



UMA ESTRATÉGIA BASEADA EM FORMALISMO PETROV-GALERKIN PARA  
AS ITERAÇÕES INTERNAS UTILIZADAS NA SOLUÇÃO NUMÉRICA DA  
EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE NÊUTRONS EM ORDENADAS DISCRETAS  
( $S_N$ ), GEOMETRIA CARTESIANA BIDIMENSIONAL E MULTIGRUPOS DE  
ENERGIA

Lenilson Moreira Araujo

Tese de Doutorado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Nuclear, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Doutor em Engenharia Nuclear.

Orientador(es): Eduardo Gomes Dutra do Carmo  
Fernando Carvalho da Silva

Rio de Janeiro  
Março de 2015

UMA ESTRATÉGIA BASEADA EM FORMALISMO PETROV-GALERKIN PARA  
AS ITERAÇÕES INTERNAS UTILIZADAS NA SOLUÇÃO NUMÉRICA DA  
EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE NÊUTRONS EM ORDENADAS DISCRETAS  
( $S_N$ ), GEOMETRIA CARTESIANA BIDIMENSIONAL E MULTIGRUPOS DE  
ENERGIA

Lenilson Moreira Araujo

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO LUIZ  
COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE) DA  
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS  
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM  
CIÊNCIAS EM ENGENHARIA NUCLEAR.

Examinada por:

---

Prof. Fernando Carvalho da Silva, D.Sc..

---

Prof. Eduardo Gomes Dutra do Carmo, D.Sc.

---

Prof. Ricardo Carvalho Barros, Ph.D.

---

Prof. Alessandro da Cruz Gonçalves, D.Sc.

---

Prof. Hermes Alves Filho, D.Sc.

---

Profa. Franciane Conceição Peters, D.Sc.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

MARÇO DE 2015

Araujo, Lenilson Moreira

Uma Estratégia Baseada em Formalismo Petrov-Galerkin para as Iterações Internas Utilizadas na solução Numérica da Equação de Transporte de Nêutrons em Ordenadas Discretas ( $S_N$ ), Geometria Cartesiana Bidimensional e Multigrupos de Energia/ Lenilson Moreira Araujo – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2015.

XI, 110 p.: il.; 29,7 cm.

Orientadores: Eduardo Gomes Dutra do Carmo

Fernando Carvalho da Silva

Tese (doutorado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Nuclear, 2015.

Referências Bibliográficas: p. 101 - 105.

1. Equação de Transporte de Nêutrons. 2. Elementos Finitos. 3. Petrov - Galerkin/ I. Eduardo Gomes Dutra do Carmo, *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

*Aos meus Pais Luiz e Maria do  
Socorro.*

*Aos meus irmãos Leandro  
Leiane, e Luis Jr.*

*“Quem corrige alguém receberá depois sua  
gratidão, mais do que aquele que lisonjeia.”*

*Provérbios 28:23*

## AGRADECIMENTOS

Antes de tudo agradeço a Deus por me conceder a vitória de poder concluir o doutorado em uma das melhores instituições de ensino do país. Por me fazer trilhar por todos os caminhos que me conduziram até a realização desse sonho. Por não permitir que eu seguisse sozinho nessa jornada, colocando pessoas maravilhosas ao meu lado, as quais contribuíram de forma importante para que eu tivesse a força necessária para transpor cada uma dos obstáculos que surgiram diante de mim. A essas pessoas expressarei os meus sinceros agradecimentos.

Agradeço a toda minha família. Aos meus pais Luiz Moreira de Araújo e Maria do Socorro Moreira Araújo, pelo amor, pelas orações, e por sempre demonstrarem veementemente a fé que têm em mim. Ao meu irmão Leandro pelos conselhos e pelo exemplo de pessoa que você é, e também a sua esposa Erylaine. Aos meus irmãos Luiz Jr e Leiane, que mesma à distância, nunca deixaram de me apoiar.

Agradeço a minha noiva Jaqueline e sua família pela compreensão e pelo carinho que sempre me concederam. Em especial agradeço a sua vó Juvenira que tem me tratado com um filho.

Aos professores da Universidade Federal do Pará, por me ensinarem a dar os primeiros passos no caminho que me conduziu até aqui, também aos amigos que ganhei durante minha graduação, em especial aos amigos Elizeu Melo, Marco Aurélio e Valdeire.

A todos os professores do Instituto Militar de Engenharia, agradeço pelo privilegio de receber seus ensinamentos, em especial ao professor Ronaldo Glicério Cabral pela honra de ser seu orientado, sempre levarei comigo os ensinamentos e valores que aprendi com o senhor. Aos amigos Bianca, Gustavo, Jardel, Marcelo e Yuri, pelo companheirismo em todos os desafios que vivenciamos e vencemos juntos. Agradeço com a certeza de que são amigos que levarei por toda a vida.

Agradeço a todos os meus colegas da Universidade Federal do Oeste do Para, Aquino, Hugo, Mancuso, Tanaka, Angélica, Hamilton, Aroldo, Aldenise, Marilu,

Sergio, Sergio Farias, Marcos, Glauco, Daiane e Mauricio pelo apoio que concederam desde o meu primeiro dia de trabalho.

Agradeço aos colegas de doutorado Wemerson, Dalton, Paulo Igor, Debora, Daniele e Adriano pelos momentos de descontração e pela troca de ideias que ao final do dia, sempre renderam bons frutos em nossas pesquisas.

Agradeço aos professores do PEN, Aquilino Senra , Paulo Fernando e Alvin pela convivência e pelos momentos de descontração. Agradeço em especial aos professores Eduardo Gomes e Fernando Carvalho pelo conhecimento transmitido, pela atenta orientação e pela paciência que tiveram comigo durante esses 4 anos de doutorado. Tenho vocês como referência no meu desenvolvimento profissional.

Agradeço e também peço desculpas todos que contribuíram de alguma forma comigo e agora não recordo.

A todos que contribuíram com esta caminhada o mais profundo agradecimento.

Resumo da Tese apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Doutor em Ciências (D.Sc.)

UMA ESTRATÉGIA BASEADA EM FORMALISMO PETROV-GALERKIN PARA  
AS ITERAÇÕES INTERNAS UTILIZADAS NA SOLUÇÃO NUMÉRICA DA  
EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE NÊUTRONS EM ORDENADAS DISCRETAS  
( $S_N$ ), GEOMETRIA CARTESIANA BIDIMENSIONAL E MULTIGRUPOS DE  
ENERGIA

Lenilson Moreira Araujo

Março/2015

Orientadores: Eduardo Gomes Dutra do Carmo

Fernando Carvalho da Silva

Programa: Engenharia Nuclear

A equação de transporte de nêutrons em sua forma integro-diferencial é de difícil solução (analítica ou numérica) em virtude da complexidade da própria equação de transporte, por esse motivo muitos métodos numéricos são desenvolvidos para solucioná-la. Nesse contexto o método dos elementos finitos, em suas diversas formulações, apresenta-se como uma das alternativas para a construção de modelos matemáticos capazes de resolver a equação de transporte de nêutrons.

O objetivo deste trabalho é desenvolver uma estratégia iterativa baseada na formulação de elementos finitos Petrov-Galerkin conhecida como GLS (Galerkin Least Square), capaz de resolver problemas de fonte fixa descritos a partir equação de transporte de nêutrons em ordenadas discretas, geometria cartesiana bidimensional e multigrupos de energia, independente do tempo, que apresente boas taxas de convergências e que possua boas propriedades de aproximação a fim de garantir soluções com precisão satisfatória.



Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

A STRATEGY BASED ON PETROV – GALERKIN FORMALISM FOR THE  
INNER ITERATIONS USED IN NUMERICAL SOLUTION OF THE NEUTRON  
TRANSPORT EQUATION IN DISCRETE ORDINATE ( $S_N$ ), TWO-DIMENSIONAL  
CARTESIAN GEOMETRY AND ENERGY MULTIGROUP FORMULATION

Lenilson Moreira Araujo

March/2015

Advisors: Eduardo Gomes Dutra do Carmo

Fernando Carvalho da Silva

Department: Nuclear Engineering

The neutron transport equation in its integro-differential form is difficult to solve (analytically or numerically) due to the complexity of the transport equation. Therefore many numerical methods have been developed to solve it. In this context the finite element method, in its various formulations, is presented as one of the alternatives for the construction of mathematical models to solve the neutron transport equation.

The aim of this work is to develop an iterative strategy based on Petrov - Galerkin finite element formulation known as GLS (Galerkin Least Square), able to solve fixed source problems described from the neutron transport equation in discrete ordinates, two-dimensional Cartesian geometry and energy multigroups, in the steady state. This strategy presents good convergence rates and having good approximation properties in order to ensure solutions with satisfactory precision.

## SUMÁRIO

|   |           |
|---|-----------|
| <b>1. INTRODUÇÃO.....</b>   | <b>1</b>  |
| 1.1 Definição do Assunto da Tese.....   | 1         |
| 1.2 O Estado do Arte.....   | 3         |
| 1.3 Contribuições da Metodologia Proposta .....   | 9         |
| 1.4 Relevância da Tese.....   | 10        |
| 1.5 Descrição dos Capítulos.....  | 11        |
| <br>  |           |
| <b>2 O PROBLEMA DE TRANSPORTE DE NÊUTRONS .....</b>   | <b>14</b> |
| 2.1 A Equação de Transporte de Nêutrons.....  | 14        |
| 2.2 Equação de Transporte de Nêutrons 2D na Formulação de Multigrupos e $S_N$ com Aproximação $P_L$ para a Seção de Choque Diferencial de Espalhamento..... | 15        |
| <br>  |           |
| <b>3 O PROBLEMA DA ITERAÇÃO INTERNA E PRECISÃO.....</b>   | <b>21</b> |
| 3.1 Equações Oriundas da Aproximação Multigrupo e do Método $S_N$ .....   | 21        |
| <br>  |           |
| <b>4 UMA ESTRATEGIA BASEADA EM FORMALISMO PETROV-GALERKIN PARA AS ITERAÇÕES INTERNAS .....</b>  | <b>24</b> |
| 4.1 Problema Modelo.....  | 24        |
| 4.2 Formalismo de Elementos finitos.....  | 26        |
| 4.3 Formulação Galerkin Partial Least Square (GpLS).....  | 29        |
| 4.4 Esquema Iterativo para Desacoplamento do Sistema.....   | 31        |
| 4.5 Pós-processamento para a Condição de Contorno de Dirichlet Fraca .....  | 35        |
| 4.5.1 Considerações Sobre a Condição de Contorno de Dirichlet Fraca.....  | 35        |
| 4.5.2 Pós-Processamento da Solução (Condição de Dirichlet Fraca) .....  | 37        |
| 4.5.3 Estimativa de Erro.....   | 38        |
| 4.5.3.1 Determinação da Desigualdade (4.44a).....   | 46        |
| <br>  |           |
| <b>5 EXPERIMENTOS NUMÉRICOS.....</b>  | <b>50</b> |
| 5.1 Experimentos Numéricos com Fonte Fixa Hipotética .....  | 52        |
| 5.1.1 Análise do Número de Iterações Internas com Condição de Dirichlet Forte.....  | 52        |

|          |  |            |
|----------|--|------------|
| 5.1.2    | Análise do Número de Iterações Internas com Condição de Dirichilet Fraca.....                                | 54         |
| 5.1.3    | Análise de Convergência com Condição de Dirichilet Forte .....   | 58         |
| 5.1.4    | Análise de Convergência com Condição de Dirichilet Fraca.....  | 64         |
| 5.1.5    | Análise do nível de Refinamento da Malha (Condição de Dirichilet Fraca).....                                 | 69         |
| 5.2      | Experimentos Numéricos com Fonte Fixa Real.....  | 70         |
| 5.2.1    | Análise do Número de Iterações Internas com Condição de Dirichilet Forte .....                               | 71         |
| 5.2.2    | Análise do Número de Iterações Internas com Condição de Dirichilet Fraca.....                                | 73         |
| 5.2.3    | Análise de Convergência com Condição de Dirichilet Forte .....   | 75         |
| 5.2.4    | Análise de Convergência com Condição de Dirichilet Fraca.....  | 79         |
| 5.2.5    | Análise do nível de Refinamento da Malha(Condição de Dirichilet Fraca).....                                  | 83         |
| 5.3      | Validação do método Proposto .....   | 85         |
| 5.3.1    | Comparação das Soluções Obtidas pelas Formulações de Elementos Finitos ....                                  | 85         |
| 5.3.2    | Comparação das Soluções Obtidas pelas Formulações de Elementos Finitos e pelo Método Diamond Difference..... | 93         |
| <b>6</b> | <b>CONCLUSÕES E SUGESTÕES FUTURAS .....</b>  | <b>98</b>  |
| 6.1      | Conclusões .....   | 98         |
| 6.2      | Sugestões Para Trabalhos Futuros.....  | 99         |
|          | <b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS .....</b>  | <b>101</b> |
|          | <b>Apêndices .....</b>   | <b>106</b> |

# 1. INTRODUÇÃO

## 1.1 Definição do Assunto da Tese

Em 1958 Kurt Otto Friedrichs introduziu sistemas de equações diferenciais parciais de primeira ordem (sistemas de Friedrichs) que englobam uma vasta diversidade de problemas da ciência e da engenharia, tais como, problemas de transporte de fluidos, transporte de gás e transporte de calor em um meio material.

