. Análise espectral das equações de transporte de nêutrons na formulação das equações de transporte de nêutrons na formulação

de ordenadas discretas em meios multiplicativos e geometria unidimensional. XVII Encontro de Modelagem Computacional, 2014.

- E. Lewis, W. Miller, and T.P. Henry. A two-dimensional finite element method for integral neutron transport calculations. *Nuclear Science and Engineering*, vol. 58:pp. 203–212, 1975.
- A. Liddle. An Introduction to Modern Cosmology. John Wiley and Sons, Chichester, 2003.
- S.K. Loyalka and K.A. Hickey. Plane poiseuille flow: near continuum results for a rigid sphere gas. *Physica A*, vol. 160:pp. 395–408, 1989.
- J.R. Maiorino and C.E. Siewert. On multi-media calculations in the theory of neutron diffusion. *Annals of Nuclear Energy*, vol. 7:pp. 535–539, 1980.
- A. Mallama. The magnitude and albedo of mars. vol. 192:pp. 404–416, 2007.
- G.I. Marchuk and Z.N. Bel'skaya. Application of conjugate equations to the calculation of radiation shielding. Technical Report NASA TTF-411, NASA, Washington DC, 1967.
- J.B. Martins. A história da energia nuclear. Technical report, Comissão nacional de energia nuclear (CNEN), Rio de Janeiro, 2014.
- K.S. Mendelson and M.H. Cohen. The effect of grain anisotropy on the electrical properties of sedimentary rocks. *GEOPHYSICS*, vol. 47:pp. 257–263, 1982.
- S. Merk. The macroscopic equations for simultaneous heat and mass transfer in isotropic, continuous and closed systems. *Applied Scientific Research*, vol. 8:pp. 73–99, 1959.
- B.T. Mervin, S.W. Mosher, J. C. Wagner, and G. I. Maldonado. Uncertainty underprediction in monte carlo eigenvalue calculations. *Nuclear Science and Engineering*, vol. 3: pp. 276–292, 2013.
- J.R. Mika. Neutron transport with anisotropic scattering. *Nuclear Science and Engineering*, vol. 11:pp. 415–427, 1961.
- S.C. Mishra, M.Y. Kim, and S. Maruyama. Performance evaluation of four radiative transfer methods in solving multi-dimensional radiation and/or conduction heat transfer problems. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, vol. 55:pp. 5819–5835, 2012.
- NEA. Risks and benefits of nuclear energy. Technical report, OECD, Paris, 2007.
- A.J. Silva Neto and N.C. Roberty. Uma comparação do método de ordenadas discretas com outras técnicas para a solução da equação de transporte unidimensional. VII Congresso Brasileiro de Engenharia e Ciências Térmicas, vol. 2:pp. 878–883, 1998a.
- A.J. Silva Neto and N.C. Roberty. A abordagem fonte-detetor na solução de problemas inversos em meios participantes. Anais do V Congresso de Engenharia Mecânica Norte-Nordeste, vol. 3:pp. 340–347, 1998b.
- A.J. Silva Neto and N.C. Roberty. A modelagem da tomografia com espalhamento como um problema inverso. Anais do IV Fórum Nacional de Ciência e Tecnologia em Saúde, vol.:pp. 317–318, 1998c.
- A.J. Silva Neto and N.C. Roberty. Uso da solução de problemas inversos no projeto e desenvolvimento de equipamentos para engenharia e medicina. *Anais do VII Congresso Geral de Energia Nuclear*, 1999.
- F.D.M. Neto and A.J.S. Neto. Solução da equação de transporte unidimensional com separação do operador e com fator integrante. XV Congresso Brasileiro de Engenharia Mecânica, 1999.
- W.F.P. Neto. Determinação da distribuição do fluxo de nêutrons heterogêneo em elemento combustível de um reator nucelar utilizando Support Vector Regression (SVR). PhD thesis, Programa de Engenharia Nuclear, Universidade Federal do Rio de Janeiro -UFRJ, Rio de Janeiro, 2016.

