

Formulações espectrais para solução de problemas de transporte de partículas

Spectral formulations to the solution of particle transport problems

Liliane Basso Barichelloⁱ; Patricia Rodrigues Fortes ⁱⁱ; Camila Becker Picolotoⁱⁱⁱ; Mariza Camargo^{iv}

RESUMO

Neste trabalho, um método determinístico para solução da equação integrodiferencial linear de Boltzmann em geometria cartesiana unidimensional e bidimensional, é apresentado. A formulação é de característica espectral e determina soluções explícitas nas variáveis espaciais para a chamada aproximação em ordenadas discretas do modelo original. Uma característica relevante do método é a obtenção de problemas de autovalores de ordem reduzida à metade do número de direções discretas. Tal aspecto, bem como a possibilidade de uso de esquemas de quadratura arbitrários para o tratamento do termo integral da equação são fundamentais para a obtenção de soluções concisas, rápidas e precisas de problemas de interesse. Em particular, aqui, as derivações são apresentadas para modelos referentes à duas diferentes áreas de aplicação: a dinâmica de gases rarefeitos e o transporte de nêutrons. Aspectos comuns aos dois modelos são ressaltados e extensões da formulação à outras aplicações são comentadas e referenciadas.

Palavras-chave: Método de Ordenadas Discretas Analítico; Dinâmica de Gases Rarefeitos; Transporte de Nêutrons; Métodos Espectrais

ABSTRACT

In this work, a deterministic approach to the solution of the integro differential linear Boltzmann equation, in one and twodimensional media, is presented. Explicit solutions, in terms of the spatial variables, for the discrete ordinates approximation of the original model are obtained from a spectral formulation. A relevant feature of the methodology is the reduced order of the eigenvalue problems, which is given as half of the number of the discrete directions. Such aspect, along with the use of arbitrary quadrature schemes to represent the integral term of the equation, are fundamental to provide fast, concise and accurate solutions to several problems of interest. In particular, the solutions here are derived for models associated with two different applications: rarefied gas dynamics and neutron transport. Mathematical aspects present in the solution of the two models are emphasized and extensions of the formulation to other applications are commented and referenced.

Keywords: Analytical Discrete Ordinates Method; Rarefied Gas Dynamics; Neutron Transport; Spectral Methods

ⁱ Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, Brasil. lbaric@mat.ufrgs.br

ⁱⁱ Universidade Federal de Santa Maria, Frederico Westphalen, Brasil. patricia@ufsm.br

ⁱⁱⁱ Universidade Federal de Santa Maria, Cachoeira do Sul, Brasil. camila.picoloto@ufsm.br

^{iv} Universidade Federal de Santa Maria, Frederico Westphalen, Brasil. mariza@ufsm.br

1 Introdução

A pesquisa de Ludwig Boltzmann (Cercignani, 2006), originalmente voltada ao entendimento da teoria cinética dos gases e fundamentada em um modelo matemático baseado em uma equação integrodiferencial não linear, veio a contribuir para o surgimento de grandes avanços científicos em diferentes campos do conhecimento. Além do desenvolvimento da mecânica estatística (Ebeling e Sokolov, 2005), também fundamentou estudos de outras áreas. As formas linearizada e linear da equação de Boltzmann (esta última também chamada equação de transporte), passaram a ser empregadas em pesquisas que fomentaram e continuam aprimorando novas tecnologias. Dessa forma temos hoje acesso aos benefícios dos micro e nanosistemas (Gad-el-Hak, 2005), de procedimentos não invasivos como a tomografia óptica (Klose et al., 2002), de tratamentos de câncer por radioterapia (Ziegenhein et al., 2015) ou hipertermia (Dombrowsky et al., 2011), de processos industriais envolvendo combustão e transferência de calor em altas temperaturas (Modest, 2003), entre outros.

A relevância do modelo de Boltzmann associada com sua extrema complexidade, já que trata da evolução temporal de uma distribuição de partículas descrita em termos de sete variáveis independentes, impulsionaram e continuam desafiando intensa pesquisa na busca de soluções da equação para o tratamento de problemas de transporte aplicados à transferência radiativa, transporte de nêutrons, radiação gama, dinâmica dos gases rarefeitos, entre outros. Assim, métodos de modelagem computacional probabilística (Duderstadt e Martin, 1979; Haghghat, 2014) e métodos de abordagem determinística (Chandrasekhar, 1950; Lewis e Miller, 1984), têm sido foco de investigação na área de Teoria de Transporte de Partículas.

Em se tratando de métodos determinísticos para solução da equação linear de Boltzmann um dos mais conhecidos, e que será focado neste trabalho, é o método de Ordenadas Discretas, também denominado por vezes método S_N . Ao longo do tempo esta abordagem vem sendo usada na solução de inúmeros problemas em geometria unidimensional e multidimensional e é, em geral, base de códigos computacionais utilizados em diversas áreas (Lathrop e Brinkley, 1970; Palmiotti et al., 1990; Xu et al., 2018).

De acordo com Chalhoub e Garcia (2000) o método S_N foi introduzido por Wick (1943) e Chandrasekhar (1950), sendo que o método se baseia na discretização das variáveis angulares que expressam a direção das partículas e conseqüente aproximação do termo integral da equação por uma quadratura numérica. O conjunto de equações diferenciais resultantes desta aproximação pode ser resolvido de diferentes formas. No caso unidimensional, a proposta original (Chandrasekhar, 1950) foi de resolução analítica do conjunto de equações diferenciais ordinárias resultante para a função de distribuição de partículas, nas direções dadas pelos pontos da quadratura Gaussiana. Contudo, tal proposta é de difícil aplicação, particularmente do ponto de vista computacional, uma vez que requer o cálculo de raízes de polinômios de alto grau para implementação das soluções elementares. O caráter exponencial da solução também introduz dificuldades de precisão numérica.

Entretanto, a partir de um trabalho (Barichello e Siewert, 1999d) onde foi possível mostrar a equivalência entre o método de Harmônicos Esféricos e o método S_N , uma reformulação para o método de Ordenadas Discretas foi proposta. Diferentemente do que foi feito por Chandrasekhar (1950), nesta nova versão o cálculo de raízes de polinômios foi substituído pela solução de um problema de autovalores, sendo também possível o uso de esquemas de quadratura arbitrários, que não apenas de Gauss-Legendre. Os termos exponenciais também foram reescritos de forma a evitar o aparecimento de *overflow*. Assim, o Método de Ordenadas Discretas Analítico ADO (*Analytical Discrete Ordinates Method*) foi inicialmente proposto para tratamento de um problema na área de transferência radiativa (Barichello e Siewert, 1999a).

Uma solução em ordenadas discretas para equação de transporte baseada em um esquema de quadratura arbitrário, do tipo *half-range*, que reduz a ordem do problema de autovalores à metade do número de direções discretas é a base da metodologia espectral, que leva à determinação de soluções analíticas em termos da variável espacial, concisas, rápidas e de fácil implementação. A partir daí, uma série de problemas em diversas áreas (Barichello e Siewert, 2001; Scherer et al., 2009a; Barichello, 2011) foram resolvidos com muito sucesso, pelo método, incluindo modelos de transferência radiativa com efeitos de polarização (Barichello e Siewert, 1999b), modelos em geometria cilíndrica com acoplamento não linear de efeitos de condução e radiação (Rodrigues e Barichello, 2004). Foram, ainda, consideradas aplicações relacionadas à caracterização de vegetações, com interesse na avaliação de propriedades como reflectância (razão entre a energia radiante refletida e a energia radiante incidente) e transmitância (razão entre a energia radiante transmitida e a energia radiante incidente) (Cromianski et al., 2018). Nas referências Barichello (2011) e Cromianski et al. (2018) constam amplas discussões relacionadas aos resultados numéricos obtidos com o método ADO, considerando diferentes formulações das condições de contorno dos problemas tratados, com resultados originais e com comparações frente a outros trabalhos disponíveis na literatura caracterizando a eficiência computacional do método.