Em engenharia nuclear temos os problemas de penetração profunda ou problemas de fonte fixa, onde partículas sem carga (fótons ou nêutrons) reagem com o meio que possui propriedades absorvedoras e refletivas. Tais problemas são matematicamente tratados a partir da equação linearizada de transporte de Boltzmann que nesse contexto modela o balanço de nêutrons que são produzidos e removidos no interior de um volume de controle. Esses nêutrons podem ser emitidos por uma fonte externa e/ou podem ser gerados no interior do próprio volume por interações com os núcleos dos átomos do meio material e/ou podem incidir no domínio pelos contornos, já a remoção desses nêutrons pode ocorrer por um processo de absorção, espalhamento para outros grupos de energia e/ou outras direções ou ainda pela eventual fuga através das fronteiras do volume. A equação de transporte de nêutrons em sua forma integro-diferencial [1] é de difícil solução (analítica ou numérica) em virtude da complexidade das funções e do número de variáveis independentes envolvidas. Por esse motivo muitos métodos numéricos são desenvolvidos para solucioná-la. Porém, é importante ressaltar que em sua forma integro-diferencial a equação de transporte de nêutrons não se encaixa no modelo matemático de Friedrichs [2]. Portanto para tratarmos do transporte

de nêutrons como um caso particular de sistemas de Friedrichs, neste trabalho, foram feitas as seguintes considerações físicas e matemáticas:

- (i) Eliminamos a dependência temporal considerando o regime estacionário;
- (ii) Consideramos uma geometria plana a fim de simplificar o tratamento das variáveis espaciais;
- (iii) Discretizamos a variável energia pela formulação de multigrupos;
- (iv) Tratamos da dependência angular com o método de ordenadas discretas (método  $S_N$ );
- (v) Aproximamos a seção do choque de espalhamento a uma expansão em termos de polinômios de Legendre (Aproximação  $P_L$ ).

Tais procedimentos tornam possível representar esse problema de transporte na forma de um sistema de EDP (Equações Diferenciais Parciais) acoplado de grande porte envolvendo um enorme número de equações, que é um caso particular do chamado sistema de Friedrichs.

A solução direta de tais sistemas torna-se muitas vezes inviável devido ao grande número de graus de liberdade. Para a solução desse problema os métodos iterativos [1], [3] têm-se apresentado como os métodos mais adequados. Todavia existe uma baixa taxa de convergência no que é chamado de iteração interna. Portanto, é desejável o desenvolvimento de esquemas iterativos que apresentem boas taxas de convergências e que possuam boas propriedades de aproximação a fim de garantirem soluções com precisão satisfatória. Nesse contexto o método dos elementos finitos, em suas diversas formulações, se apresenta como uma das alternativas para a construção de

modelos matemáticos capazes de resolver a equação de transporte de nêutrons iterativamente.

Tendo em vista que a estratégia aqui proposta trata apenas da iteração interna, temos que o objetivo deste trabalho é desenvolver uma estratégia iterativa com as propriedades descritas acima, baseada na formulação de elementos finitos Petrov - Galerkin para discretização do domínio espacial, capaz de resolver problemas de fonte fixa descritos a partir da equação de transporte de nêutrons em ordenadas discretas, geometria cartesiana bidimensional e multigrupos de energia, independente do tempo. A fim de demonstrar o bom desempenho do esquema desenvolvido, faz-se a apresentação de estimativas de erro, bem como comparações com as taxas de convergência de outros métodos. Experimentos numéricos confirmam a boa performance do esquema proposto.

## **1.2 O Estado do Arte**

Nos últimos 50 anos, várias técnicas foram desenvolvidas para resolver a equação de transporte de radiação. Entre as quais podemos citar o método de Monte Carlo, método das ordenadas discretas, método dos harmônicos esféricos, método espectral, método das diferenças finitas (MDF) e o método dos elementos finitos (MEF), por vezes também chamado de método de elementos finitos de Galerkin clássico.

O MEF foi desenvolvido entre as décadas de 50 e 60 por engenheiros para a resolução de equações diferenciais parciais (EDP) em problemas de engenharia estrutural. Em comparação com o MDF, o MEF exige um maior esforço computacional

justamente por possuir uma formulação matemática mais robusta e mais complexa, no entanto o MEF possui a vantagem de suportar malhas estruturadas e malhas não-estruturadas, enquanto o MDF limita-se a malhas estruturadas uniforme.

Há mais de 3 décadas sabe-se que para alguns problemas descritos por equações diferenciais hiperbólicas, as soluções obtidas pelo MEF de Galerkin padrão (ou clássico) podem apresentar oscilações espúrias [3]. Sendo necessário um alto grau de discretização do domínio para de eliminar essas oscilações. Diante dessa problemática surgiram métodos de elementos finitos não padronizados capazes de eliminar tais oscilações, entre os quais se destacaram o método dos elementos finitos descontínuos (MEFD), por vezes chamado de Galerkin Descontínuo (GD), o método mínimos quadrados de elementos finitos (MQEF), mais conhecido como método LS(Least Square) e ainda o método GLS (Galerkin Least Square) também conhecido na comunidade de elementos finitos como Streamline Diffusion Method.

A seguir descreveremos um breve histórico da aplicação do método de elementos finitos ao problema de transporte de nêutrons .

O MEF foi inicialmente apresentado para solucionar a equação de transporte de nêutrons independente do tempo por Reed e Hill em 1973 [4]. Posteriormente foram desenvolvidas diversas variações do MEF e MEFD como, por exemplo, o método dos elementos finitos descontínuos lineares (MEFDL) [4, 5, 6, 7 e 8] capaz de resolver o problema de transporte de nêutrons dependente e independente do tempo.

Um das grandes vantagens apresentadas pelo método elementos finitos é sua eficiência em representar sistemas com geometria irregular, condições de contorno não usuais e composição heterogênea. Devido à essas vantagens uma tendência natural das pesquisas envolvendo o MEF e o MEFD, é a aplicação desses métodos na resolução da

equação de transporte de nêutrons considerando diversas geometrias. Seguindo essa vertente podemos citar a recente aplicação do MEFDL em geometrias esféricas [9] e em geometrias cilíndricas [10], e ainda aplicação do MEFDL juntamente com o método dos elementos finitos quadrados (MEFQ) [11] em geometria esférica.

Com o objetivo de desenvolver novas formulações de elementos finitos, temos que outra tendência evolutiva dessas pesquisas é a combinação do MEF e do MEFD com outros métodos. Como resultado dessas combinações podemos citar o método Galerkin descontínuo de ordenadas discretas (GDOD), apresentado em [12], quando Eichholz resolveu a equação de transporte considerando tanto nêutrons quanto fótons em geometria esférica.

Inicialmente elaborado para tratar problemas de escoamento de fluidos, o método GLS é considerado um método de elementos finitos estabilizado que possui propriedades de aproximação comprovadamente melhores que o método de Galerkin usual [2]. O método GLS é amplamente aplicado em problemas relacionados à mecânica dos fluidos, dinâmica dos gases e propagação de ondas. No entanto, mesmo após exaustivas pesquisas bibliográficas, ainda não verificamos nenhuma aplicação de formulações do tipo GLS em neutrônica. Porém verificamos avanços nas pesquisas em que formulações de elementos finitos do tipo GD, LS (Least Square) e SUPG (Streamline Upwind Petrov - Galerkin) são aplicadas ao problema de transporte de nêutrons.

Em 1998 uma formulação do tipo LS juntamente com o método dos harmônicos esféricos (aproximação  $P_N$ ) foi aplicado a equação de transporte de nêutrons em regimes difusivos por Manteuffel e Ressel *et al.* [13]. Em 2000, motivado pelo fato de que o método dos harmônicos esféricos, utilizado para tratar a dependência angular, apresenta



oscilações no contorno do domínio espacial, Manteuffel *et al.* propõem uma forma de contornar esse problema por meio de uma nova formulação do método LS, a qual incorpora as condições de contorno aos seus funcionais em [14]. Durante esse mesmo período o método de ordenadas discretas (método  $S_N$ ) foi apresentado como uma alternativa para a discretização da dependência angular do transporte de nêutrons, havendo a partir desse momento um acentuado aumento no número de publicações envolvendo a aplicação de elementos finitos com o método  $S_N$ , entre as quais podemos citar o trabalho de Barros [15]. Em seu artigo Barros apresenta formulações de elementos finitos descontínuos em combinação com os métodos  $S_N$  e  $P_N$ , as quais são capazes de resolver com elevada acurácia a equação de transporte de nêutrons em domínio espacial heterogêneo.

Em 2006, apontando na direção correspondente à aplicação do método GLS a equação de transporte de nêutrons temos o método apresentado na referência [16]. Nessa referência são propostos diversos esquemas Petrov-Galerkin tipo operador de captura. É fornecida ainda uma maneira geral de se obter formalismos Petrov-Galerkin GLS, SUPG e Operadores de Captura de diferentes autores [17, 18, e 19]. Todavia nenhum esquema, é proposto para a resolução das equações oriundas do método  $S_N$ . Nesse trabalho uma formulação elementos finito descontínuos conhecida como método Full Riemann SUPG é aplicada a equação de transporte de Boltzmann em harmônicos esféricos e regime estacionário como uma eficiente alternativa para eliminar as oscilações espúrias provenientes do método de Galerkin usual. As formulações SUPG sugeridas nesse trabalho necessitam do que é conhecido como matriz de estabilização. Conhecendo as propriedades de aproximação, bem como a estabilidade do método GLS, Pain *et al.* [16] fazem uso da matriz de estabilização do método GLS (bem como de outros métodos) aplicando-a às formulações SUPG, a fim de comparar e validar a

metodologia desenvolvida em seu trabalho. Entretanto, é importante destacar que apesar de conhecer as propriedades e vantagens do método GLS e também fazer uso de sua matriz de estabilização, Pain *et al.* [16] não utilizam esse método para resolver o problema de transporte de nêutrons, deixando essa missão para a posteridade. Dever ser ressaltado ainda que o método a ser apresentado nessa tese é um formalismo Petrov-Galerkin que não é considerado na referência [16] ao fazer a explicitação de  $\mathbf{Q}$ ,  $\mathbf{U}$ ,  $\bar{\mathbf{A}}$  e  $\mathbf{P}$ , na equação (14) da referência mencionada. Portanto, é um formalismo Petrov-Galerkin ainda não proposto para o método  $S_N$ .

Em 2007, Hai-tao Ju *et al.* em [20] utiliza a formulação variacional de mínimos quadrados inicialmente desenvolvida por Manteuffel *et al.* [13] para propor um método capaz solucionar a equação de transporte de nêutrons em geometria cartesiana tridimensional. Porém, diferente de Manteuffel *et al.* [13] que utilizou a aproximação  $P_N$  para tratar da dependência angular, e também de Barros [15] que fez uso de métodos de elementos finitos descontínuos para discretização angular, o método proposto por Hai-tao Ju *et al.* [20] baseia-se em ordenadas discretas e em elementos finitos contínuos para discretização espacial e em ordenadas discretas para discretização angular.

Um ano depois, no ano de 2008, Merton *et al.* [21] retoma as formulações SUPG desenvolvida por Pain *et al.* [16] e propõe um esquema baseado em Galerkin descontínuo para tratar a equação de transporte de nêutrons com discretização angular arbitrária. Todavia esquemas Galerkin descontínuo produzem proliferação excessiva dos graus de liberdade, o que causa um aumento substancial do esforço computacional, que é reforçado pelo uso da formulação apresentada em [16], que também produz um aumento no custo computacional com relação ao esquemas GLS. Em seu trabalho Merton propõe uma nova definição para a matriz de estabilização empregando um

termo de estabilização que age na direção do campo advectivo. Porém a forma proposta da matriz de estabilização implica em um extremo aumento do custo computacional sem um correspondente ganho na precisão.

Assim como os métodos GD, LS e SUPG, o método GLS também tem a capacidade de eliminar as oscilações espúrias inerentes ao método de Galerkin clássico, mas com a vantagem de apresentar um menor esforço computacional e uma maior simplicidade de implementação. Diante de tudo o que foi apresentado, temos que, o principal objetivo desta tese, é a aplicação do método GLS ao problema de transporte de nêutrons.

A formulação de elementos finitos Petrov-Galerkin que utilizamos na construção da estratégia iterativa que propomos para resolver a equação de transporte de nêutrons multigrupos em ordenadas discretas, geometria cartesiana bidimensional e independente do tempo, baseia-se no método GLS, que é na verdade uma técnica híbrida que combina o método Galerkin clássico com o método LS, através da soma das formas bilineares e funcionais correspondentes a essas formulações, conforme pode ser visto em [22]. Devido às formulações anteriormente citadas estarem intrinsicamente ligadas por meio da relação  $GLS = Galerkin + LS$ , a fim de demonstrarmos as características e vantagens da formulação que propomos, utilizaremos como base comparativa a formulação de Galerkin clássico apresentado em [3], e a formulação LS apresentada em [20]. Optamos por trabalhar com um método estabilizado e uma formulação de elementos finitos contínuos a fim de obtermos um esquema iterativo com boas propriedades de aproximação e de baixo esforço computacional.

### 1.3 Contribuições da Metodologia Proposta

A estratégia iterativa que propomos para resolver numericamente a equação de transporte de nêutrons em ordenadas discretas, geometria cartesiana bidimensional e multigrupos de energia em regime estacionário, traz as seguintes contribuições.

A primeira delas, e certamente a mais importante, é a aplicação da formulação Petrov-Galerkin conhecida como GLS à equação de transporte de nêutrons. Conforme dissemos na seção 1.2, exaustivas pesquisas bibliográficas indicam que até o momento, não houve aplicações dessa formulação ao problema de transporte de nêutron, como a que será proposta nesta tese. Portanto a estratégia iterativa aqui proposta é original com relação à aplicação da formulação GLS. No entanto a formulação que propomos nesse trabalho, a qual denominamos GpLS (Galerkin Partial Least Square), é na verdade uma variação da formulação GLS. Usamos o termo “Partial” devido ao fato de que o Método GLS completo definido em [22] considera em sua formulação a projeção total dos resíduos em cada uma das equações constituintes do sistema de EDPs, sendo que em nossa formulação GpLS essa projeção é parcial, contudo, dentro do loop iterativo o GpLS assemelha-se ao GLS completo, já que a técnica iterativa utilizada é semelhante ao método de Gauss- Seidel.