- C.E.A. Nunes and R.C. Barros. Aplicativo computacional para cálculos de blindagem com modelo de transporte sn unidimensional e monoenergético. *International Nuclear Atlantic Conference*, 2009.
- F.B.S. Oliveira. Inverse problem of approximate analytical reconstruction of transport equation solution of neutral particles in one-dimensional Cartesian geometry with isotropic scattering. PhD thesis, UERJ, Rio de Janeiro, 2007.
- G. Oliveira, E.C. Moraes, Y.E. Shimabukuro, B.F.T. Rudorff, R.C.S. Alvalá, and T.V. Dos Santos. Avaliação do albedo em diferentes tipos de uso e cobertura da terra no sudoeste da amazônia. *Anais XVI Simpósio Brasileiro de Sensoriamento Remoto - SBSR*, 2013.
- M.N. Ozisik. Heat conduction. John Wiley and Sons, New York, 1993.
- W.C. Patterson. Nuclear Power. Pinguin Books, Middlesex, 1986.
- C.B. Pazinatto. Formulação ado para o problema adjunto de transporte unidimensional e aplicação em um problema inverso de reconstrução de fonte. Master's thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS), Porto Alegre, 2011.
- E.M. Pennington. Collision probabilities in cylindrical lattices. Nuclear Science and Engineering, vol. 19(no. 2):pp. 215–220, 1964.
- G.C. Pomraning and M. Clark. A new asymptotic diffusion theory. *Nuclear Science and Engineering*, vol. 17(no. 2):pp. 227–233, 1963.
- M. Roos. Introduction to cosmology. John Wiley and Sons, Chichester, 2003.
- B.E.A. Saleh and M.C. Teich. *Fundamentals of Photonics*. John Wiley and Sons, New York, 2011.
- R.T. Santoro, W.K. Dagenhart, and J.M. Barnes. One-dimensional sn calculations to evaluate the shielding for an alpha-particle charge exchange neutral analyzer. Technical Report ORNL/TM-10648, Oak Ridge National Laboratory, 1988.

- C.S. Scherer. Modelos cinéticos da equação linearizada de boltzmann em um problema de transferência de calor em microescala. Master's thesis, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, UFRGS, Porto Alegre, 2005.
- C.S. Scherer, J.F. Prolo Filho, and L.B. Barichello. An analytical approach to the unified solution of kinetic equations in rarefied gas dynamics.i. flow problems. *Z. Angew. Math. Phys.*, vol. 60:pp. 70–115, 2009a.
- C.S. Scherer, J.F. Prolo Filho, and L.B. Barichello. An analytical approach to the unified solution of kinetic equations in rarefied gas dynamics.ii. heat transfer problems. *Z. Angew. Math. Phys.*, vol. 60:pp. 651–687, 2009b.
- D.M. Schulz. Métodos analíticos e computacionais em geofísica nuclear. Master's thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, 2014.
- H. Sekimoto. Nuclear reactor theory. 1 ed., Innovative Nuclear Energy Systems for Sustainable Development of the World (COE-INES), 2007.
- W.E. Selph. Neutronn and gamma-ray albedos. Technical report, Oak Ridge National Laboratory, 1968.
- S. Sen. Impact of pavements on the urban heat island. Master's thesis, Illinois, USA, University of Illinois, 2015.
- F. Sharipov and D. Kalempa. Sound propagation through a gas in microscale. *Proceedings* of the ASMME 2009: 7th International Conference in Nanochannels, Microchannels and Minichannels, vol.:pp., 2009.
- J.K. Shultis and R.B. Myneni. Radiative transfer in vegetation canopies with anisotropic scattering. *J. Quant. Spectrosc. Radiat. Trans.*, vol. 39:pp. 115–129, 1988.
- C.E. Siewert. Kramers problem for a variable collision frequency model. *European Journal of Applied Mathematics*, vol. 12:pp. 179–191, 2001.