Em se tratando da análise de escoamentos de gases rarefeitos, relevante ao desenvolvimento de sistemas micro e nanoeletrônicos (Wang et al., 2008), a relação entre superfície e volume é muito significativa e, por isso, os chamados efeitos de superfície são muito importantes uma vez que interferem significativamente na transferência de massa, momento e energia nestes sistemas. Assim, se faz necessário investigar os chamados efeitos de rarefação (caracterizados pela quantificação do número de Knudsen), que determinam ocorrências de deslizamento, compressibilidade, dissipação viscosa, forças intermoleculares, saltos de temperatura. Nos estudos da área da dinâmica de gases rarefeitos (Tatsios e Valougeorgis, 2020; Wu e Struchtrup, 2017) existem os chamados problemas clássicos, a partir dos quais se faz a verificação e validação de métodos de resolução da equação linearizada de Boltzmann e modelos cinéticos dela derivados. Tais resultados são importantes também na avaliação de quantidades de interesse em problemas práticos. Neste contexto, foi de grande relevância o trabalho de Barichello et al. (2001), onde foi proposta

uma solução unificada via método ADO, de forma concisa, e de ampla abrangência, ou seja, facilmente aplicável a problemas clássicos em domínio finito (fluxo de Poiseuille, fluxo de Couette e *creep* térmico) e semi-infinito (problema *viscous-slip* e *creep* térmico). Na referência (Barichello et al., 2001) a precisão, eficiência e abrangência da solução ADO foram testadas na obtenção de resultados numéricos para avaliação de perfil de velocidade macroscópica, taxas de fluxo, velocidades de deslizamento térmico e viscoso, considerando vários valores do coeficiente de acomodação e ampla variação do número de Knudsen. Os bons resultados confirmaram as características inovadoras da metodologia desenvolvida e a versão reformulada do método de Ordenadas Discretas passou a ser testada também nos problemas da dinâmica de gases rarefeitos definidos em coordenadas cilíndricas (Siewert, 2000; Camargo et al., 2000), sendo que nestes casos foram realizadas investigações do uso de esquemas de quadratura alternativos (outro aspecto vantajoso do método ADO). Foram ainda abordados modelos de misturais binárias de gases (Knackfuss e Barichello, 2006).

Tendo em vista a necessidade de tratamento de modelos mais complexos, uma extensão do método foi proposta para geometrias bidimensionais Cartesianas (Barichello et al., 2011). O método ADO foi associado a formulações nodais (Badruzzaman, 1985) que reduzem a complexidade do modelo a partir de integrações transversais, em regiões ou nós do domínio, nas variáveis espaciais. Devido à característica analítica do método ADO, não é necessário, diferentemente das outras abordagens nodais, que a divisão do domínio em nodos seja feita (Barichello et al., 2011) para derivação da solução. No entanto, mais tarde, particularmente para o tratamento de problemas em meios constituídos por diferentes materiais, soluções locais foram apresentadas (Picoloto et al., 2015; Barichello et al., 2017). É usual que a formulação bidimensional seja chamada método ADO-Nodal. A abordagem foi estendida para problemas em meio com espalhamento anisotrópico (Picoloto et al., 2017; Barichello et al., 2020), incluindo o tratamento do operador adjunto. Resultados baseados no operador adjunto vêm sendo usados em problemas inversos de reconstrução de fontes de partículas de interesse em segurança nuclear (Pazinatto e Barichello, 2018, 2019). Importante ressaltar que duas características fundamentais para garantir a performance da formulação unidimensional foram mantidas para o caso bidimensional: o uso de quadraturas arbitrárias para aproximação do termo integral da equação e a derivação de problemas de autovalores de ordem reduzida à metade do número de direções discretas. Tais características resultam no fato de que a precisão nos resultados gerados em malhas mais grossas pelo método ADO é comparável com os obtidos em malhas bem mais refinadas, por outras metodologias, o que ocasiona um expressivo ganho computacional. Na busca de soluções de referência para problemas bidimensionais, a convergência da discretização espacial da solução bidimensional foi também investigada (Barichello et al., 2016).

Dessa forma, neste trabalho, a partir da breve revisão de resultados do método ADO, ao longo dos anos, em diversos problemas na área de teoria de transporte, enfocamos a versatilidade da formulação matemática, com a ênfase nas aproximações em Ordenadas Discretas, tanto para problemas unidimensionais como bidimensionais. Cada um deles voltados à diferentes aplicações - dinâmica de gases rarefeitos e transporte de nêutrons - buscando evidenciar o desenvolvimento da solução via métodos espectrais. Neste sentido, este trabalho está organizado de forma que, na Seção 2, derivamos a solução ADO para problemas unidimensionais e na Seção 3 tratamos dos problemas bidimensionais. Comentários finais relacionados a este trabalho discutimos na Seção 4.

2 Modelos Cinéticos Unidimensionais da Dinâmica de Gases Rarefeitos

Estudos teóricos da área da dinâmica de gases rarefeitos, envolvendo a equação linearizada de Boltzmann, têm sido desenvolvidos ao longo do tempo basicamente de duas maneiras diferenciadas: através da obtenção de soluções provenientes desta equação propriamente dita (Siewert, 2003) ou, então, através do desenvolvimento de soluções obtidas a partir da aplicação de modelos cinéticos (Barichello e Siewert, 2003) que visam simplificar o núcleo de espalhamento no termo integral desta equação. A descrição da solução ADO para os problemas tratados neste artigo baseia-se na equação linearizada de Boltzmann associada à aplicação do modelo cinético BGK (Bhatnagar et al., 1954).

2.1 Formulação Matemática

Nesta seção apresentamos a formulação matemática de problemas unidimensionais, referentes à descrição de um gás rarefeito entre duas placas paralelas, sendo discutida a solução via método ADO, de forma unificada, para três problemas clássicos da dinâmica de gases rarefeitos, a saber: fluxo de Poiseuille, fluxo de Couette e *creep* térmico (Barichello et al., 2001). A equação que descreve estes três problemas, com emprego do modelo BGK (Bhatnagar et al., 1954) para caracterizar o núcleo de espalhamento presente no termo de colisão da equação linearizada de Boltzmann, é dada por

$$\xi \frac{\partial}{\partial \tau} Y(\tau, \xi) + Y(\tau, \xi) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi(u) Y(\tau, u) du, \quad (1)$$

para $\tau \in (-a, a)$ e $\xi \in (-\infty, \infty)$, com condições de contorno

$$Y(-a, \xi) - (1 - \alpha)Y(-a, -\xi) = F_1(\xi) \quad (2)$$

e

$$Y(a, -\xi) - (1 - \alpha)Y(a, \xi) = F_2(\xi) \quad (3)$$

para $\xi \in (0, \infty)$. Estamos denotando aqui $2a$ (o número inverso de Knudsen) como sendo a largura do canal (unidades adimensionais), $\alpha \in (0, 1]$ como o coeficiente de acomodação e a função característica

$$\psi(\xi) = \pi^{-1/2} e^{-\xi^2}.$$

A definição dos termos $F_1(\xi)$ e $F_2(\xi)$ presentes nas condições de contorno, equações (2) e (3), é o que diferencia a modelagem de cada um dos três problemas tratados neste trabalho (Barichello et al., 2001). Para especificar o problema denominado Fluxo de Poiseuille (termo usado para descrever o movimento de um gás que sofre a influência de um gradiente de pressão) usamos

$$F_1(\xi) = \alpha\xi^2 + a(2 - \alpha)\xi \text{ e } F_2(\xi) = \alpha\xi^2 + a(2 - \alpha)\xi, \quad (4)$$

para o chamado Fluxo de Couette (que descreve o movimento de um gás entre corpos que se movem) definimos

$$F_1(\xi) = \alpha \text{ e } F_2(\xi) = -\alpha, \quad (5)$$

enquanto que para retratar o problema do *creep* Térmico (que representa um efeito de superfície que surge quando há um gradiente de temperatura que faz com que o gás se movimente com relação à parede fixa) adotamos

$$F_1(\xi) = \frac{1}{2}\alpha(\xi^2 - \frac{1}{2}) \text{ e } F_2(\xi) = \frac{1}{2}\alpha(\xi^2 - \frac{1}{2}). \quad (6)$$

Cabe ressaltar que o problema acima formulado é um problema auxiliar obtido a partir da linearização da equação de Boltzmann e derivação de um modelo cinético para colisão das partículas. No entanto, quantidades de interesse, como perfis de velocidade e taxas de fluxo são avaliadas em função de Y .