A segunda contribuição é a inédita aplicação do que é chamado de condição de Dirichlet fraca ao problema de transporte de nêutrons. Esse tipo de condição de contorno foi desenvolvido por Nitsche [23] e é descrita em [22]. Sua principal característica é não “exigir” que a solução proveniente de formulações variacionais satisfaça exatamente os valores prescritos no contorno. Isso ocorre devido ao fato de que diferente da condição de contorno de Dirichlet Forte (ou clássica), a condição de

contorno de Dirichlet fraca faz parte da equação variacional associada ao problema de valor de contorno, sendo portanto parte constituinte dos funcionais inerentes às formulações variacionais. A aplicação desse tipo de condição de contorno permite uma melhor aproximação da solução exata (analítica) no interior do domínio espacial e ainda fornece uma forma de avaliar se o nível de discretização (refinamento) do domínio espacial (malha) está adequado ao problema e à formulação de elementos finitos considerada. O esforço computacional extra devido às integrais no contorno pode ser considerado pequeno.

Aplicar a condição de contorno de Dirichlet fraca ao problema de valor de contorno significa não exigir (dentro do loop iterativo) que a solução obtida pela formulação variacional considerada esteja em plena concordância com os valores prescritos no contorno, eles são valores aproximados. Todavia é desejável que os valores verdadeiros do contorno, após a convergência do esquema iterativo, sejam incorporados à solução. Isso nos conduz à terceira contribuição desta tese para as pesquisas feitas em neutrônica, que é a construção e aplicação de um mecanismo de pós-processamento capaz de corrigir a solução proveniente da formulação variacional considerada nos pontos pertencentes ao contorno do domínio espacial, onde a solução é prescrita.

#### **1.4 Relevância da Tese**

As contribuições acima citadas proporcionam o desenvolvimento de um método de elementos finitos iterativo geral, com boa precisão, de baixo custo computacional e de simples implementação, válido para qualquer domínio e que suporta malhas não

estruturadas, permitindo refinamentos localizados, o que é desejável para os parâmetros descontínuos da equação diferencial a ser resolvida.

## 1.5 Descrição dos Capítulos

Dividimos esse trabalho em 5 capítulos e 1 apêndice, com a intenção de fazermos uma apresentação clara dos objetivos e resultados obtidos.

A apresentação dos capítulos ocorre de forma a contemplar os aspectos teóricos envolvidos, as técnicas, as ferramentas de análise e os resultados obtidos. Os apêndices são utilizados para apresentação dos parâmetros nucleares utilizados e para detalhamento do formalismo matemático e computacional das técnicas empregadas.

O desenvolvimento do caso estudado é detalhado nos capítulos desta tese, de modo a possibilitar um melhor encadeamento de ideias.

Neste **capítulo 1**, foi apresentada nas seções 1.1 a 1.3 uma visão geral sobre as propriedades físico-matemáticas e as dificuldades de se resolver a equação de transporte de nêutrons, fazendo menção aos diversos métodos que foram desenvolvidos para resolvê-la. Declara-se o objetivo desta tese e em seguida é apresentada uma revisão bibliográfica dos principais trabalhos publicados sobre aplicação dos elementos finitos à equação de transporte de nêutrons em que a dependência angular é tratada com o método  $S_N$ , evidenciando que até o momento não houve a aplicação do método GLS ao problema de transporte de nêutrons (como ele é desenvolvido nesta tese), e por fim apontamos os pontos de originalidade desta tese.

O **capítulo 2** descreve a equação de transporte de nêutrons em sua forma integro-diferencial de primeira ordem, destacando as considerações físicas e matemáticas mais usuais na literatura disponíveis à sua resolução e por fim apresentamos a equação de transporte de nêutrons 2D na formulação  $S_N$  e multigrupos com aproximação  $P_L$  para a seção de choque diferencial de espalhamento, o que corresponde à forma na qual iremos tratá-la.

No **capítulo 3** relatamos as implicações da aplicação conjunta da aproximação multigrupo e ordenadas discretas à equação de transporte de nêutrons, enfatizando a relação convergência versus precisão inerente aos métodos iterativos. Destacamos ainda, algumas das condições em que a convergência das iterações internas e externas torna-se problemática.

No **capítulo 4** apresentamos de forma detalhada todas as etapas da estratégia iterativa proposta para resolver a equação de transporte de nêutrons destacando, o problema a ser resolvido, a formulação GpLS considerada, o esquema iterativo implementado, as implicações da aplicação da condição de contorno de Dirichlet Fraca, o desenvolvimento do mecanismo de pós-processamento aplicado à solução obtida e, por fim, uma estimativa de erro da formulação proposta.

O **capítulo 5** é reservado aos experimentos numéricos que visam comprovar a funcionalidade e eficiência da estratégia iterativa proposta, bem como as características e vantagens da formulação Petrov- Galerkin GpLS apresentada neste trabalho.

O **capítulo 6** traz as conclusões, recomendações e sugestões para trabalhos futuros.

Os **apêndices** apresentam os parâmetros nucleares utilizados nas simulações realizadas ao longo do capítulo 5, e ainda o algoritmo de integração de Gauss para superfícies utilizado ao final do capítulo 5.



## 2 O PROBLEMA DE TRANSPORTE DE NÊUTRONS

### 2.1 A Equação de Transporte de Nêutrons

Para elaboração e execução de projetos de reatores nucleares é imprescindível conhecer o comportamento do fluxo de nêutrons que possibilita o funcionamento adequado desses sistemas. Um dos principais problemas em pesquisas de reatores nucleares é determinar esse comportamento. Esse problema pode ser tratado pela teoria de transporte de nêutrons, que estuda o deslocamento de nêutrons em diferentes meios, e que obtém a distribuição do fluxo neutrônico no tempo, no espaço e na energia. Para tanto é necessário que se tenha conhecimento das propriedades e grandezas microscópicas e macroscópicas do sistema físico. O modelo matemático que rege o transporte de nêutrons é uma equação linear de Boltzmann, deduzida a partir do princípio da conservação (ou balanço) do número de nêutrons em um elemento de volume. A equação descrita abaixo é a equação de transporte de nêutrons em sua forma integro-diferencial [1].

$$\begin{aligned} & \frac{1}{V(E)} \frac{\partial}{\partial t} \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) + \hat{\Omega} \cdot \nabla \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) + \Sigma_t(\vec{r}, E, t) \varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t) \\ & = \frac{\chi(E)}{4\pi} \int_{4\pi} \int_0^\infty \nu(E') \Sigma_f(\vec{r}, E', t) \varphi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) dE' d\Omega' \\ & + \int_{4\pi} \int_0^\infty \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}, t) \varphi(\vec{r}, E', \hat{\Omega}', t) dE' d\Omega'. \end{aligned} \quad (2.1)$$

Aqui definimos:

$\hat{\Omega}$  é o vetor unitário que define a direção de movimento do nêutron;

$V(E)$  é a velocidade do nêutron com energia  $E$ ;

$\varphi(\vec{r}, E, \hat{\Omega}, t)$  é o fluxo angular de nêutrons ;

$\Sigma_t(\vec{r}, E, t)$  é a seção de choque macroscópica total;

$\chi(E)$  é o espectro de fissão;

$\nu(E')$  é o número médio de nêutrons que nascem na fissão causada por nêutron com energia  $E'$ ;

$\Sigma_f(\vec{r}, E', t)$  é a seção de choque macroscópica de fissão;

$\Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \rightarrow \hat{\Omega}, t)$  é a seção de choque macroscópica duplamente diferencial de espalhamento.

## **2.2 Equação de Transporte de Nêutrons 2D na Formulação de Multigrupos e $S_N$ com Aproximação $P_L$ para a Seção de Choque Diferencial de Espalhamento**

A equação de transporte de nêutrons em sua forma integro-diferencial é de difícil solução analítica em vista da complexidade das funções e do número de variáveis independentes envolvidas. Encontrar soluções mesmo que numéricas para a equação de transporte de nêutrons, só é possível se o sistema for idealizado, de modo a permitir substanciais simplificações. Apresentaremos a seguir algumas das mais tradicionais hipóteses simplificadores da equação de transporte de nêutrons.

Quando se deseja eliminar a dependência temporal, considera-se o regime estacionário, no qual o fluxo neutrônico independe do tempo. A dependência espacial do problema para geometrias gerais é de difícil tratamento. Uma maneira de se contornar esse problema é considerando uma geometria plana. Para o tratamento da variação energética do fluxo faz-se uma subdivisão finita do intervalo de energia. Esses subintervalos são chamados de multigrupos. Uma forma de tratar a dependência angular é aplicando o método de ordenadas discretas (ou método  $S_N$ ) que caracteriza-se pela discretização da variável angular em um número finito de direções  $\hat{\Omega}_m$ ,  $m = 1, \dots, M$ . Dessa forma apenas se contabilizam os nêutrons que se movem em algumas direções, não abrangendo todas as direções existentes. Considera-se a isotropia ou a anisotropia que ocorre no espalhamento de nêutrons, fazendo-se uma expansão da seção de choque diferencial de espalhamento em termos de polinômios de Legendre (aproximação  $P_L$ ), sendo que o truncamento da série depende do tipo de espalhamento (isotrópico ou anisotrópico) que se quer considerar. Aplicando tais considerações e tratamentos à equação de transporte de nêutrons, obtém-se a equação de transporte de nêutrons 2D na formulação de multigrupos e  $S_N$  com aproximação  $P_L$  para a seção de choque diferencial de espalhamento [3], dada como segue:

$$\begin{aligned}
& \mu_m \frac{\partial}{\partial x} \varphi_{g,m}(x, y) + \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \varphi_{g,m}(x, y) + \Sigma_{tg}(x, y) \varphi_{g,m}(x, y) \\
& = \frac{1}{k_{eff}} \left( \frac{1}{4\pi} \chi_g \sum_{n=1}^M \left\{ \omega_n \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{fg'}(x, y) \varphi_{g',n}(x, y) \right\} \right) \\
& + \sum_{n=1}^M \left\{ \omega_n \sum_{g'=1}^G \left( \sum_{l=0}^L F_l(\mu_n, \eta_n; \mu_m, \eta_m) \Sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}(x, y) \right) \varphi_{g',n}(x, y) \right\},
\end{aligned} \tag{2.2}$$

$g = 1 \dots, G$  (grupos de energia),

$m = 1, \dots, M$  (direções  $\widehat{\Omega}_m$ ),

$l = 0, \dots, L$  (número de termos da expansão  $P_L$ ),

onde:

$\mu_m$  e  $\eta_m$  são as componentes do vetor  $\widehat{\Omega}_m$  que define a direção de movimento do nêutron;

$\varphi_{g,m}(x, y)$  é o fluxo angular de nêutrons do grupo  $g$  que se movimenta na direção  $m$ ;

$\Sigma_{tg}(x, y)$  é a seção de choque macroscópica total do grupo  $g$ ;

$k_{eff}$  é o fator de multiplicação efetivo;

$\chi_g$  é o espectro de nêutrons do grupo  $g$ ;

$\omega_n$  é o peso de quadratura de simetria de nível;

$\nu$  é o número médio de nêutrons emitidos na fissão;

$\Sigma_{fg'}(x, y)$  é a seção de choque macroscópica de fissão do grupo de energia  $g'$ ;

$\sum_{l=0}^L F_l(\mu_n, \eta_n; \mu_m, \eta_m) \Sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}(x, y)$  é a seção de choque macroscópica de espalhamento expandida em termos de polinômio de Legendre (aproximação  $P_L$ ).

Sendo  $N$  o índice do método  $S_N$ , temos que o número de direções consideradas é definido por  $M = \frac{N(N+2)}{2}$ . Para a correta construção do sistema de EDPs descrito pela equação (2.2), temos ainda que  $L \leq N$ . Com relação à seção de choque macroscópica de espalhamento expandida em termos de polinômio Legendre, temos que:

$$\sum_{l=0}^L F_l(\mu_n, \eta_n ; \mu_m, \eta_m) \Sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}(x, y) = \sum_{l=0}^L \frac{2l+1}{4\pi} P_l(\mu_n, \eta_n ; \mu_m, \eta_m) \Sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}, \quad (2.3)$$

onde

$$P_l(\mu_n, \eta_n ; \mu_m, \eta_m) = \frac{4\pi}{2l+1} \sum_{m=-l}^l Y_{lm}^*(\mu_n, \eta_n) Y_{lm}(\mu_m, \eta_m) \quad (2.4)$$

com

$$Y_{lk}(\mu_k, \eta_k) = \left( \frac{(2l+1)(l-k)!}{4\pi(l+k)!} \right)^{\frac{1}{2}} P_l^k(\mu) e^{ik\phi}, \quad (2.5)$$

sendo

$$P_l^k(\mu) = \frac{(1-\mu^2)^{\frac{k}{2}}}{2^l l!} \frac{d^{k+l}(\mu^2-1)^l}{d\mu^{k+l}}, \quad (2.6)$$

$\mu \equiv \cos \theta$ , e  $k$  uma constante inteira positiva.