- C.E. Siewert. Generalized boundary conditions for the s-model kinetic equations basic to flow in a plane channel. *JQSRT*, vol. 72:pp. 75–88, 2002a.
- C.E. Siewert. Poiseuille, thermal creep and couette flow: results based on the ces model of the linearized boltzmann equation. *European Journal of Mechanics B/Fluids*, vol. 21:pp. 579–597, 2002b.
- C.E. Siewert. The linearized boltzmann equation: a consise and accurate solution of the temperature-jump problem. *JQSRT*, vol. 77:pp. 417–432, 2003a.
- C.E. Siewert. The linearized boltzmann equation: concise and accurate solution to basic flow problems. *Z. Angew. Math. Phys.*, vol. 54:pp. 273–303, 2003b.
- C.E. Siewert. The temperature-jump problem based on the ces model of the linearized boltzmann equation. *Z. Angew. Math. Phys.*, vol. 55:pp. 92–104, 2004.
- C.E. Siewert. The mccormack model for gas mixture: the temperature jump problem. *Z. Angew. Math. Phys.*, vol. 56:pp. 273–292, 2005.
- C.E. Siewert and D. Valougeorgis. An analitycal discrete-ordinates solution of the smodel kinetic equations for flow in a cylindrical tube. *JQSRT*, vol. 72:pp. 531–550, 2002.
- C.E. Siewert and D. Valougeorgis. Concise and accurate solutions to half-space binarygas flow problems defined by the mccormack model and specular-difuse wall conditions. *European Journal of Mechanics B/Fluids*, vol. 23:pp. 709–726, 2004a.
- C.E. Siewert and D. Valougeorgis. The mccormack model: channel flow of a binary gas mixture driven by temperature, pressure and density gradients. *European Journal of Mechanics B/Fluids*, vol. 23:pp. 645–664, 2004b.
- A.K. Singal. A large anisotropy in the sky distribution of 3crr quasars and other radio galaxies. *Astrphys. Sp. Sc.*, vol. 357:pp. 152, 2015.

- R.S. Smith, C. Dubois, and J. Marotzke. Global climate and ocean circulation on an aquaplanet ocean-atmosphere general circulation model. *Journal of Climate*, vol. 19: pp. 4719–4737, 2006.
- G.F. Smoot, M.V. Gorenstein, and R.A. Muller. Detection of anisotropy in the cosmic blackbody radiation. Technical report, Lawrence Berkeley Laboratory and Space Sciences Laboratory, University of California, Berkeley, 1977.
- Y. Sone, S. Takata, and T. Ohwada. Numerical analysis of the plane couette flow of rarefied gas on the basis of the linearized boltzmann equation for hard-sphere molecules. *European Journal of Mechanics B/Fluids*, vol. 9, 1990.
- J.F.A. De Souza, L.R. De oliveira, J.L.L. De Azevedo, I.D. Soares, and M.M. Mata. Uma revisão sobre turbulência e sua modelagem. *Revista Brasileira de Geofísica*, vol. 29: pp. 21–41, 2011.
- W.M. Stacey. Nuclear Reactor Physics. John Wiley and Sons, New York, 2001.
- H. Stewart. An introduction to the theory of the Boltzmann equation. Dover Books, 1971.
- A.H. Stroud and D. Secrest. *Gaussian quadrature formulas*. Prentice-Hall Inc, New Jersey, USA, 1966.
- Q. Sun, I.D. Boyd, and G.V. Candler. Numerical simulation of gas flow over microscale airfoils. *AIAA Thermophysics Conference*, *35th*, vol. 16:pp. 171–179, 2002.
- F.K. Tomaschewski. Solução da equação  $s_n$  multigrupo de transporte dependente do tempo em meio heterogêneo. Master's thesis, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brasil, 2012.
- R.W. Tsai and S.K. Loyalka. A numerical method for solving the integral equation of neutron transport part iii. *Nuclear Science Engineering*, vol. 59:pp. 536–540, 1976.
- H. van Dam, T.H.J.J. van der Hagen, and J.E. Hoogenboom. *Nuclear Reactor Physics*. Delft University of Technology, Mekelweg, 2005.

- R.M.F. Vargas, A.V. Cardona, and M.T. Vilhena R.C. Barros. On the decomposition method applied to linear and non-linear discrete ordinates problems in slab geometry. *Progress in Nuclear Energy*, vol. 42:pp. 439–456, 2003.
- V.M. Veselov. Investigation of the accuracy of various approximations in the problem of threedimensional energy and angular distribution of neutrons. Technical Report NASA TTF-411, NASA, 1967.
- L.L. Vignolia and P.P. Kenedib. Bone anisotropy analytical and finite element analysis. *Latin American Journal of Solids and Structures*, vol. 13(no. 1):pp., 2016.
- M.T. Vilhena and L.B. Barichello. A new analytical approach to solve the neutron transport equation. *Kerntechnik*, vol. 56:pp. 334–336, 1991.
- J.C. Wagner and A. Haghighat. Automated variance reduction of monte carlo shielding calculations using the discrete ordinates adjoint function. *Nuclear Science Engineering*, vol. 128:pp. 186–208, 1998.
- W.F. Walters. The relation between finite element methods and nodal methods in transport theory. *Progress in Nuclear Energy*, vol. 53:pp. 21–26, 1986.
- J. Yang Z.H. Wang and K.E. Kaloush. Environmental impacts of reflective materials: Is high albedo a 'silver bullet' for mitigating urban heat island? *Renewable and Sustainable Energy Reviews*, vol. 47:pp. 830–843, 2015.
- Y. Wang and J.C. Ragusa. A high-order discontinuous galerkin method for the sn transport equations on 2d unstructured triangular meshes. *Annals of Nuclear Energy*, vol. 36:pp. 931–939, 2009.
- Z. Weiss. About the generalization of amouyal-benoist's method for calculating disadvantage factors and flux distributions in two-region cells. *Nuclear Science and Engineering*, vol. 22(no. 1):pp. 60–77, 1965.
- Z. Weiss and R.J.J. Stammler. Calculation of disadvantage factors for small cells. *Nuclear Science and Engineering*, vol. 19(no. 3), 1964.