2.1.1 Solução pelo Método ADO

Com base na proposta elaborada por Barichello e Siewert (1999a), faremos uso do Método de Ordenadas Discretas Analítico – ADO para propor uma solução em ordenadas discretas para problemas unidimensionais em domínios limitados (fluxo de Poiseuille, fluxo de Couette e *creep* Térmico (Barichello et al., 2001)). Inicialmente, observando que a função característica $\psi(\xi)$ é uma função par, reescrevemos o termo integral da equação (1) para o intervalo $[0, \infty)$, fazendo as devidas mudanças de variáveis, e aproximando por um esquema de quadratura definido agora no semi-intervalo. Com isso escrevemos as equações em ordenadas discretas na forma

$$\xi_i \frac{d}{d\tau} Y(\tau, \xi_i) + Y(\tau, \xi_i) = \sum_{k=1}^N w_k \psi(\xi_k) [Y(\tau, \xi_k) + Y(\tau, -\xi_k)] \quad (7)$$

e

$$-\xi_i \frac{d}{d\tau} Y(\tau, -\xi_i) + Y(\tau, -\xi_i) = \sum_{k=1}^N w_k \psi(\xi_k) [Y(\tau, \xi_k) + Y(\tau, -\xi_k)], \quad (8)$$

para $i = 1, \dots, N$. Ressaltamos que o conjunto de N pesos w_k e N nós da quadratura ξ_k aqui usados, definem um esquema de quadratura em $[0, \infty)$.

Procurando soluções exponenciais para as equações (7) e (8), substituímos nessas duas equações as soluções elementares

$$Y(\tau, \pm \xi_i) = \phi(\nu, \pm \xi_i) e^{-\tau/\nu}, \quad (9)$$

onde ν é a constante de separação e as funções ϕ denotam o que chamamos de componentes independentes da parte espacial das soluções elementares, e assim obtemos as equações matriciais

$$\frac{1}{\nu} \mathbf{M} \Phi_+ = (\mathbf{I} - \mathbf{W}) \Phi_+ - \mathbf{W} \Phi_- \quad (10)$$

e

$$-\frac{1}{\nu} \mathbf{M} \Phi_- = (\mathbf{I} - \mathbf{W}) \Phi_- - \mathbf{W} \Phi_+ \quad (11)$$

onde \mathbf{I} é a matriz identidade $N \times N$,

$$\mathbf{M} = \text{diag}\{\xi_1, \xi_2, \xi_3, \dots, \xi_N\},$$

$$\Phi_{\pm} = [\phi(\nu, \pm \xi_1), \phi(\nu, \pm \xi_2), \dots, \phi(\nu, \pm \xi_N)]^T,$$

e os elementos da matriz \mathbf{W} são tais que

$$(\mathbf{W})_{i,j} = w_j \psi(\xi_j).$$

Pela adição e subtração das equações (10) e (11) obtemos, respectivamente, as relações

$$\frac{1}{\nu} \mathbf{M} [\Phi_+ - \Phi_-] = (\mathbf{I} - 2\mathbf{W}) [\Phi_+ + \Phi_-] \quad (12)$$

e

$$\frac{1}{\nu} \mathbf{M} [\Phi_+ + \Phi_-] = \Phi_+ - \Phi_- . \quad (13)$$

Agora, tal como sugerido na referência (Barichello e Siewert, 1999c), substituímos a equação (13) na (12) e obtemos

$$(\mathbf{D} - 2\mathbf{M}^{-1}\mathbf{W}\mathbf{M}^{-1})\mathbf{M}\mathbf{U} = \frac{1}{\nu^2}\mathbf{M}\mathbf{U} \quad (14)$$

onde

$$\mathbf{U} = \Phi_+ + \Phi_-$$

e

$$\mathbf{D} = \text{diag}\{\xi_1^{-2}, \xi_2^{-2}, \dots, \xi_N^{-2}\}. \quad (15)$$

Buscando obter matrizes simétricas, definimos uma matriz \mathbf{T} cujos elementos t_i são tais que $t_i \sqrt{w_j \psi(\xi_j)} = t_j \sqrt{w_i \psi(\xi_i)}$, para $i, j = 1, \dots, N$. Assim, multiplicando a equação (14) por essa matriz diagonal \mathbf{T} obtemos

$$(\mathbf{D} - 2\mathbf{V})\mathbf{X} = \frac{1}{\nu^2}\mathbf{X} \quad (16)$$

onde

$$\mathbf{V} = \mathbf{M}^{-1}\mathbf{T}\mathbf{W}\mathbf{T}^{-1}\mathbf{M}^{-1}$$

é uma matriz simétrica de posto um, e

$$\mathbf{X} = \mathbf{T}\mathbf{M}\mathbf{U}.$$

Assim, o problema de autovalores dado pela equação (16) pode ser reescrito de forma muito especial como

$$(\mathbf{D} - 2\mathbf{z}\mathbf{z}^T)\mathbf{X} = \lambda\mathbf{X} \quad (17)$$

onde $\lambda = 1/\nu^2$ e

$$\mathbf{z} = \left[\frac{\sqrt{w_1\psi(\xi_1)}}{\xi_1}, \frac{\sqrt{w_2\psi(\xi_2)}}{\xi_2}, \dots, \frac{\sqrt{w_N\psi(\xi_N)}}{\xi_N} \right]^T.$$

Aqui ressaltamos que o problema de autovalores definido pela equação (17) faz parte do formalismo usado pelo método *divide and conquer* (Golub e Loan, 2013) para o cálculo de autovalores de matrizes tridiagonais. Ainda, dada a equação (15), há que se tomar o cuidado de excluir o valor zero do conjunto de pontos de quadratura escolhido para resolução do problema. Em geral um mapeamento do intervalo $[0, \infty)$ ao intervalo $[-1, 1]$ é usado (Barichello, 2011) de forma que a quadratura de Gauss-Legendre possa ser utilizada, a qual não inclui os extremos do intervalo de integração evitando a singularidade.

Considerando a linearidade do modelo e que tenhamos calculado os autovalores pela equação (17), impomos a condição de normalização

$$\sum_{\kappa=1}^N w_{\kappa}\psi(\xi_{\kappa}) [\phi(\nu, \xi_{\kappa}) + \phi(\nu, -\xi_{\kappa})] = 1$$

e escrevemos a solução em ordenadas discretas como

$$Y(\tau, \pm \xi_i) = \sum_{j=1}^N \left[A_j \frac{\nu_j}{\nu_j \mp \xi_i} e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j \frac{\nu_j}{\nu_j \pm \xi_i} e^{-(a-\tau)/\nu_j} \right] \quad (18)$$

sendo que as constantes arbitrárias A_j e B_j podem ser determinadas pelas condições de contorno do problema, enquanto que as constantes ν_j são o recíproco das raízes quadradas positivas dos autovalores definidos pela equação (17), visto que definimos anteriormente que $\lambda = 1/\nu^2$. Notemos ainda que as soluções elementares em (9) ficam analiticamente definidas.