Para  $l = 0, 1, 2, 3$  as funções  $F_l$  são definidas por:

$$P_0(\mu_n, \eta_n ; \mu_m, \eta_m) = \frac{1}{4}; \quad (2.7)$$

$$P_1(\mu_n, \eta_n ; \mu_m, \eta_m) = \frac{3}{4}(\mu_n \mu_m + \eta_n \eta_m); \quad (2.8)$$

$$P_2 = (\mu_n, \eta_n ; \mu_m, \eta_m)$$

$$= \frac{5}{4} \left\{ \frac{1}{4} [(3\mu_n^2 - 1)(3\mu_m^2 - 1) + 3(\eta_n \eta_m)^2 + 12\mu_n \mu_m \eta_n \eta_m] \right\}; \quad (2.9)$$

$$\begin{aligned}
P_3(\mu_n, \eta_n; \mu_m, \eta_m) &= \frac{7}{4} \left\{ \frac{1}{16} \left[ 4\mu_n(5\mu_n^2 - 3)\mu_m(5\mu_m^2 - 3) + 3(\eta_n\eta_m)^2 \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + 6(5\mu_n^2 - 1)(5\mu_m^2 - 1)\eta_n\eta_m + 60\mu_n\mu_m\eta_n^2\eta_m^2 + 10\eta_n^3\eta_m^3 \right] \right\}. \quad (2.10)
\end{aligned}$$

Deve ser notado que na equação (2.2), os fluxos no lado esquerdo não são conhecidos. Eles juntamente com os fluxos do lado direito formam um grande sistema de equações diferenciais acopladas a ser resolvido.

A obtenção da equação (2.2) na forma apresentada pela equação (2.11) tem o objetivo de facilitar a arquitetura do esquema iterativo que desacopla o sistema.

$$\begin{aligned}
\mu_m \frac{\partial}{\partial x} \varphi_{g,m}(x, y) + \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \varphi_{g,m}(x, y) + \alpha_{g,m}(x, y) \varphi_{g,m}(x, y) \\
= S_{g,m}^{Fiss\tilde{a}o}(x, y) + \left\{ \sum_{\substack{n=1 \\ n \neq m}}^M \left[ \sum_{\substack{g=1 \\ g \neq g'}}^G \omega_n \beta_{g,m}^{g',n} \varphi_{g',n}(x, y) \right] \right\}, \quad \forall (x, y) \in \Omega,
\end{aligned} \quad (2.11)$$

$$g = 1 \dots, G (\text{grupos de energia}),$$

$$m = 1, \dots, M (\text{direções } \widehat{\Omega}_m),$$

$$l = 0, \dots, L (\text{número de termos da expansão } P_L),$$

onde por definição:

$$\alpha_{g,m}(x, y) = \Sigma_{tg}(x, y) - \omega_m \sum_{l=0}^L F_l(\mu_m, \eta_m; \mu_m, \eta_m) \Sigma_{sl}^{g \rightarrow g}(x, y), \quad (2.12)$$

$$\beta_{g,m}^{g',n}(x,y) = \sum_{l=0}^L F_l(\mu_n, \eta_n ; \mu_m, \eta_m) \Sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}(x,y), \quad (2.13)$$

$$S_{g,m}^{Fiss\tilde{a}o}(x,y) = \frac{1}{k_{eff}} \left( \frac{1}{4\pi} \chi_g \sum_{n=1}^M \left\{ \omega_n \sum_{g'=1}^G \nu_{\Sigma_{fg'}}(x,y) \varphi_{g',n}(x,y) \right\} \right). \quad (2.14)$$

Essa substituição de variáveis além de simplificar a notação da equação (2.2), permite o desacoplamento iterativo dos fluxos por meios da variável  $\alpha_{g,m}$ , que traz para o lado esquerdo da equação (2.2) os espalhamento energético que ocorre dentro do próprio grupo de energia  $g$  (in-group scattering) e o espalhamento angular para a mesma direção  $m$ .

### 3 O PROBLEMA DA ITERAÇÃO INTERNA E PRECISÃO

#### 3.1 Equações Oriundas da Aproximação Multigrupo e do Método $S_N$

A formulação oriunda do método de ordenadas discretas ( $S_N$ ) para problemas multigrupo é considerada como uma das mais usuais aproximações convenientes ao problema linear de transporte de nêutrons. Esse método constitui-se da descrição matemática do transporte de nêutrons em  $M$  direções prescritas (ordenadas discretas) e da utilização de quadraturas angulares para a aproximação das integrais do termo de fonte de espalhamento e produção de nêutrons. A formulação multigrupo fundamenta-se na definição de  $G$  intervalos contínuos de energia (grupos de energia) nos quais são estimados valores médios dos parâmetros físico-materiais e definidos os momentos energéticos do fluxo angular de nêutrons. Portanto, a formulação de ordenadas discretas para problemas multigrupo pode ser identificada como uma transformação do problema integro-diferencial linear do transporte de nêutrons, definido no espaço de fase original, em um sistema de  $G \times M$  equações diferenciais parciais lineares [24].

Uma das principais dificuldades de se resolver esse sistema, deve-se ao fato de que suas equações constituintes são desacopladas na parte convectiva e acopladas na parte reativa, conforme pode ser visto no problema de autovalor descrito pela equação (2.2), o que resulta em um sistema de grande porte acoplado. Determinar a solução de tal sistema por meio de métodos diretos é impraticável devido ao grande número de graus de liberdade. Mesmo quando se utiliza métodos iterativos, tem-se o problema da baixa taxa de convergência nas iterações internas devido ao termo de fonte de



espalhamento e também nas iterações externas devido ao termo de fonte de fissão, o que torna o esforço computacional consideravelmente custoso.

Para solucionar satisfatoriamente a equação de transporte de nêutrons, quando esta representa um problema de autovalor, é necessário determinar critérios de convergência adequados para as iterações internas antes de iniciar as iterações externas. Se o critério de convergência aplicado às iterações internas for mais “apertado” que o necessário, haverá um aumento substancial no tempo de processamento. Porém, Se o critério de convergência aplicado as iterações internas não for suficientemente “apertado”, o processo de convergência das iterações externas torna-se instável [3].

Em geral, o comportamento da taxa convergência das iterações interna varia de acordo com as definições físicas do problema em questão. Por exemplo, para meios puramente absorvedores a iteração interna pode convergir em poucas iterações. Em problemas em que a espessura ótica das sub-regiões que compõem o domínio espacial é considerada grossa e há também grande ocorrência de espalhamento dentro do próprio grupo de energia (in-group scattering), a convergência torna-se muita lenta. Essa baixa convergência é notória em problemas que consideram poucos grupos de energia na faixa térmica de 0 a 1 eV. Pois temos que os nêutrons que conseguem chegar à faixa térmica podem ainda sofrer diversos espalhamentos a menos que fortes absorvedores de nêutrons térmicos estejam presentes. Mesmo para os nêutrons na faixa de energia rápida, a convergência lenta pode ser um problema. Por exemplo, para o caso em que apenas núclídeos pesados estão presentes no meio, esses nêutrons precisam sofrer um grande número de espalhamentos, até perderem energia o suficiente a fim serem removidos do grupo de energia.

A baixa taxa de convergência na iteração interna tem motivado o desenvolvimento de métodos iterativos capazes de acelerar essa convergência, como pode ser visto em [25], [26]. Entretanto temos que a taxa de convergência não é o único ponto a ser avaliado quando se faz uso de métodos iterativos, ela deve ser analisada juntamente com a precisão, de modo que haja um compromisso entre a taxa de convergência e a precisão no método iterativo aplicado, com o intuito de garantir sua eficiência e até mesmo a viabilidade de sua aplicação. Por exemplo, se um esquema LS ou Galerkin for usado para cada iteração que desacopla o sistema de equações diferenciais parciais, as aproximações são da ordem de  $h^k$ , onde  $h$  é um parâmetro de malha e  $k$  é o grau do polinômio. Já para o esquema proposto nesta tese, conforme detalharemos na subseção 4.5.3, a aproximação é da ordem de  $h^{k+\frac{1}{2}}$ , ou seja, mais preciso.

Com isso, temos que o objetivo global dessa tese é propor uma estratégia para tratamento das iterações internas utilizadas na solução numérica da equação de transporte de nêutrons, que apresente boas taxas de convergência e precisão satisfatória.

## 4 UMA ESTRATEGIA BASEADA EM FORMALISMO PETROV- GALERKIN PARA AS ITERAÇÕES INTERNAS

### 4.1 Problema Modelo

Considere  $\Omega$  como sendo um conjunto aberto do  $\mathbb{R}^2$ . Seja  $m = 1, \dots, M$  ( $M \geq 1$  um inteiro) e  $\hat{\Omega}_m$  uma família de vetores do  $\mathbb{R}^2$  representando uma direção para os nêutrons. Assumindo  $G$  grupos de energia, uma fonte de fissão fixa (oriunda da iteração externa) e uma fonte de espalhamento dependente da solução, aplicamos os métodos  $P_N$  e  $S_N$  na equação de transporte de nêutrons [1, 3, 24, 27, 28, 29, 30,31, 32 e 33], conforme descrito na subseção 1.1. Nessas condições a equação de transporte de nêutrons em sua forma integro-diferencial pode ser reescrita como um caso particular de sistema de Friedrichs [2], como:

$$\mu_m \frac{\partial}{\partial x} \varphi_{g,m}(x, y) + \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \varphi_{g,m}(x, y) + \alpha_{gm}(x, y) \varphi_{g,m}(x, y) = S_{g,m}^{Fissão}(x, y) + \left\{ \sum_{\substack{n=1 \\ n \neq m}}^M \left[ \sum_{\substack{g=1 \\ g \neq g'}}^G \omega_n \beta_{g,m}^{g',n} \varphi_{g',n}(x, y) \right] \right\}, \quad \forall (x, y) \in \Omega. \quad (2.11)$$

$$g = 1 \dots, G \text{ (grupos de energia),}$$

$$m = 1, \dots, M \text{ (direções } \hat{\Omega}_m \text{),}$$

$$l = 0, \dots, L \text{ (número de termos da expansão } P_L \text{).}$$

Onde por definição:

$$\alpha_{g,m}(x,y) = \Sigma_{tg}(x,y) - \omega_m \sum_{l=0}^L F_l(\mu_m, \eta_m; \mu_m, \eta_m) \Sigma_{sl}^{g \rightarrow g}(x,y), \quad (2.12)$$

$$\beta_{g,m}^{g',n}(x,y) = \sum_{l=0}^L F_l(\mu_n, \eta_n; \mu_m, \eta_m) \Sigma_{sl}^{g' \rightarrow g}(x,y), \quad (2.13)$$

$$S_{g,m}^{Fiss\tilde{a}o}(x,y) = \frac{1}{k_{eff}} \left( \frac{1}{4\pi} \chi_g \sum_{n=1}^M \left\{ \omega_n \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{fg'}(x,y) \varphi_{g',n}(x,y) \right\} \right). \quad (2.14)$$

Seja  $\Gamma$  o contorno de  $\Omega$  e  $\hat{e}_\Gamma = (e_{1\Gamma}, e_{2\Gamma})$  o vetor unitário normal a  $\Gamma$  e exterior a  $\Omega$ . Para a solução desse sistema impomos duas possíveis condições de contorno:

- a) Condição de contorno de vácuo, que determina que não existem nêutrons entrando no sistema, ou seja,

$$\varphi_{g,m}(x,y) = 0 \text{ em } \Gamma_{\hat{\Omega}_m}^-, \quad (4.1)$$

$$\Gamma_{\hat{\Omega}_m}^- = \{(x,y); \hat{\Omega}_m \cdot \hat{e}_\Gamma \leq 0\}, \quad (4.2)$$

$$g \in \{1, \dots, G\},$$

$$m \in \{1, \dots, M\},$$

naturalmente temos que

$$\Gamma_{\hat{\Omega}_m}^+ = \Gamma - \Gamma_{\hat{\Omega}_m}^-. \quad (4.3)$$

- b) Condição de contorno reflexiva, que determina que a quantidade de nêutrons saindo do sistema é igual à quantidade nêutrons que adentra o sistema definida como segue:

$$\varphi_{g,m}(x,y) = \varphi_{g,m^*}(x,y) \text{ em } \Gamma_{\hat{\Omega}_m}^-, \quad (4.4)$$

$$g \in \{1, \dots, G\},$$

$$m \in \{1, \dots, M\},$$

onde  $m$  é índice do ângulo de reflexão correspondente ao ângulo de incidência cujo índice é  $m^*$ . Deve ser observado que se para um  $m \in \{1, \dots, M\}$  e um  $\Gamma^* \subset \Gamma_{\widehat{\Omega}_m}^-$  a condição aplicada é de vácuo, ela é de vácuo em  $\Gamma^*$  para todo  $g \in \{1, \dots, G\}$ . Também deve ser notado que se para um  $m \in \{1, \dots, M\}$  e um  $\Gamma^* \subset \Gamma_{\widehat{\Omega}_m}^-$  a condição aplicada é reflexiva, ela é reflexiva em  $\Gamma^*$  para todo  $g \in \{1, \dots, G\}$ .

## 4.2 Formalismo de Elementos finitos

Com o objetivo de obter a desejada formulação Petrov-Galerkin utilizada no desenvolvimento da estratégia para tratamento da iteração interna, faremos algumas redefinições de variáveis a fim de facilitar a construção da formulação proposta.

O ponto de partida é o seguinte sistema de equações

$$\widehat{\Omega}_m \cdot \nabla \varphi_{g,m} + \sum_{g'=1}^G \sum_{m'=1}^M \sigma_{g',m'}^{g,m} \varphi_{g',m'} = f_{g,m}. \quad (4.5)$$

$$g \in \{1, \dots, G\},$$

$$m \in \{1, \dots, M\}.$$

Desenvolvendo o somatório da equação (4.5), para  $g \in \{1, \dots, G\}$  e  $m \in \{1, \dots, M\}$ , segue que :

$$\hat{\Omega}_m \cdot \nabla \varphi_{g,m} + \sigma_{g,m}^{gm} \varphi_{g,m} = f_{g,m} - \sum_{g' \neq g} \sum_{m' \neq m} \sigma_{g',m'}^{g,m} \varphi_{g',m'}. \quad (4.6)$$

Comparando a equação (4.6) com a equação (2.11), verificamos as igualdades:

$$\sigma_{g,m}^{gm} = \alpha_{g,m}, \quad (4.7)$$

$$\sigma_{g',m'}^{g,m} = -\omega_n \beta_{g,m}^{g',n}, \quad (4.8)$$

$$f_{g,m} = S_{g,m}^{Fissão}. \quad (4.9)$$

Essa mudança de variáveis proporciona uma maior facilidade para os desenvolvimentos que seguem. Portanto, a partir daqui utilizaremos essas novas variáveis no desenvolvimento da formulação GpLS.