G.C. Wick. Uber ebene diffusion problem. Z. Phys, vol. 120:pp. 702–705, 1943.

## **APÊNDICE A**

## Dedução da proposta de solução utilizada na formulação do método ADO neste trabalho.

O decaimento exponencial na variável espacial que se encontra na solução da Eq.

$$\mu \frac{d}{dx}\psi(x,\mu) + \sigma_t \psi(x,\mu) = \frac{\sigma_{s0}}{2} \int_{-1}^1 \psi(x,\mu') d\mu'$$
(5.1)

pode ser deduzido através do método de separação de variáveis. Para tanto, propõe-se que

$$\psi(x,\mu) = X(x,\nu)\Psi(\nu,\mu), \tag{5.2}$$

onde  $\nu$  é um parâmetro arbitrário. Desta maneira, a Eq. (5.1) é reescrita como

$$\mu \frac{d}{dx} X(x,\nu) \Psi(\nu,\mu) + \sigma_t X(x,\nu) \Psi(\nu,\mu) = \frac{\sigma_{s0}}{2} \int_{-1}^1 X(x,\nu) \Psi(\nu,\mu) d\mu',$$
(5.3)

onde os termos constantes podem ser removidos do termo diferencial e integral, de acordo com

$$\mu\Psi(\nu,\mu)\frac{d}{dx}X(x,\nu) + \sigma_t X(x,\nu)\Psi(\nu,\mu) = \frac{\sigma_{s0}}{2}X(x,\nu)\int_{-1}^1\Psi(\nu,\mu)d\mu'.$$
 (5.4)

Dividindo-se essa Eq. por  $\mu X(x,\nu)\Psi(\nu,\mu)$ , obtém-se

$$\frac{1}{X(x,\nu)}\frac{d}{dx}X(x,\nu) + \frac{\sigma_t}{\mu} = \frac{\sigma_{s0}}{2\Psi(\nu,\mu)}\int_{-1}^1\Psi(\nu,\mu)d\mu'.$$
(5.5)

Portanto, pode-se fazer que

$$\frac{1}{X(x,\nu)}\frac{d}{dx}X(x,\nu) = \frac{\sigma_{s0}}{2\Psi(\nu,\mu)}\int_{-1}^{1}\Psi(\nu,\mu)d\mu' - \frac{\sigma_t}{\mu} = \frac{1}{\nu},$$
(5.6)

tendo-se assim duas equações diferenciais que podem ser resolvidas separadamente, e  $\nu$  como o parâmetro que relaciona ambas equações.

A solução para a expressão

$$\frac{dX(x,\nu)}{dx} = \frac{-1}{\nu} \tag{5.7}$$

pode ser obtida através de outra separação de variáveis, de modo que se obtenha

$$\frac{dX(x,\nu)}{X(x,\nu)} = \frac{-1}{\nu} dx.$$
(5.8)

Consequentemente, pode-se integrar ambos os lados da Eq. (5.8). Assim

$$\int \frac{dX(x,\nu)}{X(x,\nu)} = \int \frac{-1}{\nu} dx.$$
(5.9)

A solução destas integrais é dada como

$$ln(X(x,\nu)) = \frac{-x}{\nu} + C,$$
(5.10)

onde é conveniente utilizar uma exponencial para simplificação, conforme

$$e^{\ln(X)} = e^{-x/\nu} e^C.$$
(5.11)