Lembrando que problemas baseados na equação (1) são conservativos, uma vez que

$$\int_{-\infty}^{\infty} \psi(\mu) d\mu = 1,$$

esperamos a existência de autovalores degenerados. Levando em conta este fato, e que os demais autovalores aparecem aos pares $(\pm\nu_j)$, reescrevemos a equação (18) como

$$Y(\tau, \pm \xi_i) = A + B(\tau \mp \xi_i) + \sum_{j=1}^{N-1} \left[A_j \frac{\nu_j}{\nu_j \mp \xi_i} e^{-(a+\tau)/\nu_j} + B_j \frac{\nu_j}{\nu_j \pm \xi_i} e^{-(a-\tau)/\nu_j} \right]. \quad (19)$$

Para definirmos as constantes A , B , A_j e B_j substituímos a equação (19) nas condições de contorno, avaliadas nos pontos de quadratura $\{\xi_i\}$, gerando o seguinte sistema de equações algébricas lineares

$$\sum_{j=1}^{N-1} \left\{ A_j \nu_j \left[\frac{\alpha\nu_j + \xi_i(2-\alpha)}{\nu_j^2 - \xi_i^2} \right] + B_j \nu_j \left[\frac{\alpha\nu_j - \xi_i(2-\alpha)}{\nu_j^2 - \xi_i^2} \right] e^{-2a/\nu_j} \right\} + \alpha A - B[\alpha a + \xi_i(2-\alpha)] = F_1(\xi_i) \quad (20)$$

e

$$\sum_{j=1}^{N-1} \left\{ A_j \nu_j \left[\frac{\alpha \nu_j - \xi_i (2 - \alpha)}{\nu_j^2 - \xi_i^2} \right] e^{-2a/\nu_j} + B_j \nu_j \left[\frac{\alpha \nu_j + \xi_i (2 - \alpha)}{\nu_j^2 - \xi_i^2} \right] \right\} + \alpha A + B[\alpha a + \xi_i (2 - \alpha)] = F_2(\xi_i), \tag{21}$$

para $i = 1, 2, \dots, N$. A resolução do sistema formado pelas equações (20) e (21) define completamente a solução em ordenadas discretas para os problemas unidimensionais propostos pelas equações (1) a (3). E tal como já detalhado nas equações (4) a (6), os termos $F_1(\xi_i)$ e $F_2(\xi_i)$ do sistema linear anterior devem ser considerados de acordo com o problema em estudo.

Destacamos que a solução ADO dada pela equação (19) foi toda obtida de forma explícita em relação à variável espacial. Resultados numéricos gerados pelo método ADO para as quantidades de interesse (perfil de velocidade macroscópica e taxa de fluxo) dos referidos problemas são considerados resultados de referência e podem ser consultados em (Barichello et al., 2001). Vale ressaltar que o estudo detalhado nesta seção foi estendido para o tratamento do problema de salto de temperatura (Barichello e Siewert, 2000), efeito característico de gases rarefeitos. Posteriormente, soluções unificadas foram estabelecidas para problemas como os aqui mencionados, para outros modelos cinéticos derivados da equação de Boltzmann (Scherer et al., 2009a,b). Neste caso, as componentes independentes da variável espacial, nas soluções elementares, passam a ser escritas em termos dos autovetores de problemas de autovalores que se diferem do caso aqui derivado.

3 Modelos de Transporte de Partículas Neutras em Geometria Bidimensional

Como mencionado anteriormente, o sucesso da abordagem de problemas unidimensionais com solução concisa, rápida e precisa levou ao tratamento de problemas em geometrias bidimensionais (Barichello et al., 2011). Para tanto, o método de Ordenadas Discretas Analítico (ADO) foi associado com esquemas nodais (Badruzzaman, 1985). Devido a característica analítica da abordagem utilizada, e diferentemente da maioria dos métodos baseados em esquemas nodais (Azmy, 1988; Barros e Larsen, 1992; Poursalehi et al., 2013), a solução para a equação unidimensional integrada transversalmente é obtida de forma explícita em termos das variáveis espaciais e, além disso, a imposição de uma malha não é obrigatória. Ainda mais, a maioria das abordagens disponíveis na literatura necessitam de um esquema iterativo de *varredura* nas direções, entre todos os nós (Lewis e Miller, 1984), até verificação de certo critério de convergência. Este processo é responsável por grande demanda de tempo computacional. Tal *varredura* não faz parte da formulação ADO. Em esquemas nodais, abordagens distintas têm sido utilizadas para representar incógnitas que resultam do processo de integração, neste caso representando fluxos desconhecidos nos contornos do domínio ou nas interfaces dos nós. Diferentes aproximações foram investigadas, em associação com este método (Prolo Filho e Barichello, 2014; Cromianski et al., 2019) para tais termos. Neste trabalho utilizamos a aproximação constante.

3.1 Formulação Nodal

Nesta seção apresentamos a formulação associada a problemas bidimensionais de transporte de nêutrons, em geometria cartesiana e em meios não multiplicativos. Para isso, considera-se uma região retangular R , $[0, a] \times [0, b]$, meio homogêneo, espalhamento isotrópico, um grupo de energia e com presença de uma fonte $Q(x,y)$ definida no retângulo $[0, a_s] \times [0, b_s]$ dentro de R (veja Figura 1).

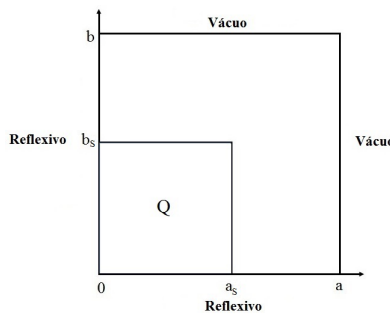


Figura 1: Representação do domínio

Neste contexto, a equação bidimensional de transporte em ordenadas discretas para o caso isotrópico, é escrita como (Lewis e Miller, 1984)

$$\mu_i \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, y, \Omega_i) + \eta_i \frac{\partial}{\partial y} \Psi(x, y, \Omega_i) + \sigma_t \Psi(x, y, \Omega_i) = Q(x, y) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^M \omega_k \Psi(x, y, \Omega_k) \quad (22)$$

para $i = 1, \dots, M$, com $M = N(N + 2)/2$, de acordo com o esquema de quadratura simétrica de nível (Lewis e Miller, 1984), onde N refere-se a ordem da quadratura; ω_i são os pesos associados às direções $\Omega_i = (\mu_i, \eta_i)$; x e y são as componentes do vetor espacial; $Q(x, y)$ é o termo fonte de nêutrons; σ_t e σ_s são, respectivamente, seção de choque macroscópica total e de espalhamento. No caso descrito na Figura 1, as condições de contorno impostas são de fluxo incidente nulo (vácuo) e de reflexão.

Buscando reduzir a complexidade do modelo, utilizamos os fundamentos dos métodos nodais. Dessa forma, a partir da versão em ordenadas discretas, obtemos as equações nodais integradas transversalmente. Essas consistem em versões da equação (22) integradas nas variáveis espaciais x e y e definidas em termos das grandezas médias.

Para derivar a equação para a direção x , optamos por ordenar o conjunto de direções (Ω_i) de forma que para os índices $i = 1, \dots, M/2$ as direções estejam associadas à coordenada $\mu_i > 0$, conforme está esboçado na Figura 2.

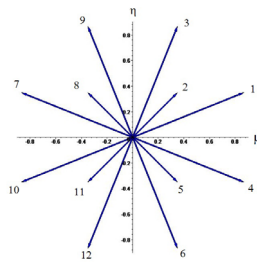


Figura 2: Ordenamento das direções no problema em x , $N=4$

Assim, para obter as equações unidimensionais na variável x , integramos a equação (22) para todo $y \in [0, b]$ de forma que

$$\mu_i \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \Omega_i) + \sigma_t \Psi_y(x, \Omega_i) = Q_y(x, \Omega_i) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+M/2})] \quad (23)$$

e

$$-\mu_i \frac{d}{dx} \Psi_y(x, \Omega_{i+M/2}) + \sigma_t \Psi_y(x, \Omega_{i+M/2}) = Q_y(x, \Omega_{i+M/2}) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+M/2})], \quad (24)$$

para $i = 1, \dots, M/2$. Estas equações, ficam definidas em termos do fluxo angular médio em y

$$\Psi_y(x, \Omega_i) = \frac{1}{b} \int_0^b \Psi(x, y, \Omega_i) dy, \quad (25)$$

e o termo fonte é, neste caso, definido como

$$Q_y(x, \Omega_i) = Q_y(x) - \frac{\eta_i}{b} [\Psi(x, b, \Omega_i) - \Psi(x, 0, \Omega_i)] \quad (26)$$

com

$$Q_y(x) = \frac{1}{b} \int_0^b Q(x, y) dy,$$

para $i = 1, \dots, M$.