As usuais formulações GLS para sistemas de EDPs, se aplicadas ao sistema de equações obtido via método  $S_N$ , gera um esquema iterativo em elementos finitos que exige um grande esforço computacional, para gerar as contribuições a nível do elemento. Pesquisas profundas nos periódicos mais impactantes da área de neutrônica não fornecem nenhuma alternativa ao método GLS, para ser aplicado ao sistema oriundo do método  $S_N$ .

Uma das primeiras tentativas na direção de usar mínimos quadrados de elementos finitos juntamente com o método  $S_N$  é o esquema apresentado em [20] que é um esquema do tipo pLS (Least Square Incompleto) e que possui a mesma ordem de aproximação do método usual de Galerkin. Portanto, o objetivo fundamental desta tese, como já foi mencionado na introdução, é obter uma formulação do tipo GLS, mas não completa, daí o nome GpLS (Galerkin Partial Least Square) que tenha as mesmas propriedades de aproximação do GLS completo, mas com muito menos esforço

computacional. Esta é conforme mencionado na introdução, a contribuição original da tese.

A seguir apresentaremos o formalismo de elementos finitos contínuos para discretização espacial, bem como as definições dos espaços funcionais inerentes a esse formalismo.

Seja  $M^h = \{\Omega_1, \dots, \Omega_{n_e}\}$  uma partição de  $\Omega$  em  $n_e$  elementos finitos  $\Omega_e$ , cada elemento finito pode ser mapeado em elementos padrão por meio de mapeamento isoparamétrico satisfazendo  $\Omega_e \cap \Omega_{e'} = \emptyset$ , se  $e \neq e'$  e  $\Omega \cup \Gamma = \bigcup_{e=1}^{n_e} (\Omega_e \cup \Gamma_e)$ , onde  $\Gamma_e$  denota o contorno de cada  $\Omega_e$ .

Para  $k \geq 1$  sendo um inteiro considera-se  $P^k(\Omega)$  como sendo o espaço das funções polinomiais de grau menor ou igual a  $k$  definido nas usuais coordenadas locais [3, 22].

Seja

$$\mathcal{H}^k(\Omega) = \{\varphi \in H^1(\Omega); \varphi_e \in P^k(\Omega_e)\}, \quad (4.10)$$

onde  $H^1(\Omega)$  é o usual espaço de Sobolev como definido em [34] e  $\varphi_e$  é a restrição de  $\varphi$  a  $\Omega_e$ . A partir deste espaço definimos o seguinte espaço produto:

$$\mathcal{H}^{k,G,M} = \{(\varphi_{1,1}, \dots, \varphi_{G,1}, \dots, \varphi_{1,M}, \dots, \varphi_{G,M}); \varphi_{g,m} \in \mathcal{H}^k(\Omega); g = 1, \dots, G; m = 1, \dots, M\}. \quad (4.11)$$

### 4.3 Formulação Galerkin Partial Least Square (GpLS)

Seja  $\theta^\Gamma$  dado como segue:

$$\theta^\Gamma = \begin{cases} 0 & \text{se a condição de contorno de Dirichlet é forte} \\ 1 & \text{se a condição de contorno de Dirichlet é fraca.} \end{cases} \quad (4.12)$$

Seja o conjunto solução dado como segue

$$S^{k,G,M,\theta^\Gamma} = \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}^{k,G,M}, \text{ se } \theta^\Gamma = 1, \\ [\varphi_{g,m} \in \mathcal{H}^{k,G,M}; \varphi_{g,m} = 0 \text{ em } \Gamma_{\hat{\Omega}_m}^-, \text{ se condição a em } \Gamma_{\hat{\Omega}_m}^- \text{ é vácuo ou} \\ \varphi_{g,m} = \varphi_{g,m}^* \text{ em } \Gamma_{\hat{\Omega}_m}^-, \text{ se condição em } \Gamma_{\hat{\Omega}_m}^- \text{ é reflexiva}], \text{ se } \theta^\Gamma = 0 \end{array} \right\}, \quad (4.13)$$

e o espaço das variações admissíveis dados como segue

$$V^{k,G,M,\theta^\Gamma} = \left\{ \begin{array}{l} \mathcal{H}^{k,G,M}, \text{ se } \theta^\Gamma = 1, \\ [\varphi_{g,m} \in \mathcal{H}^{k,G,M}; \varphi_{g,m} = 0 \text{ em } \Gamma_{\hat{\Omega}_m}^-, \text{ se condição em } \Gamma_{\hat{\Omega}_m}^- \text{ é vácuo}], \text{ se } \theta^\Gamma = 0 \end{array} \right\}. \quad (4.14)$$

A formulação GpLS correspondente ao problema definido na seção 4.1, consiste de encontrar

$$\tilde{\varphi} = (\varphi_{1,1}, \dots, \varphi_{G,1}, \dots, \varphi_{1,M}, \dots, \varphi_{G,M}) \in S^{k,G,M,\theta^\Gamma}, \quad (4.15)$$

satisfazendo a equação variacional

$$A_{g,m}^G(\tilde{\varphi}, \tilde{\eta}) + A_{g,m}^{pLS}(\tilde{\varphi}, \tilde{\eta}) + \theta^\Gamma A_{g,m}^\Gamma(\tilde{\varphi}, \tilde{\eta}) = B_{g,m}^{pLS}(\tilde{\varphi}, \tilde{\eta}) + B_{g,m}^*(\tilde{\eta}) + \theta^\Gamma B_{g,m}^\Gamma(\tilde{\eta}),$$

$$\forall \tilde{\eta} \in V^{k,G,M,\theta^\Gamma}, \quad (4.16)$$

$$g = 1, \dots, G,$$



$$m = 1, \dots, M.$$

Onde as formas bi lineares e funcionais são dados como:

$$A_{g,m}^G(\tilde{\varphi}, \tilde{\eta}) = \sum_{e=1}^{ne} \int_{\Omega_e} \left\{ \widehat{\Omega}_m \cdot \nabla \varphi_{g,m} + \sigma_{g,m}^{gm} \varphi_{g,m} \right\} \eta_{g,m} d\Omega_e \quad (4.17)$$

$$A_{g,m}^{pLS}(\tilde{\varphi}, \tilde{\eta}) = \sum_{e=1}^{ne} \int_{\Omega_e} \left\{ \widehat{\Omega}_m \cdot \nabla \varphi_{g,m} + \sigma_{g,m}^{gm} \varphi_{g,m} \right\} \times \\ \left\{ \delta_m^e \left[ \widehat{\Omega}_m \cdot \nabla \eta_{g,m} + \sigma_{g,m} \eta_{g,m} \right] \right\} d\Omega_e \quad (4.18)$$

$$A_{g,m}^\Gamma(\tilde{\varphi}, \tilde{\eta}) = \sum_{e=1}^{ne} \int_{\Gamma_{\widehat{\Omega}_m}^-} \varphi_{g,m} \eta_{g,m} \left| \widehat{\Omega}_m \cdot \hat{e}_\Gamma \right| d\Gamma_e, \quad (4.19)$$

$$B_{g,m}^{pLS}(\tilde{\varphi}, \tilde{\eta}) = - \sum_{e=1}^{ne} \int_{\Omega_e} \left( \sum_{g' \neq g} \sum_{m' \neq m} \sigma_{g',m'}^{g',m'} \varphi_{g',m'} \right) \times \\ \left\{ \eta_{g,m} + \delta_m^e \left[ \widehat{\Omega}_m \cdot \nabla \eta_{g,m} + \sigma_{g,m} \eta_{g,m} \right] \right\} d\Omega_e \quad (4.20)$$

$$B_{g,m}^*(\tilde{\varphi}, \tilde{\eta}) = \sum_{e=1}^{ne} \int_{\Omega_e} f_{g,m} \times \left\{ \eta_{g,m} + \delta_m^e \left[ \widehat{\Omega}_m \cdot \nabla \eta_{g,m} + \sigma_{g,m} \eta_{g,m} \right] \right\} d\Omega_e \quad (4.21)$$

$$B_{g,m}^\Gamma(\tilde{\eta}) = \sum_{e=1}^{ne} \int_{\Gamma_{\widehat{\Omega}_m}^-} \rho_{g,m} \eta_{g,m} \left| \widehat{\Omega}_m \cdot \hat{e}_\Gamma \right| d\Gamma_e. \quad (4.22)$$

Temos que

$$\delta_m^e = \frac{1}{2} \frac{h_e}{|\widehat{\Omega}_m|}, \quad (4.23)$$

sendo que  $h_e$  é o diâmetro do elemento  $\Omega_e$ , dado como

$$h_e = \left( \int_{\Omega_e} d\Omega_e \right)^{\frac{1}{2}}, \quad (4.24)$$

$\Gamma_{\hat{\Omega}_m}^-$  e  $\hat{e}_\Gamma$  são como definidos na seção 4.1 e a função  $\rho_{g,m}$  é definida sobre  $\Gamma_{\hat{\Omega}_m}^-$  como segue:

$$\rho_{g,m} = \begin{cases} 0 & , \text{ se } \Gamma_{\hat{\Omega}_m}^- \text{ for uma região não reflexiva} \\ \varphi_{g,m^*} & , \text{ se } \Gamma_{\hat{\Omega}_m}^- \text{ for uma região reflexiva} \end{cases} . \quad (4.25)$$

Para  $h = \max\{h_1, \dots, h_{ne}\}$ , essa formulação permite, usando a metodologia encontrada em [22], uma estimativa de erro para o fluxo de ordem  $h^{k+\frac{1}{2}}$  e uma estimativa de erro da ordem de  $h^k$  para as derivadas advectivas, onde  $k$  é o grau do polinômio.

#### 4.4 Esquema Iterativo para Desacoplamento do Sistema

Para que seja possível introduzir o esquema iterativo que desacopla o sistema de equações diferenciais, considera-se  $\tilde{\varphi}^0 \in \mathcal{H}^{k,G,M}$ , sendo a partida de tal esquema, com  $\tilde{\varphi}^0$  sendo um valor arbitrário.

Também considera-se  $\tilde{\varphi}(ip)$  sendo o valor de  $\tilde{\varphi}$  no ponto nodal " $ip$ ". Desta forma, para  $n \in \{0,1,\dots\}$  determina-se  $\tilde{\varphi}^{n+1} \in \mathcal{H}^{k,G,M}$  por meio do Algoritmo 4.1.

Deve ser ressaltado que:

$$\tilde{\varphi}^\wedge(ip) = (\varphi_{1,1}^\wedge(ip), \dots, \varphi_{G,1}^\wedge(ip), \dots, \varphi_{1,M}^\wedge(ip), \dots, \varphi_{G,M}^\wedge(ip)),$$

onde  $\varphi_{g,m}^\wedge(ip)$  é o valor de  $\varphi_{g,m}$  no ponto nodal  $ip$ .

Seja “tolerancia” a tolerância fixada para parar o esquema iterativo.

**(1) Para  $n=0,1,2,3,\dots$ , enésima iteração**

**(2) Para  $g=1,\dots,G$**

**(3) Para  $m=1,\dots,M$**

**(4) Para  $ip=1,\dots$ , número total de pontos da malha**

Calcula-se  $\tilde{\varphi}^{n+1} \in S^{k,G,M,\theta^\Gamma}$ , através da equação variacional  
 $A_{g,m}^G(\tilde{\varphi}^{n+1}, \tilde{\eta}) + A_{g,m}^{PLS}(\tilde{\varphi}^{n+1}, \tilde{\eta}) + \theta^\Gamma A_{g,m}^\Gamma(\tilde{\varphi}^{n+1}, \tilde{\eta}) =$

$B_{g,m}^{LS}(\tilde{\varphi}^n, \tilde{\eta}) + B_{g,m}^*(\tilde{\eta}) + \theta^\Gamma B_{g,m}^\Gamma(\tilde{\eta}), \forall \tilde{\eta} \in V^{k,G,M,\theta^\Gamma}$

**Fim do loop (4)**

**Fim do loop (3)**

**Fim do loop (2)**

Erro=0

**(a) Para  $g=1,\dots,G$**

**(b) Para  $m=1,\dots,M$**

**(c) Para  $ip=1,\dots$ , número total de pontos da malha**

$$\text{Erro}_0 = 100 \times \frac{|\varphi_{g,m}^{\wedge,n+1}(ip) - \varphi_{g,m}^{\wedge,n}(ip)|}{|\varphi_{g,m}^{\wedge,n+1}(ip)|}$$

**Se (Erro<sub>0</sub> ≥ Erro) então**  
 Erro=Erro<sub>0</sub>  
**Fim do se**

**Fim do loop (c)**

**Fim do loop (b)**

**Fim do loop (a)**

**Se ( Erro ≤ Tolerancia) então**

Sai do loop (1)