Dessa forma, pode-se concluir o decaimento exponencial na variável espacial, dado por

$$X(x,\nu) = Ce^{-x/\nu},$$
 (5.12)

fazendo com que a solução possa ser escrita como

$$\Psi(x,\mu) = \phi(\nu,\mu)e^{-x/\nu}.$$
(5.13)

## **APÊNDICE B**

## Dedução do sistema para cálculo de pontos e pesos da quadratura de Gauss Legendre.

A forma de recorrência dos polinômios de Legendre é dada por

$$(n+1)P_{n+1} - (2n+1)\mu P_n(\mu) + nP_{n-1}(\mu) = 0.$$
(5.14)

onde, se ordenando os termos, pode-se reescrever como

$$\mu P_n(\mu) = \frac{1}{(2n+1)} [(n+1)P_{n+1} + nP_{n-1}(\mu)].$$
(5.15)

As versões da Eq. (5.15) para  $\mu P_{n-1}$  e  $\mu P_{n+1}$  são obtidas substituindo-se n, respectivamente, por (n - 1) e (n + 1), da forma

$$\mu P_{n-1}(\mu) = \frac{1}{(2n-1)} [nP_n + nP_{n-2}(\mu)]$$
(5.16)

$$\mu P_{n+1}(\mu) = \frac{1}{(2n+3)} [(n+2)P_{n+2} + (n+1)P_n(\mu)].$$
 (5.17)

Multiplicando-se a (5.14) por  $\mu$  se alcança como expressão

$$(n+1)\mu P_{n+1}(\mu) - (2n+1)\mu^2 P_n(\mu) + n\mu P_{n-1}(\mu) = 0,$$
(5.18)

onde pode-se substituir as Eqs. (5.16) e (5.17), resultando em

$$(n+1)\frac{1}{2n+3}[(n+2)P_{n+2}(\mu) + (n+1)P_n(\mu)] - (2n+1)\mu^2 P_n(\mu) + (n)\frac{1}{2n-1}[(n)P_n(\mu) + (n-1)P_{n-2}(\mu)] = 0.$$
(5.19)

Reorganizando os termos da Eq. (5.19), obtém-se

$$\left[\frac{(n+1)(n+2)}{2n+3}\right]P_{n+2}(\mu) + \left[\frac{(n+1)^2}{(2n+3)} + \frac{(n^2)}{2n-1}\right]P_n(\mu) + \left[\frac{(n)(n-1)}{(2n-1)}\right]P_{n-2}(\mu) = (2n+1)\mu^2 P_n(\mu); \quad (5.20)$$

e portanto

$$\mu^{2}P_{n}(\mu) = \frac{(n+1)(n+2)}{(2n+1)(2n+3)}P_{n+2}(\mu) + \\ + \left[\frac{(n+1)^{2}}{(2n+3)(2n+1)} + \frac{n^{2}}{(2n-1)(2n+1)}\right]P_{n}(\mu) + \\ + \left[\frac{(n)(n-2)}{(2n-1)(2n+1)}\right]P_{n-2}(\mu).$$
(5.21)

Definindo

$$h_n = 2n + 1,$$
 (5.22)

$$h_{n-1} = 2n - 1, (5.23)$$

$$h_{n+1} = 2n+3, (5.24)$$

a Eq. (5.21) pode ser reescrita como

$$\mu^{2}P_{n}(\mu) = \left[\frac{(n+1)(n+2)}{h_{n}h_{n+1}}\right]P_{n+2}(\mu) + \\ + \left[\frac{(n+1)^{2}}{h_{n+1}h_{n}} + \frac{n^{2}}{h_{n}h_{n-1}}\right]P_{n}(\mu) + \\ + \left[\frac{(n)(n-1)}{h_{n}h_{n-1}}\right]P_{n-2}(\mu).$$
(5.25)

Além disso, realiza-se a seguinte mudança:

$$a_n = \frac{n^2}{h_n h_{n-1}} \therefore \sqrt{a_n h_n h_{n-1}} = n.$$
 (5.26)

$$a_{n+1} = \frac{(n+1)^2}{h_n h_{n+1}} \therefore \sqrt{a_{n+1} h_n h_{n+1}} = (n+1),$$
(5.27)

$$a_{n+2} = \frac{(n+2)^2}{h_{n+2}h_{n+1}} \therefore \sqrt{a_{n+2}h_{n+2}h_{n+1}} = (n+2),$$
(5.28)

$$a_{n-1} = \frac{(n-1)^2}{h_{n-2}h_{n-1}} \therefore \sqrt{a_{n-1}h_{n-2}h_{n-1}} = (n-1).$$
(5.29)