Verificamos, na equação (26), que a integração introduz incógnitas adicionais ao sistema, termos avaliados nos contornos do domínio que aparecem no lado direito. No entanto, esses termos, que representam fluxos angulares nas fronteiras, são em geral conhecidos apenas nas direções incidentes. Como usual em esquemas nodais, equações auxiliares são necessárias para fechamento do sistema. Aqui, estes termos são inicialmente agrupados ao termo de fonte e posteriormente aproximados por constantes. Dessa forma, como passo inicial da derivação, apenas a solução do problema homogêneo será considerada.

3.2 Solução ADO para os fluxos médios

O uso de esquemas nodais na equação de transporte permitiu que obtivéssemos um sistema de equações unidimensionais integradas transversalmente, equações (23) e (24), as quais serão resolvidas utilizando o método ADO. Seguindo a ideia introduzida para os problemas unidimensionais na Sessão 2.1, buscamos determinar soluções homogêneas em termos de autovalores e autofunções. Seguindo (Barichello et al., 2011; Tres et al., 2014; Picoloto et al., 2013), com $i = 1, \dots, M$, escrevemos

$$\Psi_y^h(x, \Omega_i) = \Phi_y(\nu, \Omega_i) e^{-x/\nu}. \quad (27)$$

Substituindo, então, a equação (27) nas versões homogêneas das equações (23) e (24), obtemos

$$-\frac{\mu_i}{\nu} \Phi_y(\nu, \Omega_i) + \sigma_t \Phi_y(\nu, \Omega_i) = \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Phi_y(\nu, \Omega_k) + \Phi_y(\nu, \Omega_{k+M/2})] \quad (28)$$

e

$$\frac{\mu_i}{\nu} \Phi_y(\nu, \Omega_{i+M/2}) + \sigma_t \Phi_y(\nu, \Omega_{i+M/2}) = \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Phi_y(\nu, \Omega_k) + \Phi_y(\nu, \Omega_{k+M/2})], \quad (29)$$

para $i = 1, \dots, M/2$. As equações (28) e (29) podem ser escritas, em forma matricial, como

$$-\frac{1}{\nu} \mathbf{M} \Phi_y(\nu, \Omega_i) = (\mathbf{W} - \mathbf{S}) \Phi_y(\nu, \Omega_i) + \mathbf{W} \Phi_y(\nu, \Omega_{i+M/2}) \quad (30)$$

e

$$\frac{1}{\nu} \mathbf{M} \Phi_y(\nu, \Omega_{i+M/2}) = \mathbf{W} \Phi_y(\nu, \Omega_i) + (\mathbf{W} - \mathbf{S}) \Phi_y(\nu, \Omega_{i+M/2}), \quad (31)$$

para $i = 1, \dots, M/2$, onde \mathbf{S} é a matriz diagonal cujos elementos são as constantes σ_t ,

$$\mathbf{M} = \text{diag}\{\mu_1, \mu_2, \dots, \mu_{M/2}\}$$

e \mathbf{W} também de ordem $M/2$ é tal que

$$\mathbf{W}(i, j) = \frac{\sigma_s}{4} \omega_j.$$

Pela adição e subtração das equações (30) e (31) e definindo

$$\mathbf{U}_y(\nu, \Omega_i) = \Phi_y(\nu, \Omega_i) + \Phi_y(\nu, \Omega_{i+M/2})$$

chegamos a um problema de autovalores

$$(\mathbf{D} - 2\mathbf{S}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{W}\mathbf{M}^{-1}) \mathbf{M}\mathbf{U}_y = \frac{1}{\nu^2} \mathbf{M}\mathbf{U}_y, \quad (32)$$

onde

$$\mathbf{D} = \text{diag} \left\{ \left[\frac{\sigma_t}{\mu_1} \right]^2, \left[\frac{\sigma_t}{\mu_2} \right]^2, \dots, \left[\frac{\sigma_t}{\mu_{M/2}} \right]^2 \right\}.$$

Por sua vez, ao multiplicar a equação (32) por uma matriz diagonal \mathbf{T} , definida como

$$\mathbf{T} = \text{diag}\{\omega_1^{1/2}, \omega_2^{1/2}, \dots, \omega_{M/2}^{1/2}\},$$

obtemos

$$(\mathbf{D} - 2\mathbf{\Xi}) \hat{\mathbf{X}} = \frac{1}{\nu^2} \hat{\mathbf{X}}$$

onde

$$\mathbf{\Xi} = \mathbf{S}\mathbf{M}^{-1}\mathbf{T}\mathbf{W}\mathbf{T}^{-1}\mathbf{M}^{-1}$$

e

$$\hat{\mathbf{X}} = \mathbf{T}\mathbf{M}\mathbf{U}_y.$$

Cabe ressaltar que os elementos da matriz \mathbf{T} foram definidos de forma a tornar a matriz $\mathbf{\Xi}$ simétrica. Desta forma, o problema de autovalores pode ser escrito na forma

$$\left(\mathbf{D} - \frac{\sigma_t \sigma_s}{2} \mathbf{z}\mathbf{z}^T\right) \hat{\mathbf{X}} = \lambda_y \hat{\mathbf{X}} \quad (33)$$

com $\lambda_y = 1/\nu^2$ e

$$\mathbf{z} = \left[(1/\mu_1)\omega_1^{1/2} \quad (1/\mu_2)\omega_2^{1/2} \quad \dots \quad (1/\mu_{M/2})\omega_{M/2}^{1/2} \right]^T.$$

Assim como no caso unidimensional, apresentado na seção anterior, podemos definir quando o espalhamento é isotrópico, um problema de autovalores, de ordem $M/2$, definido como perturbação de matriz de posto um, com propriedades específicas que contribuem para a eficiência computacional.

Determinados os autovalores, impomos em (28) e (29) a condição de normalização

$$\sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_k) + \Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{k+M/2})] = 1$$

e assim é possível escrever as soluções elementares também de forma explícita, observando que o esquema de quadratura deve garantir que o denominador seja diferente de zero,

$$\Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_i) = \frac{\sigma_s \nu}{4(\sigma_t \nu - \mu_i)}$$

e

$$\Phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \frac{\sigma_s \nu}{4(\sigma_t \nu + \mu_i)},$$

com $i = 1, \dots, M/2$. Finalmente, escrevemos a solução homogênea em ordenadas discretas para o fluxo angular médio na direção x como

$$\Psi_y^h(x, \mathbf{\Omega}_i) = \sum_{j=1}^{M/2} \left[A_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) e^{-x/\nu_j} + B_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-(a-x)/\nu_j} \right],$$

$$\Psi_y^h(x, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} \left[A_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{i+M/2}) e^{-x/\nu_j} + B_j \Phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_i) e^{-(a-x)/\nu_j} \right],$$

para $i = 1, \dots, M/2$, $x \in [0, a]$. As constantes ν_j são calculadas a partir dos autovalores obtidos da solução de (33) e as constantes A_j e B_j são determinadas a partir da solução de um sistema linear, que será comentado na próxima seção.

Procedimento análogo é realizado na definição da abordagem explícita para soluções elementares para a direção y . Neste contexto, optamos por ordenar o conjunto de direções ($\mathbf{\Omega}_i$) de forma que para os índices $i = 1, \dots, M/2$ as direções tenham a coordenada $\eta_i > 0$, conforme está esboçado na Figura 3.