**Fim do se**

**Fim do loop (1)**

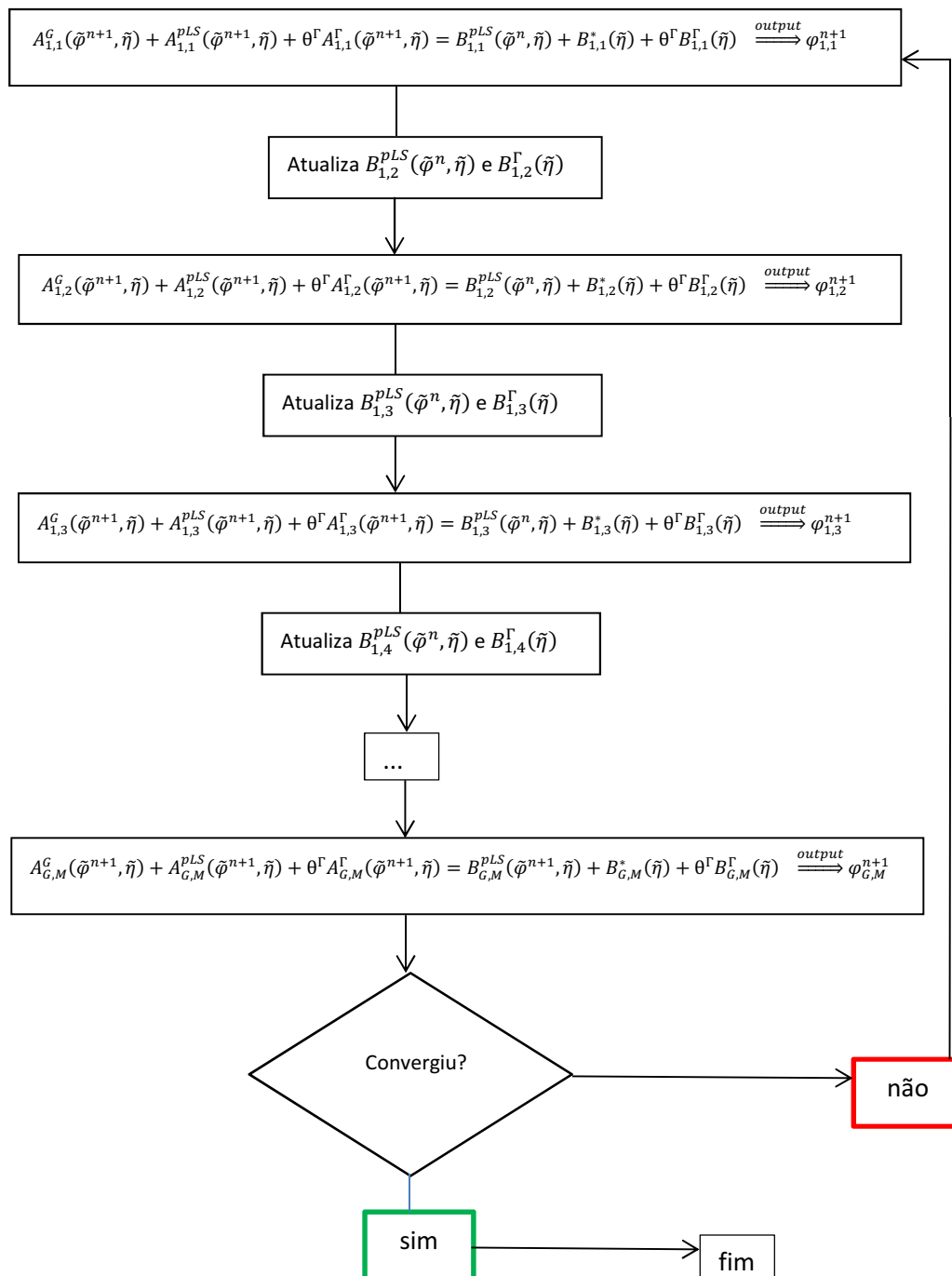
**Se (Erro > Tolerancia) então**

Envia mensagem: “não convergiu em (n+1) iterações”

**Fim do se**

**Algoritmo 4.1** – Algoritmo utilizado para se obter a solução do problema proposto.

Para a implementação desse algoritmo utilizamos uma técnica iterativa semelhante ao método iterativo Gauss-Seidel, a qual detalharemos a seguir.



**Figura 4.1** – fluxograma da técnica iterativa implementada.

Conforme pode ser visto no fluxograma da Figura 4.1, dentro do loop iterativo, para  $n \geq 0$  cada equação da iteração corrente (iteração N+1) recebe a solução da equação anterior atualizada, de forma que a primeira equação do sistema a ser resolvida

tem o termo de fonte alimentado pela solução atrasada (iteração N) de todas as demais equações, e a última equação a ser resolvida tem o seu termo de fonte alimentado pelas soluções já atualizadas (iteração N+1) das demais equações do sistema.

Para a condição de contorno de Dirichlet forte, a iteração dos fluxos que possuem como região de entrada a parte do contorno onde se aplica a condição de contorno de vácuo, ocorre exatamente como no método de Gauss-Seidel. Porém, há uma significativa diferença no processo iterativo dos fluxos cuja região de entrada é considerada como uma região reflexiva. Essa diferença consiste em abastecer em suas respectivas regiões de entrada, os fluxos que chegam até o domínio através da região reflexiva, com os valores dos correspondentes fluxos que penetram o domínio através da região onde se aplica a condição de vácuo. Esse abastecimento pode ser descrito pelo Algoritmo 4.2.

```

(1) Para n=0,1,2,3,..., enésima iteração
  (2) Para g=1,...,G
    (3) Para m=1,...,M
      (4) Para ip=1,..., número total de pontos da malha
        (...)
        Se  $\left( (ip \in \Gamma_{\Omega_m}^-) \right)$  então
           $\varphi_{g,m}^{n+1} = \rho_{g,m}^{n+1}$  no ponto nodal ip (  $\rho_{g,m}^{n+1}$  definido por 4.31)
        Fim do se
      Fim do loop (4)
    (...)
  Fim do loop (3)
Fim do loop (2)
Fim do loop (1)

```

**Algoritmo 4.2** – algoritmo de abastecimento dos fluxos  $\varphi_{g,m}^{n+1}$  em  $\Gamma_{\Omega_m}^-$ .

Esse abastecimento obedece à condição de corrente líquida nula na região reflexiva. Para sua correta implementação faz-se necessário uma escolha adequada da ordem de varredura da malha como na referência [3], iniciando se possível pela região  $\Gamma_{\Omega_m}^-$  onde se aplica a condição de vácuo.

Para a condição de contorno de Dirichlet fraca são validas as mesmas considerações. Porém a aplicação dessa condição de contorno traz consigo a necessidade de se utilizar um mecanismo de pós-processamento dos fluxos após o loop iterativo com o objetivo de que não haja, nos valores prescritos no contorno, perda de precisão para as soluções obtidas. Na próxima seção detalharemos a implementação do pós-processamento e algumas considerações sobre a condição de Dirichlet fraca.

#### **4.5 Pós-processamento para a Condição de Contorno de Dirichlet Fraca**

Uma das contribuições desta tese de doutorado para as pesquisas realizadas em neutrônica é a utilização da condição de Dirichlet fraca juntamente com o que chamamos aqui de pós-processamento. Por esse motivo reservamos duas subseções para tratarmos desse aspecto.

##### **4.5.1 Considerações Sobre a Condição de Contorno de Dirichlet Fraca**

Todos os modelos matemáticos de valor de contorno e/ou valor inicial baseados em sistemas de equações diferenciais necessitam de condições de contorno e/ou de valores iniciais corretamente definidas para que seja possível determinar a solução

satisfatória desses sistemas. Tais condições estão intrinsicamente relacionadas com as características físicas do problema a ser tratado e com a existência (ou não existência) da solução (únicas ou não) desse mesmo problema.

A condição de contorno de Dirichlet forte é amplamente utilizada nas áreas de pesquisas que modelam matematicamente seus problemas por meio de Equações Diferenciais (EDO ou EDPs) de primeira ordem. Aplicar essa condição a equações diferenciais (formulação forte), significa exigir que a solução obtida esteja em total concordância com os valores prescritos no contorno, sendo que esses valores não fazem parte da equação diferencial. A aplicação dessa condição a equações variacionais (formulação fraca) traz a mesmas implicações, ou seja, o conjunto solução contém implicitamente a condição de Dirichlet forte.

A condição de contorno de Dirichlet fraca por sua vez, é utilizada apenas em equações variacionais e sua aplicação significa não exigir que a solução obtida esteja em plena concordância com os valores prescritos no contorno. Mas isso só é possível por que nesse caso, os valores prescritos são incorporados aos funcionais correspondentes às condições de contorno da formulação variacional (ou fraca), conforme pode ser visto na equação (4.16). Dessa forma as soluções numéricas obtidas com essa condição são uma aproximação da solução exata tanto no interior do domínio como também no contorno.

Segundo as referências [22] e [23], se comparada com a condição de contorno de Dirichlet forte, a condição de contorno de Dirichlet fraca tem a peculiar vantagem de permitir uma melhor aproximação da solução exata no interior do domínio. No entanto essa vantagem não existe quando se trata da aproximação da solução exata no contorno do domínio.

Com o objetivo de obtermos uma solução numérica que tenha como características:

- Uma melhor aproximação da solução exata no interior do domínio obtida com a condição de contorno de Dirichlet fraca;
- A perfeita concordância com os valores prescritos no contorno do domínio apresentada pela condição de contorno de Dirichlet forte.

Implementamos um mecanismo de pós-processamento, o qual será descrito na próxima subseção.

#### **4.5.2 Pós-Processamento da Solução (Condição de Dirichlet Fraca)**

A finalidade do pós-processamento é corrigir os valores dos fluxos  $\varphi_{g,m}$  ( $g \in \{1, \dots, G\}, m \in \{1, \dots, M\}$ ) na parte do contorno definida por  $\Gamma_{\hat{\Omega}_m}^-$ , ou seja, é corrigir os valores de todos os fluxos em suas respectivas regiões de entrada no domínio. Devido as soluções obtidas com a condição de contorno de Dirichlet forte satisfazerem exatamente os valores prescritos no contorno, as soluções assim obtidas naturalmente não necessitam de pós-processamento. Portanto, dentro da estratégia iterativa que estamos propondo, a aplicação de pós-processamento é uma demanda exclusiva da condição de contorno de Dirichlet fraca.

Com o intuito de preservar a influência da condição de contorno de Dirichlet fraca sobre a convergência da solução, aplicamos o mecanismo de pós-processamento após a convergência dos fluxos. Tal mecanismo é semelhante ao processo de



abastecimento dos fluxos dentro do loop iterativo. Conforme pode ser visto no Algoritmo 4.3.

(a) Para  $g=1, \dots, G$

(b) Para  $m=1, \dots, M$

(c) Para  $ip=1, \dots, \text{número total de pontos da malha}$

Se  $\left( (ip \in \Gamma_{\bar{\Omega}_m}^-) \right)$  então

$\varphi_{g,m}^{n+1} = \rho_{g,m^*}^{n+1}$ , no ponto nodal  $ip$

Fim do se

Fim do loop (c)

Fim do loop (b)

Fim do loop (a)

**Algoritmo 4.3** – algoritmo de correção dos fluxos após o loop iterativo.

Outro aspecto muito importante é que a análise dos erros relativos entre as soluções obtidas com a condição de Dirichlet Fraca com e sem pós-processamento, nos permite avaliar se o nível de refinamento da malha considerada está adequado ao problema e a formulação de elementos finitos utilizada para resolvê-lo. Essa informação será melhor detalhada nos experimentos numéricos a serem apresentados no capítulo 5.

### 4.5.3 Estimativa de Erro

Aqui é apresentada uma estimativa de erro para o método GpLS desenvolvido nesta tese. O objetivo é estimar o erro da solução aproximada para cada iteração " $n$ ". Dessa forma, se tem uma sequência de soluções aproximadas, que é denotada por  $\tilde{\varphi}^{n+1}$  ( $n = 0, 1, \dots$ ) (sendo a solução  $\tilde{\varphi}^0 = (1, \dots, 1)$  a partida do esquema iterativo), e o objetivo é estimar seu erro em uma norma adequada, em relação à solução exata do problema correspondente exato.