A Eq. (5.25) pode ser reescrita como

$$\mu^{2}P_{n}(\mu) = \left[\frac{\sqrt{a_{n+1}h_{n}h_{n+1}a_{n+2}h_{n+2}h_{n+1}}}{h_{n}h_{n+1}}\right]P_{n+2}(\mu) + \left[\frac{\sqrt{a_{n}h_{n}h_{n-1}a_{n-1}h_{n-2}}h_{n-1}}{h_{n}h_{n-1}}\right]P_{n-2}(\mu). \quad (5.30)$$

Após as simplificações, tem-se que

$$\mu^{2}P_{n}(\mu) = \sqrt{a_{n+1}a_{n+2}\frac{h_{n+2}}{h_{n}}}P_{n+2}(\mu) + [a_{n+1} + a_{n}]P_{n}(\mu) + \sqrt{a_{n}a_{n-1}\frac{h_{n-2}}{h_{n}}}P_{n-2}(\mu). \quad (5.31)$$

Por fim, realiza-se a seguinte as mudanças de variável

$$P_n(\mu) = \sqrt{\frac{2}{h_n}} P_n^*(\mu).$$
 (5.32)

$$P_{n+2}(\mu) = \sqrt{\frac{2}{h_{n+2}}} P_{n+2}^*(\mu), \qquad (5.33)$$

$$P_{n-2}(\mu) = \sqrt{\frac{2}{h_{n-2}}} P_{n-2}^*(\mu).$$
(5.34)

que, substituindo na Eq. (5.31), resulta em

$$\mu^{2} \sqrt{\frac{2}{h_{n}}} P_{n}^{*}(\mu) = \left[ \sqrt{\frac{2a_{n+1}a_{n+2}h_{n+2}}{h_{n}h_{n+2}}} \right] P_{n+2}^{*}(\mu) + \left[ \sqrt{\frac{2a_{n}a_{n-1}h_{n-2}}{h_{n}h_{n-2}}} \right] P_{n-2}^{*}(\mu). \quad (5.35)$$

Dessa forma, realizando-se as devidas simplificações, se obtém

$$\mu^2 P_n^*(\mu) = \left[\sqrt{a_{n+1}a_{n+2}}\right] P_{n+2}^*(\mu) + \left[a_{n+1} + a_n\right] P_n^*(\mu) + \left[\sqrt{a_na_{n-1}}\right] P_{n-2}^*(\mu), \quad (5.36)$$

de modo que substituindo os valores de  $a_n$  e  $h_n$  têm-se

$$\mu^{2}P_{n}^{*}(\mu) = \left[\sqrt{\frac{(n+1)^{2}(n+2)^{2}}{(2n+1)(2n+3)(2n+5)(2n+3)}}}\right]P_{n+2}^{*}(\mu) + \left[\frac{(n+1)^{2}}{(2n+1)(2n+3)} + \frac{n^{2}}{(2n+1)(2n-1)}\right]P_{n}^{*}(\mu) + \left[\sqrt{\frac{(n)^{2}(n-1)^{2}}{(2n+1)(2n-1)(2n-1)(2n-3)}}\right]P_{n-2}^{*}(\mu).$$
 (5.37)

Então, sabendo-se que

$$P_0(\mu) = 1, (5.38)$$

e

$$P_1(\mu) = \mu, \tag{5.39}$$

e que para valores maiores de n (com n par), pode-se calcular  $P_n(\mu)$  pela Eq. (5.15). Segue-se a referência [163], onde

$$(1 - \mu^2)P'_n(\mu) = (n+1)\mu P_n(\mu) - (n+1)P_{n+1}(\mu)$$
(5.40)

$$= -n\mu P_n(\mu) + nP_{n-1}(\mu); \qquad (5.41)$$

e portanto

$$P'_{n}(\mu) = \frac{-n\mu P_{n}(\mu) + nP_{n-1}(\mu)}{1 - mu^{2}}$$
(5.42)

$$= \frac{n\mu P_n(\mu) - nP_{n-1}(\mu)}{\mu^2 - 1}.$$
(5.43)

Considerando

$$x_j = \sqrt{\mu_j}; \tag{5.44}$$

os pesos para a quadratura de Gauss-Legendre são calculados por

$$w_j = \frac{2}{(1 - x_j^2)(P'_{2n+1})^2}.$$
(5.45)