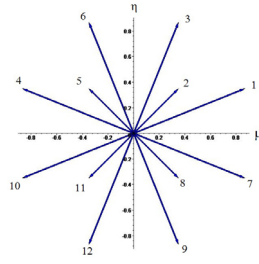


Figura 3: Ordenamento das direções no problema em y , $N=4$

Considerando a ordenação das direções apresentada na Figura 3 e fazendo uso dos métodos nodais para obtenção das equações unidimensionais na variável y , integramos a equação (22) para todo $x \in [0, a]$, obtendo

$$\eta_i \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \Omega_i) + \sigma_t \Psi_x(y, \Omega_i) = Q_x(y, \Omega_i) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Psi_x(y, \Omega_k) + \Psi_x(y, \Omega_{k+M/2})], \quad (34)$$

$$-\eta_i \frac{d}{dy} \Psi_x(y, \Omega_{i+M/2}) + \sigma_t \Psi_x(y, \Omega_{i+M/2}) = Q_x(y, \Omega_{i+M/2}) + \frac{\sigma_s}{4} \sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Psi_x(y, \Omega_k) + \Psi_x(y, \Omega_{k+M/2})], \quad (35)$$

para $i = 1, \dots, M/2$. Estas equações estão definidas em termos do fluxo angular médio em x

$$\Psi_x(y, \Omega_i) = \frac{1}{a} \int_0^a \Psi(x, y, \Omega_i) dx,$$

e o termo fonte é, neste caso, definido como

$$Q_x(y, \Omega_i) = Q_x(y) - \frac{\mu_i}{a} [\Psi(a, y, \Omega_i) - \Psi(0, y, \Omega_i)] \quad (36)$$

com

$$Q_x(y) = \frac{1}{a} \int_0^a Q(x, y) dx,$$

para $i = 1, \dots, M$.

Novamente chamamos a atenção às incógnitas adicionais que aparecem na equação (36). De fato, estes termos, assim como aqueles descritos no problema em x , levam posteriormente ao acoplamento dos sistemas em ambas as direções.

Realizando processo análogo ao descrito anteriormente, derivamos o seguinte problema de autovalores

$$\left(\mathbf{E} - \frac{\sigma_t \sigma_s}{2} \mathbf{v} \mathbf{v}^T \right) \hat{\mathbf{Y}} = \lambda_x \hat{\mathbf{Y}}, \quad (37)$$

com $\lambda_x = 1/\gamma^2$,

$$\mathbf{E} = \text{diag} \left\{ \left[\frac{\sigma_t}{\eta_1} \right]^2, \left[\frac{\sigma_t}{\eta_2} \right]^2, \dots, \left[\frac{\sigma_t}{\eta_{M/2}} \right]^2 \right\}.$$

$$\mathbf{v} = \left[(1/\eta_1)\omega_1^{1/2} \quad (1/\eta_2)\omega_2^{1/2} \quad \dots \quad (1/\eta_{M/2})\omega_{M/2}^{1/2} \right]^T,$$

e

$$\hat{\mathbf{Y}} = \mathbf{T} \mathbf{M} \mathbf{U}_x.$$

Impondo a condição de normalização

$$\sum_{k=1}^{M/2} \omega_k [\Phi_x(\gamma, \Omega_k) + \Phi_x(\gamma, \Omega_{k+M/2})] = 1$$

temos

$$\Phi_x(\gamma, \Omega_i) = \frac{\sigma_s \gamma}{4(\sigma_t \gamma - \eta_i)}, \quad (38)$$

$$\Phi_x(\gamma, \Omega_{i+M/2}) = \frac{\sigma_s \gamma}{4(\sigma_t \gamma + \eta_i)}, \quad (39)$$

com $i = 1, \dots, M/2$. A solução em ordenadas discretas para o fluxo médio na direção y pode ser escrita como

$$\Psi_x^h(y, \Omega_i) = \sum_{j=1}^{M/2} \left[C_j \Phi_x(\gamma_j, \Omega_i) e^{-y/\gamma_j} + D_j \Phi_x(\gamma_j, \Omega_{i+M/2}) e^{-(b-y)/\gamma_j} \right],$$

$$\Psi_x^h(y, \Omega_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} \left[C_j \Phi_x(\gamma_j, \Omega_{i+M/2}) e^{-y/\gamma_j} + D_j \Phi_x(\gamma_j, \Omega_i) e^{-(b-y)/\gamma_j} \right]$$

para $i = 1, \dots, M/2$, $y \in [0, b]$. As constantes γ_j são obtidas a partir dos autovalores obtidos da solução de (37) e as constantes C_j e D_j são determinadas a partir de um sistema linear, considerando as condições de contorno do problema, como detalhado a seguir.

Chamamos atenção, ainda, que para efeitos de implementação computacional as diferentes ordenações nas direções dos problemas em x e y devem ser observadas.

Usualmente, problemas de autovalores associados à formulações baseadas no método de Ordenadas Discretas são da ordem M . O emprego do método ADO possibilita a redução de tais sistemas à ordem $M/2$. Neste caso ainda reduzido ao caso simplificado de perturbações de matrizes diagonais. Isto se reflete em maior eficiência computacional, o que em problemas multidimensionais é uma questão bastante significativa. Derivações alternativas para as autofunções, em termos dos autovetores, foram também obtidas (Barichello et al., 2017) e, na prática, são usadas para geração de resultados numéricos.

3.3 Solução geral

Até o momento, os problemas bidimensionais abordados são conhecidos como problemas de fonte fixa. Consideramos a presença de uma fonte unitária de nêutrons na região $[0, a_s] \times [0, b_s]$ pertencente a R , representada por

$$Q(x, y) = \begin{cases} 1, & \text{para } x \in [0, a_s] \text{ e } y \in [0, b_s] \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (40)$$

De acordo com as equações (26) e (36), o termo fonte depende dos valores dos fluxos angulares dos contornos, os quais em algumas direções, são conhecidos pelas condições de contorno do problema. Por exemplo, no caso das condições de vácuo

$$\Psi(x, b, \Omega_i) = 0, \quad \text{para } i = M/4 + 1, \dots, M/2 \text{ e } i = 3M/4 + 1, \dots, M,$$

$$\Psi(a, y, \Omega_i) = 0, \quad \text{para } i = M/4 + 1, \dots, M/2 \text{ e } i = 3M/4 + 1, \dots, M,$$

e na fronteira com condição de contorno de tipo reflexiva

$$\Psi(x, 0, \Omega_i) = \Psi(x, 0, \Omega_{i+M/4}), \quad \text{para } i = 1, \dots, M/4 \text{ e } i = M/2 + 1, \dots, 3M/4,$$

$$\Psi(0, y, \Omega_i) = \Psi(0, y, \Omega_{i+M/4}), \quad \text{para } i = 1, \dots, M/4 \text{ e } i = M/2 + 1, \dots, 3M/4.$$

Lembrando que as ordenações das direções seguem diferentes padrões para o problema em x e em y .

A partir do uso de aproximações constantes para as incógnitas adicionais, juntamente com a equação (40), a forma final do termo não-homogêneo também será constante. Assim, para $i = 1, \dots, M$, propomos

$$\Psi_y^P(x, \Omega_i) = \begin{cases} K_i, & \text{para } x \in [0, a_S] \\ L_i, & \text{para } x \in [a_S, a] \end{cases} \quad (41)$$

e

$$\Psi_x^P(y, \Omega_i) = \begin{cases} W_i, & \text{para } y \in [0, b_S] \\ P_i, & \text{para } y \in [b_S, b]. \end{cases} \quad (42)$$

Substituindo as equações (41) e (42) nas equações (23)-(24) e (34)-(35), obtemos equações para K_i , L_i , W_i e P_i que irão compor o sistema linear, nos quais os coeficientes relacionados a parte homogênea também serão determinados, conforme trataremos na sequência.

Importante observar que soluções particulares de caráter mais geral, derivadas a partir de Funções de Green (Prolo Filho e Barichello, 2014) também podem ser utilizadas em associação com a metodologia ADO-Nodal.