Com este objetivo, aqui relembremos o esquema iterativo apresentado na seção

4.4:

Encontrar

$$\tilde{\varphi}^{n+1} = (\varphi_{1,1}^{n+1}, \dots, \varphi_{G,1}^{n+1}, \dots, \varphi_{1,M}^{n+1}, \dots, \varphi_{GM}^{n+1}) \in S^{k,G,M,\theta^\Gamma}, \quad (4.26)$$

satisfazendo a equação variacional

$$\begin{aligned} A_{g,m}^G(\tilde{\varphi}^{n+1}, \tilde{\eta}) + A_{g,m}^{pLS}(\tilde{\varphi}^{n+1}, \tilde{\eta}) + \theta^\Gamma A_{g,m}^\Gamma(\tilde{\varphi}^{n+1}, \tilde{\eta}) \\ = B_{g,m}^{LS}(\tilde{\varphi}^n, \tilde{\eta}) + B_{g,m}^*(\tilde{\eta}) + \theta^\Gamma B_{g,m}^\Gamma(\tilde{\eta}), \quad \forall \tilde{\eta} \in V^{k,G,M,\theta^\Gamma}, \end{aligned} \quad (4.27)$$

$$n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$\tilde{\varphi}^0 = (1, \dots, 1)$$

$$g = 1, \dots, G,$$

$$m = 1, \dots, M.$$

O problema exato correspondente consiste de encontrar

$$\tilde{\varphi}^{n+1, Exat} = (\varphi_{1,1}^{n+1, Exat}, \dots, \varphi_{G,1}^{n+1, Exat}, \dots, \varphi_{1,M}^{n+1, Exat}, \dots, \varphi_{GM}^{n+1, Exat}) \in S^{Exat, \theta^\Gamma},$$

satisfazendo,

$$\begin{aligned} A_{g,m}^G(\tilde{\varphi}^{n+1, Exat}, \tilde{\eta}) + A_{g,m}^{pLS}(\tilde{\varphi}^{n+1, Exat}, \tilde{\eta}) + \theta^\Gamma A_{g,m}^\Gamma(\tilde{\varphi}^{n+1, Exat}, \tilde{\eta}) \\ = B_{g,m}^{LS}(\tilde{\varphi}^n, \tilde{\eta}) + B_{g,m}^*(\tilde{\eta}) + \theta^\Gamma B_{g,m}^\Gamma(\tilde{\eta}), \quad \forall \tilde{\eta} \in V^{Exat, \theta^\Gamma}, \end{aligned} \quad (4.28)$$

$$n = 0, 1, 2, 3, \dots,$$

$$\tilde{\varphi}^0 = (1, \dots, 1),$$

$$g = 1, \dots, G,$$

$$m = 1, \dots, M,$$

o conjunto  $S^{Exat, \theta^\Gamma}$  e o espaço das variações admissíveis  $V^{Exat, \theta^\Gamma}$ , são dados como:

$$S^{Exat,1} = \{ \tilde{\varphi} = (\varphi_{1,1}, \dots, \varphi_{G,1}, \dots, \varphi_{1,M}, \dots, \varphi_{G,M}); \varphi_{g,m} \in L^2(\Omega) \text{ e } \widehat{\Omega}_m \cdot \nabla \varphi_{g,m} \in L^2(\Omega) \}, \quad (4.29)$$

$$V^{Exat,1} = S^{Exat,1}, \quad (4.30)$$

$$S^{Exat,0} = \left\{ \begin{array}{l} \tilde{\varphi} \in S^{Exat,1}; \varphi_{g,m} = 0 \text{ em } \Gamma_{\widehat{\Omega}_m}^-, \text{ se a condição em } \Gamma_{\widehat{\Omega}_m}^- \text{ é vácuo,} \\ \varphi_{g,m} = \varphi_{g,m}^* \text{ em } \Gamma_{\widehat{\Omega}_m}^-, \text{ se a condição em } \Gamma_{\widehat{\Omega}_m}^- \text{ é reflexiva,} \\ \text{sendo } \varphi_{g,m}^* \text{ o fluxo correspondente que incide em } \Gamma_{\widehat{\Omega}_m}^- \end{array} \right\}, \quad (4.31)$$

$$V^{Exat,0} = \{ \tilde{\varphi} \in V^{Exat,1}; \varphi_{g,m} = 0 \text{ em } \Gamma_{\widehat{\Omega}_m}^- \}. \quad (4.32)$$

As equações variacionais apresentadas aqui sugerem a seguinte norma:

$$\begin{aligned} \|\varphi_{g,m}\|_{GpLS} &= \left\{ \sum_{e=1}^{ne} \int_{\Omega_e} \frac{1}{2} \frac{h_e}{|\widehat{\Omega}_m|} (\widehat{\Omega}_m \cdot \nabla \varphi_{g,m} + \sigma_{g,m}^{gm} \varphi_{g,m})^2 d\Omega_e \right. \\ &\quad \left. + \int_{\Omega_e} \sigma_{g,m}^{gm} (\varphi_{g,m})^2 d\Omega_e + \int_{\Gamma_e} (\varphi_{g,m})^2 |\widehat{\Omega}_m \cdot \hat{e}_\Gamma| d\Gamma_e \right\}^{\frac{1}{2}}. \end{aligned} \quad (4.33)$$

Deve ser observado que:

$$\int_{\Gamma_e} \psi_{g,m} |\widehat{\Omega}_m \cdot \hat{e}_\Gamma| d\Gamma_e = \int_{\Gamma_{\widehat{\Omega}_m}^-} \psi_{g,m} |\widehat{\Omega}_m \cdot \hat{e}_\Gamma| d\Gamma_e + \int_{\Gamma_{\widehat{\Omega}_m}^+} \psi_{g,m} |\widehat{\Omega}_m \cdot \hat{e}_\Gamma| d\Gamma_e. \quad (4.34)$$

Onde  $\hat{e}_\Gamma$  é o vetor unitário normal orientado saindo de  $\Omega_e$ .

Agora assumimos que  $\varphi_{g,m}^{n+1,Exat} \in H^{k+1}(\Omega)$ , ( $k \geq 1$ ,  $m = 1, \dots, M$  e  $g = 1, \dots, G$ ), onde  $H^{k+1}(\Omega)$  é como dado em [34]. Seja então  $\varphi^{n+1,Exat,l,h}$  o interpolante usual de  $\varphi^{n+1,Exat}$ .

Das equações (4.27) e (4.28) obtemos:

$$\varphi_{g,m}^{n+1} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat} = 0, \text{ em } \Gamma_{\widehat{\Omega}_m}^-, \quad (4.35)$$

$$n = 0, 1, 2, 3, \dots$$

$$g = 1, \dots, G.$$

$$m = 1, \dots, M.$$

Claramente, usando o teorema do divergente, se obtém:

$$\int_{\Omega_e} (\widehat{\Omega}_m \cdot \nabla \varphi_{g,m}) \varphi_{g,m} d\Omega_e = \frac{1}{2} \left\{ - \int_{\Gamma_{\widehat{\Omega}_m}^-} (\varphi_{g,m})^2 (\widehat{\Omega}_m \cdot \hat{e}_\Gamma) d\Gamma_e + \int_{\Gamma_{\widehat{\Omega}_m}^+} (\varphi_{g,m})^2 (\widehat{\Omega}_m \cdot \hat{e}_\Gamma) d\Gamma_e - \int_{\Omega_e} \overbrace{(\nabla \cdot \widehat{\Omega}_m)}^0 (\varphi_{g,m})^2 d\Omega_e \right\}, \quad (4.36)$$

onde  $\nabla \cdot \widehat{\Omega}_m$  é o divergente de  $\widehat{\Omega}_m$  e é zero já que  $\widehat{\Omega}_m$  é um vetor constante.

Das equações (4.27), (4.28) e da bi linearidade das formas, subtraindo uma da outra, se obtém:

$$\begin{aligned}
& A_{g,m}^G(\tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat}, \tilde{\eta}) + A_{g,m}^{PLS}(\tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat}, \tilde{\eta}) \\
& + \theta^\Gamma A_{g,m}^\Gamma(\tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat}, \tilde{\eta}) = 0, \forall \tilde{\eta} \in V^{k,G,M,\theta^\Gamma}. \quad (4.37)
\end{aligned}$$

De (4.35) segue que  $(\varphi^{n+1} - \varphi^{n+1,Exat})$  é um elemento de  $V^{k,G,M,\theta^\Gamma}$ , para  $\theta^\Gamma = 1$

ou para  $\theta^\Gamma = 0$ , pois

$$\varphi^{n+1} - \varphi^{n+1,Exat,I,h} = 0 \text{ em } \Gamma_{\Omega_m}^- . \quad (4.38)$$

Usando novamente a bi linearidade das formas se obtém:

$$\begin{aligned}
& A_{g,m}^G(\tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}, \tilde{\eta}) + A_{g,m}^{PLS}(\tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}, \tilde{\eta}) \\
& + \theta^\Gamma A_{g,m}^\Gamma(\tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}, \tilde{\eta}) = \\
& - \{ A_{g,m}^G(\tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat}, \tilde{\eta}) + A_{g,m}^{PLS}(\tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat}, \tilde{\eta}) \\
& + \theta^\Gamma A_{g,m}^\Gamma(\tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat}, \tilde{\eta}) \}. \quad (4.39)
\end{aligned}$$

Agora, fazendo

$$\eta = \varphi^{n+1} - \varphi^{n+1,Exat,I,h}, \quad (4.40)$$

na equação (4.39), se obtém:

$$\begin{aligned}
& A_{g,m}^G(\tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}, \tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}) \\
& + A_{g,m}^{PLS}(\tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}, \tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}) \\
& + \theta^\Gamma A_{g,m}^\Gamma(\tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}, \tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}) \leq \\
& | A_{g,m}^G(\tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat}, \tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}) \\
& + A_{g,m}^{PLS}(\tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat}, \tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}) \\
& + \theta^\Gamma A_{g,m}^\Gamma(\tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat}, \tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}) | .
\end{aligned}$$

(4.41)

De (4.41) e (4.33), temos que existe uma constante real  $c_0 > 0$ , tal que:

$$\begin{aligned}
& \left( \left\| \varphi^{n+1} - \varphi^{n+1,Exat,I,h} \right\|_{GpLS} \right)^2 \leq \\
& c_0 \left[ A_{g,m}^G(\tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}, \tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}) \right. \\
& \quad + A_{g,m}^{pLS}(\tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}, \tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}) \\
& \quad \left. + \theta^\Gamma A_{g,m}^\Gamma(\tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}, \tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}) \right]. \quad (4.42)
\end{aligned}$$

Agora usando adequadamente a desigualdade

$$|xy| \leq \frac{\alpha|x|^2}{2} + \frac{|y|^2}{2\alpha}, \forall \alpha > 0, \quad (4.43a)$$

e a identidade

$$-x \leq -(x+y) + y, \quad (4.43b)$$

junto com a desigualdade triangular e o teorema do divergente no lado direito de (4.41)

pode se obter:

$$\begin{aligned}
& \left| A_{g,m}^G(\tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat}, \tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}) \right. \\
& \quad + A_{g,m}^{pLS}(\tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h} - \tilde{\varphi}^{n+1}, \tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}) \\
& \quad \left. + \theta^\Gamma A_{g,m}^\Gamma(\tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}, \tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}) \right| \leq
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&\leq \frac{1}{2} \left( \|\varphi^{n+1} - \varphi^{n+1,Exat,I,h}\|_{GpLS} \right)^2 \\
&+ \sum_{e=1}^{ne} \left\{ \int_{\Omega_e} \frac{1}{2} \frac{h_e}{|\widehat{\Omega}_m|} \left[ \widehat{\Omega}_m \cdot \nabla (\varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat}) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \sigma_{g,m}^{gm} (\varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat}) \right]^2 d\Omega_e \right. \\
&\quad \left. + \int_{\Omega_e} \frac{1}{2} \frac{h_e}{|\widehat{\Omega}_m|} (\varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat})^2 d\Omega_e \right\} \\
&\quad + 2 \int_{\Gamma} (\varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat})^2 |\widehat{\Omega}_m \cdot \hat{e}_{\Gamma}| d\Gamma \\
&\quad + 2 \int_{\Omega} \sigma_{g,m}^{gm} (\varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat})^2 d\Omega \quad . \quad (4.44a)
\end{aligned}$$

Onde em (4.44a),  $\theta^{\Gamma}$  foi majorado por 1.

De (4.42) e (4.44a) se obtém:

$$\begin{aligned}
&\left( \|\varphi^{n+1} - \varphi^{n+1,Exat,I,h}\|_{GpLS} \right)^2 \leq \\
&+ \frac{c_0}{(1 - c_0/2)} \sum_{e=1}^{ne} \left\{ \int_{\Omega_e} \frac{1}{2} \frac{h_e}{|\widehat{\Omega}_m|} \left[ \widehat{\Omega}_m \cdot \nabla (\varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat}) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \sigma_{g,m}^{gm} (\varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat}) \right]^2 d\Omega_e \right. \\
&\quad \left. + \int_{\Omega_e} 2 \frac{|\widehat{\Omega}_m|}{h_e} (\varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat})^2 d\Omega_e \right\} \\
&\quad + \frac{2c_0}{(1 - c_0/2)} \int_{\Omega} \sigma_{g,m}^{gm} (\varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat})^2 d\Omega \\
&\quad + \frac{2c_0}{(1 - c_0/2)} \int_{\Gamma} (\varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat})^2 |\widehat{\Omega}_m \cdot \hat{e}_{\Gamma}| d\Gamma \quad (4.44b)
\end{aligned}$$

Das propriedades de aproximação de  $\tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}$  como dadas em [3], [22] se obtém:

$$\frac{2c_0}{(1 - c_0/2)} \int_{\Omega} \sigma_{g,m}^{gm} (\varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat})^2 d\Omega \leq c_1 h^{2k+2}, \quad (4.44c)$$

$$\frac{2c_0}{(1 - c_0/2)} \int_{\Gamma} (\varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat})^2 |\hat{\Omega}_m \cdot \hat{e}_{\Gamma}| d\Gamma \leq c_2 h^{2k+1}, \quad (4.44d)$$

$$\begin{aligned} \frac{c_0}{(1 - c_0/2)} \sum_{e=1}^{ne} \left\{ \int_{\Omega_e} [\hat{\Omega}_m \cdot \nabla (\varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat}) \right. \\ \left. + \sigma_{g,m}^{gm} (\varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat})]^2 d\Omega_e \right. \\ \left. + \int_{\Omega_e} 2 \frac{|\hat{\Omega}_m|}{h_e} (\varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat})^2 d\Omega_e \right\} \leq c_3 h^{2k+1}, \end{aligned} \quad (4.44e)$$

onde

$$h = \text{Max}\{h_1, \dots, h_{ne}\}, \quad (4.44f)$$

e  $c_1, c_2$  e  $c_3$  são constantes reais positivas.