Estabelecidas as expressões que representam as soluções homogêneas e particulares para as equações unidimensionais integradas transversalmente, a solução geral para os fluxos angulares médios pode então ser escrita para $i = 1, \dots, M/2$, como

$$\Psi_y(x, \Omega_i) = \sum_{j=1}^{M/2} \left[A_j \Phi_y(\nu_j, \Omega_i) e^{-x/\nu_j} + B_j \Phi_y(\nu_j, \Omega_{i+M/2}) e^{-(a_S-x)/\nu_j} \right] + K_i, \quad (43)$$

$$\Psi_y(x, \Omega_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} \left[A_j \Phi_y(\nu_j, \Omega_{i+M/2}) e^{-x/\nu_j} + B_j \Phi_y(\nu_j, \Omega_i) e^{-(a_S-x)/\nu_j} \right] + K_{i+M/2} \quad (44)$$

para $x \in [0, a_S]$,

$$\Psi_y(x, \Omega_i) = \sum_{j=1}^{M/2} \left[A_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \Omega_i) e^{-(x-a_S)/\nu_j} + B_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \Omega_{i+M/2}) e^{-(a-x)/\nu_j} \right] + L_i, \quad (45)$$

$$\Psi_y(x, \Omega_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} \left[A_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \Omega_{i+M/2}) e^{-(x-a_S)/\nu_j} + B_{j+M/2} \Phi_y(\nu_j, \Omega_i) e^{-(a-x)/\nu_j} \right] + L_{i+M/2} \quad (46)$$

para $x \in [a_S, a]$,

$$\Psi_x(y, \Omega_i) = \sum_{j=1}^{M/2} \left[C_j \Phi_x(\gamma_j, \Omega_i) e^{-y/\gamma_j} + D_j \Phi_x(\gamma_j, \Omega_{i+M/2}) e^{-(b_S-y)/\gamma_j} \right] + W_i, \quad (47)$$

$$\Psi_x(y, \Omega_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} \left[C_j \Phi_x(\gamma_j, \Omega_{i+M/2}) e^{-y/\gamma_j} + D_j \Phi_x(\gamma_j, \Omega_i) e^{-(b_S-y)/\gamma_j} \right] + W_{i+M/2} \quad (48)$$

para $y \in [0, b_S]$,

$$\Psi_x(y, \Omega_i) = \sum_{j=1}^{M/2} \left[C_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \Omega_i) e^{-(y-b_S)/\gamma_j} + D_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \Omega_{i+M/2}) e^{-(b-y)/\gamma_j} \right] + P_i, \quad (49)$$

$$\Psi_x(y, \Omega_{i+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} \left[C_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \Omega_{i+M/2}) e^{-(y-b_S)/\gamma_j} + D_{j+M/2} \Phi_x(\gamma_j, \Omega_i) e^{-(b-y)/\gamma_j} \right] + P_{i+M/2} \quad (50)$$

para $y \in [b_S, b]$.

As constantes da solução geral, equações (43)-(50), serão determinadas a partir de um sistema linear formado pela condição de continuidade nas interfaces dos nós ou regiões do domínio, pelas versões integradas das condições de contorno do problema original, pelas equações para as soluções particulares e pelas equações auxiliares, como detalhado em (Tres et al., 2014).

Os fluxos angulares são usados para avaliação de outras quantidades de interesse em meio bidimensional, como o fluxo escalar médio, avaliado como

$$\bar{\phi} = \frac{1}{4a} \int_0^a \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_y(x, \Omega_k) + \Psi_y(x, \Omega_{k+M/2})] dx \quad (51)$$

ou

$$\bar{\phi} = \frac{1}{4b} \int_0^b \sum_{k=1}^{M/2} w_k [\Psi_x(y, \Omega_k) + \Psi_x(y, \Omega_{k+M/2})] dy, \quad (52)$$

ou ainda a taxa de absorção de partículas (Barichello et al., 2020), por exemplo, em um detector no interior do domínio. Na configuração teste considerada, os resultados obtidos pelas equações (51) e (52) são coincidentes.

Procuramos aqui enfatizar como foi desenvolvida uma proposta inicial da metodologia usada na abordagem dos problemas bidimensionais a partir do método ADO, justamente para ressaltar a abrangência da formulação matemática para problemas de uma e duas dimensões espaciais, escolhendo para isto um modelo simples. No entanto, a formulação ADO-Nodal foi estendida ao longo do tempo. Neste sentido, soluções locais foram propostas (Picoloto et al., 2015) de forma que o processo de integração associado ao método nodal passa a ser definido para regiões do domínio, de tamanho arbitrário (nós). Também, como no caso unidimensional, as autofunções desenvolvidas nas equações (38) e (39) passam a ser definidas em termos dos autovetores do problema de autovalores. Nestes casos, no entanto, o problema de autovalores fundamental terá formulação diferente do caso isotrópico aqui discutido, mantendo contudo a mesma ordem Barichello et al. (2017). Tais mudanças permitem o tratamento de modelos mais complexos que envolvem, por exemplo, espalhamento anisotrópico. Resultados numéricos obtidos para os problemas bidimensionais foram, dessa forma, majoritariamente gerados a partir da versão destas autofunções numéricas.

4 Comentários Finais

Um método espectral, para solução de equações de transporte de partículas em geometrias uni e bidimensionais foi mostrado neste trabalho. A abordagem propõe soluções explícitas em termos das variáveis espaciais, para a chamada aproximação em ordenadas discretas do modelo original. Dessa forma o método é chamado de Método Analítico de Ordenadas Discretas. Além de apresentar uma revisão parcial de problemas resolvidos e avanços obtidos pelo método em anos recentes, o presente trabalho buscou enfatizar aspectos comuns da formulação aos modelos em diferentes geometrias, recaindo em problemas de autovalores de especial característica que contribuem para melhora da performance computacional da metodologia. Não foram aqui listados resultados numéricos que podem ser consultados nas diferentes referências citadas. Extensões da formulação (dependência energética, espalhamento anisotrópico) também não foram discutidas. O objetivo principal, que esperamos ter atingido, foi de motivação da importância da solução de modelos deste tipo no tratamento de diferentes problemas de interesse atual em ciência e tecnologia, dentro de uma perspectiva de métodos matemáticos com ênfase em soluções de caráter analítico.

Agradecimentos

Um dos autores (LBB) agradece ao CNPq por suporte financeiro a este e outros trabalhos.

5 Referências bibliográficas

Referências

- Azmy, Y. Y. (1988). The weighted diamond-difference form of nodal transport methods. *Nuclear Science Engineering*, 98, 29–40.
- Badruzzaman, A. (1985). An efficient algorithm for nodal-transport solutions in multidimensional geometry. *Nuclear Science and Engineering*, 89, 281–290.
- Barichello, L., Tres, A., Picoloto, C. B., Azmy, Y. Y. (2016). Recent studies on the asymptotic convergence of the spatial discretization for two-dimensional discrete ordinates solutions. *Journal of Computational and Theoretical Transport*, 45, 299–313.

- Barichello, L. B. (2011). *Explicit Formulations for Radiative Transfer Problems*. In: H. R. B. Orlande, O. Fudyin, D. Mailliet, R. M. Cotta (Org.) *Thermal Measurements and Inverse Techniques*. Boca Raton: CRC Press.
- Barichello, L. B., Siewert, C. E. (1999a). A discrete-ordinates solution for a non-grey model with complete frequency redistribution. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 62, 665–675.
- Barichello, L. B., Siewert, C. E. (1999b). A discrete ordinates solution for a polarization model with complete frequency redistribution. *The Astrophysical Journal*, 512, 370–382.
- Barichello, L. B., Siewert, C. E. (1999c). A discrete-ordinates solution for Poiseuille flow in a plane channel. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik*, 50, 972–981.
- Barichello, L. B., Siewert, C. E. (1999d). On the equivalence between the discrete-ordinates and the spherical-harmonics methods in radiative transfer. *Nuclear Science and Engineering*, 130, 79–84.
- Barichello, L. B., Siewert, C. E. (2000). The temperature-jump problem in rarefied-gas dynamics. *European Journal of Applied Mathematics*, 11, 353–364.
- Barichello, L. B., Siewert, C. E. (2001). A new version of the discrete-ordinates method. Em: *2nd International Conference on Heat and Mass Transfer, Computational Heat and Mass Transfer - CHMT 2001, E-Papers, Rio de Janeiro*, vol 01, pp. 340–347.
- Barichello, L. B., Siewert, C. E. (2003). Some comments on modeling the linearized Boltzmann equation. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 77, 43–59.
- Barichello, L. B., Camargo, M., Rodrigues, P., Siewert, C. E. (2001). Unified solution to classical flow problems based on the BGK model. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik*, 52, 517–534.
- Barichello, L. B., Cabrera, L. C., F. Prolo Filho, J. (2011). An analytical approach for a nodal scheme of two-dimensional neutron transport problems. *Annals of Nuclear Energy*, 38, 1310–1317.
- Barichello, L. B., Picoloto, C. B., da Cunha, R. D. (2017). The ADO-Nodal method for solving two-dimensional discrete ordinates transport problems. *Annals of Nuclear Energy*, 108, 376–385.
- Barichello, L. B., Pazinato, C. B., Rui, K. (2020). An analytical discrete ordinates nodal solution to the two-dimensional adjoint transport problem. *Annals of Nuclear Energy*, 135, Article 106,959.
- Barros, R. C., Larsen, F. W. (1992). A spectral nodal method for one-group x,y-geometry discrete ordinates problems. *Nuclear Science and Engineering*, 111, 34–45.
- Bhatnagar, P. L., Gross, E. P., Krook, M. (1954). A model for collision processes in gases. I. Small amplitude processes in charged and neutral one-component systems. *Phys Rev*, 94, 511.
- Camargo, M., Rodrigues, P., Barichello, L. B. (2000). Discrete-ordinates solutions to some classical flow problems in the rarefied gas dynamics. *8th Brazilian Congress of Thermal Engineering and Sciences - ENCIT 2000*.
- Cercignani, C. (2006). *Ludwig Boltzmann: The Man Who Trusted Atoms*. Oxford, Published to Oxford Scholarship Online: January 2010. Print ISBN-13: 9780198570646, DOI:10.1093/acprof:oso/9780198570646.001.0001.
- Chalhoub, E., Garcia, R. D. M. (2000). The equivalence between two techniques of angular interpolation for the discrete ordinates method. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 64, 517–535.
- Chandrasekhar, S. (1950). *Radiative Transfer*. Oxford university Press, London.
- Cromianski, S. R., Camargo, M., Rodrigues, P., Barichello, L. B. (2018). Avaliação de propriedades radiativas em meios homogêneos unidimensionais: reflectância e transmitância. *TEMA – Tendências em Matemática Aplicada e Computacional*, 18, 531–547.
- Cromianski, S. R., Rui, K., Barichello, L. B. (2019). A study on boundary fluxes approximation in explicit nodal formulations for the solution of the two-dimensional neutron transport equation. *Progress in Nuclear Energy*, 110, 354–363.
- Datta, B. N. (1995). *Numerical Linear Algebra and Applications*. Brooks/Cole Publishing Co, Pacific Grove, USA.
- Dombrovsky, A. L., Timchenko, V., Jackson, M., Yeoh, G. H. (2011). A combined transient thermal model for laser hyperthermia of tumors with embedded gold nanoshells. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 54, 5459–5469.

- Duderstadt, J. J., Martin, W. R. (1979). *Transport Theory*. John Wiley & Sons, Inc., New York.
- Ebeling, W., Sokolov, I. M. (2005). *Statistical Thermodynamics and Stochastic Theory of Nonequilibrium Systems*. World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., ISBN 978-90-277-1674-3.
- Gad-el-Hak, M. (2005). *MEMS: Introduction and Fundamentals*. CRC Press.
- Golub, G. H., Loan, C. F. V. (2013). *Matrix Computations*. 4th Edition, Johns Hopkins University Press, Baltimore.
- Haghighat, A. (2014). *Monte Carlo Methods for Particle Transport*. CRC Press.
- Klose, A. D., Netz, U., Beuthan, J., Hielscher, A. H. (2002). Optical tomography using the time-independent equation of radiative transfer, Part 1: forward model. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 72, 691–713.
- Knackfuss, R. F., Barichello, L. B. (2006). On the temperature-jump problem in rarefied gas dynamics: the effect of the Cercignani-Lampis boundary condition. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 66, 2149–2186.
- Lathrop, K. D., Brinkley, F. W. (1970). Theory and use of the general-geometry TWOTRAN program. *LA4432 - Los Alamos Scientific Lab Report, Univ of California*.
- Lewis, E. E., Miller, W. F. (1984). *Computational Methods of Neutron Transport*. John Wiley and Sons, New York.
- Modest, M. F. (2003). *Radiative Heat Transfer*. 2nd Edition, Academic Press, San Diego.
- Palmiotti, G., Rieunier, J. M., Gho, C., Salvatores, M. (1990). Optimized two-dimensional S_N transport (BISTRO). *Nuclear Science and Engineering*, 104, 26–33.
- Pazinatto, C. B., Barichello, L. (2018). Energy dependent source reconstructions via explicit formulations of the adjoint particles flux. *Journal of Computational and Theoretical Transport*, 47, 58–83.
- Pazinatto, C. B., Barichello, L. (2019). On the use of the adjoint operator for source reconstruction in particle transport problems. *Inverse Problems in Science and Engineering*, 27, 513–539.
- Picoloto, C. B., Tres, A., da Cunha, R. D., Barichello, L. B. (2013). Two-dimensional neutron transport problems with reflective boundary conditions: an analytical approach. Em: *International Nuclear Atlantic Conference, Recife*.
- Picoloto, C. B., Tres, A., da Cunha, R. D., Barichello, L. B. (2015). Closed-form solutions for nodal formulations of two dimensional transport problems in heterogeneous media. *Annals of Nuclear Energy*, 86, 65–71.
- Picoloto, C. B., da Cunha, R. D., Barros, R. C., Barichello, L. B. (2017). An analytical approach for solving a nodal formulation of two-dimensional fixed-source neutron transport problems with linearly anisotropic scattering. *Progress in Nuclear Energy*, 98, 193–201.
- Poursalehi, N., Zolfaghari, A., Minucmehr, A. (2013). An adaptive mesh refinement approach for average current nodal expansion method in 2-D rectangular geometry. *Annals of Nuclear Energy*, 55, 61–70.
- Prolo Filho, J. F., Barichello, L. B. (2014). General expressions for auxiliary equations of a nodal formulation for two-dimensional transport calculations. *Journal of Computational and Theoretical Transport*, 43, 1–22.
- Rodrigues, P., Barichello, L. (2004). An integral equation approach for radiative transfer in a cylindrical media. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, 83, 765–776.
- Scherer, C. S., Prolo Filho, J. F., Barichello, L. B. (2009a). An analytical approach to the unified solution of kinetic equations in the rarefied gas dynamics. I. Flow problems. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik*, 60, 70–115.
- Scherer, C. S., Prolo Filho, J. F., Barichello, L. B. (2009b). An analytical approach to the unified solution of kinetic equations in the rarefied gas dynamics. ii. heat transfer problems. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik*, 60, 651–687.
- Siewert, C. E. (2000). Poiseuille and thermal-creep flow in a cylindrical tube. *Journal of Computational Physics*, 160, 470–480.
- Siewert, C. E. (2003). The linearized Boltzmann equation: a concise and accurate solution to basic flow problems. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik*, 54, 273–303.
- Tatsios, G., Valougeorgis, D. (2020). Uncertainty analysis of computed flow rates and pressure differences in rarefied pressure and temperature driven gas flows through long capillaries. *European Journal of Mechanics / B Fluids*, 51, 190–201.

- Tres, A., Picoloto, C. B., F. Prolo Filho, J., da Cunha, R. D., Barichello, L. B. (2014). Explicit formulation of a nodal transport method for discrete ordinates calculations in two-dimensional fixed-source problems. *Kerntechnik*, 79, 155–162.
- Wang, M., Lan, X., Li, Z. (2008). Analyses of gas flows in micro and nanochannels. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 51, 3630–3641.
- Wick, G. C. (1943). über ebene Diffusionsprobleme. *Zeitschrift für Physik*, 121, 702–718.
- Wu, L., Struchtrup, H. (2017). Assessment and development of the gas kinetic boundary conditions for the Boltzmann equation. *J Fluid Mech*, 823, 511–537.
- Xu, L., Cao, L., Zheng, Y., Wu, H. (2018). Hydra: a 3-D parallel discrete ordinates code for massive transport calculation. *PHYSOR 2018, Cancun, Mexico, April 22-26*.
- Ziegenhein, P., Pierner, S., Kamerling, C. P., Oeifke, U. (2015). Fast CPU-based Monte Carlo simulation for radiotherapy dose calculation. *Physics in Medicine and Biology*, 60, 6097–6111.