De (4.44b - f) se obtém:

$$\left( \|\varphi^{n+1} - \varphi^{n+1,Exat,I,h}\|_{GPLS} \right)^2 \leq c_* h^{2k+\theta}, \quad (4.44g)$$

$$c_* = 2\text{Max}\{c_1, c_2, c_3\}, \theta = \begin{cases} 1 & \text{se } h \leq 1 \\ 2 & \text{se } h > 1 \end{cases}. \quad (4.44h)$$

Da desigualdade triangular e (4.44g) se obtém:



$$\begin{aligned}
& \|\varphi^{n+1} - \varphi^{n+1,Exat}\|_{GpLS} \leq \\
& \|\varphi^{n+1} - \varphi^{n+1,Exat,I,h}\|_{GpLS} + \|\varphi^{n+1,Exat,I,h} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat}\|_{GpLS} \leq \\
& (c_*)^{\frac{1}{2}} h^{k+\frac{\theta}{2}} + (c_{**}) h^{k+\frac{\theta}{2}} = \left[ (c_*)^{\frac{1}{2}} + c_{**} \right] h^{k+\frac{\theta}{2}} \quad (4.44i)
\end{aligned}$$

Onde  $c_{**} > 0$  é uma constante real, em (4.44i) foi usada as propriedades de aproximação de  $\varphi^{n+1,Exat,I,h}$  como descrito em [2, 22]. Deve ser ressaltado que essa estimativa não é observada em [20]. Pode ser conjecturado que, se uma estimativa desse tipo for possível na formulação apresentada em [20] ela será da ordem de  $h^k$ , como no esquema de Galerkin, conforme pode ser visto na pagina 238 da referência [22], portanto menos preciso que o esquema desta tese.

#### 4.5.3.1 Determinação da Desigualdade (4.44a)

Usando (4.34), o teorema do divergente, (4.38), (4.3a),(4.43b) e a desigualdade triangular se obtém:

$$\begin{aligned}
& |A_{g,m}^G(\tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat}, \tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}) \\
& + A_{g,m}^{pLS}(\tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat}, \tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h}) \\
& + \theta^\Gamma A_{g,m}^\Gamma(\tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat}, \tilde{\varphi}^{n+1} - \tilde{\varphi}^{n+1,Exat,I,h})| =
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \left| - \sum_{e=1}^{ne} \int_{\Omega_e} \widehat{\Omega}_m \cdot \nabla ( \varphi^{n+1} - \varphi^{n+1,Exat,I,h} ) \times ( \varphi_{gm}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{gm}^{n+1,Exat} ) d\Omega_e + \right. \\
& \quad + \int_{\Gamma} ( \varphi_{g,m}^{n+1} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} ) \times ( \varphi_{gm}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{gm}^{n+1,Exat} ) | \widehat{\Omega}_m \cdot \hat{e}_{\Gamma} | d\Gamma \\
& \quad + \int_{\Omega_e} \sigma_{g,m}^{gm} \times ( \varphi_{g,m}^{n+1} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} ) ( \varphi_{gm}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{gm}^{n+1,Exat} ) d\Omega_e \\
& \quad + \sum_{e=1}^{ne} \int_{\Omega_e} \frac{1}{2} \frac{h_e}{|\widehat{\Omega}_m|} [ \widehat{\Omega}_m \cdot \nabla ( \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat} ) \\
& \quad \quad + \sigma_{g,m}^{gm} ( \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat} ) ] \\
& \quad \times [ \widehat{\Omega}_m \cdot \nabla ( \varphi_{g,m}^{n+1} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} ) + \sigma_{g,m}^{gm} ( \varphi_{g,m}^{n+1} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} ) ] d\Omega_e \\
& \quad + \theta^{\Gamma} \int_{\Gamma} ( \varphi_{g,m}^{n+1} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} ) \times ( \varphi_{gm}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{gm}^{n+1,Exat} ) | \widehat{\Omega}_m \cdot \hat{e}_{\Gamma} | d\Gamma \left| \leq \right. \\
& \quad \left| - \sum_{e=1}^{ne} \int_{\Omega_e} [ \widehat{\Omega}_m \cdot \nabla ( \varphi_{g,m}^{n+1} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} ) + \sigma_{g,m}^{gm} ( \varphi_{g,m}^{n+1} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} ) ] \right. \\
& \quad \quad \times ( \varphi_{gm}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{gm}^{n+1,Exat} ) d\Omega_e \\
& \quad + 2 \int_{\Omega} \sigma_{g,m}^{gm} \times ( \varphi_{g,m}^{n+1} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} ) ( \varphi_{gm}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{gm}^{n+1,Exat} ) d\Omega \\
& \quad + \sum_{e=1}^{ne} \left\{ \int_{\Omega_e} [ \widehat{\Omega}_m \cdot \nabla ( \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat} ) \right. \\
& \quad \quad \left. + \sigma_{g,m}^{gm} ( \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat} ) ]^2 d\Omega_e \right. \\
& \quad \quad + \frac{1}{4} \int_{\Omega_e} \frac{1}{2} \frac{h_e}{|\widehat{\Omega}_m|} [ \widehat{\Omega}_m \cdot \nabla ( \varphi_{g,m}^{n+1} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} ) \\
& \quad \quad \left. + \sigma_{g,m}^{gm} ( \varphi_{g,m}^{n+1} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} ) ]^2 d\Omega_e \left. \right\}
\end{aligned}$$

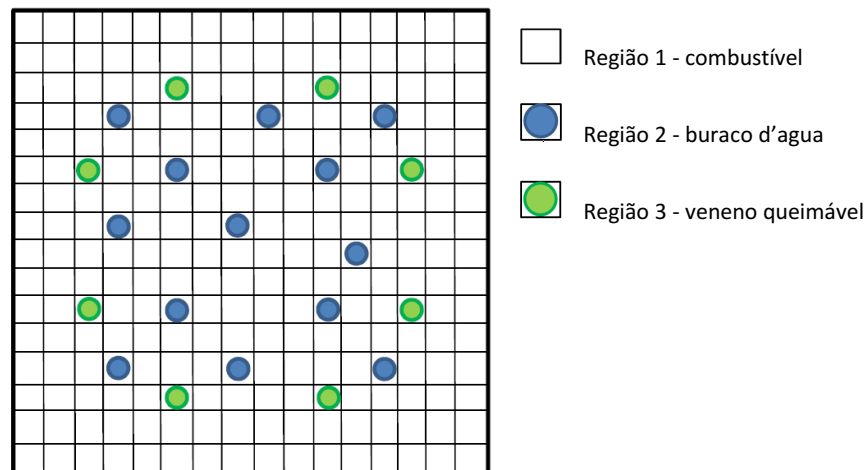
$$\begin{aligned}
& + \frac{(1 + \theta^\Gamma)}{4} \int_{\Gamma} | \varphi_{g,m}^{n+1} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} |^2 | \widehat{\Omega}_m \cdot \hat{e}_\Gamma | d\Gamma + \\
& + (1 + \theta^\Gamma) \int_{\Gamma} | \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat} |^2 | \widehat{\Omega}_m \cdot \hat{e}_\Gamma | d\Gamma \Big| \leq \\
& + \sum_{e=1}^{ne} \left\{ \frac{1}{4} \int_{\Omega_e} \frac{1}{2} \frac{h_e}{|\widehat{\Omega}_m|} [ \widehat{\Omega}_m \cdot \nabla ( \varphi_{g,m}^{n+1} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} ) \right. \\
& \quad \left. + \sigma_{g,m}^{gm} ( \varphi^{n+1} - \varphi^{n+1,Exat,I,h} ) \right]^2 d\Omega_e \\
& \quad + \int_{\Omega_e} 2 \frac{|\widehat{\Omega}_m|}{h_e} ( \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat} )^2 d\Omega_e \\
& \quad + 2 \int_{\Omega} \sigma_{g,m}^{gm} ( \varphi_{gm}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{gm}^{n+1,Exat} )^2 d\Omega \\
& \quad + \frac{1}{2} \int_{\Omega} \sigma_{g,m}^{gm} ( \varphi_{g,m}^{n+1} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} )^2 d\Omega \\
& + \sum_{e=1}^{ne} \left\{ \int_{\Omega_e} [ \widehat{\Omega}_m \cdot \nabla ( \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat} ) \right. \\
& \quad \left. + \sigma_{g,m}^{gm} ( \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat} ) \right]^2 d\Omega_e + \\
& \quad + \frac{1}{4} \int_{\Omega_e} \frac{1}{2} \frac{h_e}{|\widehat{\Omega}_m|} [ \widehat{\Omega}_m \cdot \nabla ( \varphi_{g,m}^{n+1} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} ) \\
& \quad \left. + \sigma_{g,m}^{gm} ( \varphi_{g,m}^{n+1} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} ) \right]^2 d\Omega_e \Big\} + \\
& + \frac{(1 + \theta^\Gamma)}{4} \int_{\Gamma} | \varphi_{g,m}^{n+1} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} |^2 | \widehat{\Omega}_m \cdot \hat{e}_\Gamma | d\Gamma \\
& (1 + \theta^\Gamma) \int_{\Gamma} | \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,I,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat} |^2 | \widehat{\Omega}_m \cdot \hat{e}_\Gamma | d\Gamma \leq
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \frac{1}{2} \left( \|\varphi_{g,m}^{n+1} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat,l,h}\|_{GpLS} \right)^2 \\
& + \sum_{e=1}^{ne} \left\{ \int_{\Omega_e} 2 \frac{|\widehat{\Omega}_m|}{h_e} (\varphi_{g,m}^{n+1,Exat,l,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat})^2 d\Omega_e \right. \\
& \quad + \int_{\Omega_e} [\widehat{\Omega}_m \cdot \nabla (\varphi_{g,m}^{n+1,Exat,l,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat}) \\
& \quad \left. + \sigma_{g,m}^{gm} (\varphi_{g,m}^{n+1,Exat,l,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat})^2] d\Omega_e \right\} \\
& + 2 \int_{\Omega} \sigma_{g,m}^{gm} (\varphi_{g,m}^{n+1,Exat,l,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat})^2 d\Omega \\
& + 2 \int_{\Gamma} (\varphi_{g,m}^{n+1,Exat,l,h} - \varphi_{g,m}^{n+1,Exat})^2 |\widehat{\Omega}_m \cdot \hat{e}_{\Gamma}| d\Gamma .
\end{aligned}$$

## 5 EXPERIMENTOS NUMÉRICOS

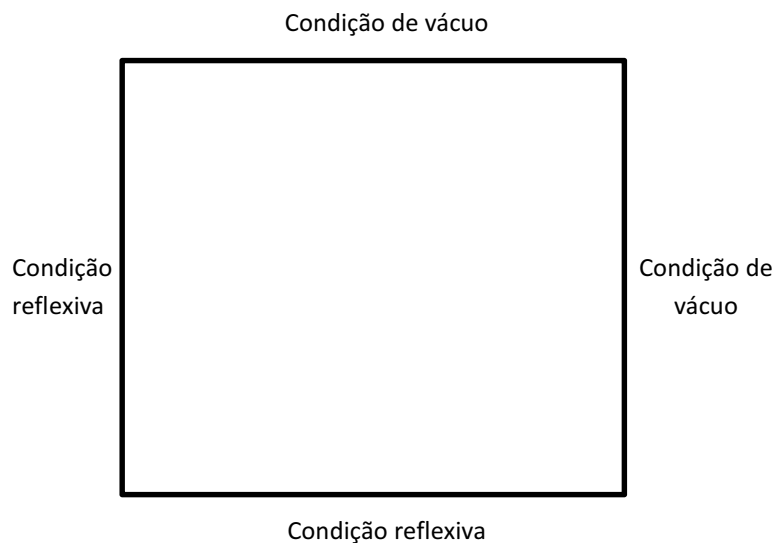
O presente capítulo contém o desenvolvimento das simulações computacionais que visam tanto a validação da metodologia proposta, como a demonstração das propriedades da formulação GpLS proposta.

Os experimentos numéricos aqui desenvolvidos consistem de resolver o problema de fonte fixa apresentado na seção 4.1 para o caso particular em que o domínio espacial bidimensional  $\Omega = \{(x, y) \in \mathbb{R}^2\}$  é representado por um único elemento combustível de um reator PWR (Pressurized Water Reactor) tipo Angra I, de dimensões 16x16 cm, com 256 varetas, composto por três regiões distintas. Conforme pode ser visto na Figura 5.1.



**Figura 5.1** Elemento Combustível 16x16 de um PWR tipo Angra I.

Os parâmetros nucleares utilizados para definir fisicamente as regiões 1, 2 e 3 mostradas na Figura 5.1, são apresentados nas tabelas contidas no Apêndice A. As condições de contorno tipo vácuo e tipo reflexiva são utilizadas nas faces do elemento combustível obedecendo à configuração mostrada na Figura 5.2, como segue:



**Figura 5.2** Configuração das condições de contorno tipo reflexiva e tipo vácuo.

Para o desenvolvimento das análises e comparações apresentadas nesta tese, consideramos em nossos experimentos numéricos as condições de contorno de Dirichlet fraca e forte, quatro grupos de energia, ordens de quadratura angular  $S_2$  e  $S_4$ , com espalhamento angular linearmente anisotrópico correspondente a ordem de espalhamento  $P_1$ . As formulações de elementos finitos consideradas são:

- a formulação LS da referência [20], que a partir daqui será denotada por método LS(2007);
- a formulação Galerkin clássico apresentada na referência [2], que a partir daqui será denotada por método G;
- e a formulação GpLS a qual estamos propondo, a qual a partir daqui será referenciada como método GpLS.

## **5.1 Experimentos Numéricos com Fonte Fixa Hipotética**

Conforme explicamos no início deste capítulo, as simulações realizadas nesta tese tratam de resolver a equação de transporte de nêutrons em um domínio espacial bidimensional que corresponde a um único elemento combustível. Os valores esperados da fonte de fissão, bem como dos fluxos escalares para problemas desse tipo são da ordem de  $10^2$ , no entanto em problemas em que o domínio espacial é representado como sendo todo o núcleo de um reator de potência, esses valores podem ser superiores a  $10^9$ , conforme pode ser visto na referência [35].

Os experimentos dessa seção têm como objetivo analisar a sensibilidade e a performance dos MEFs utilizados nessa tese, para uma fonte de fissão com valor elevado, típica de reatores de potência. Contudo, devido ao enorme tempo de CPU que seria necessário para se resolver a equação de transporte de nêutrons em todo o núcleo do reator, optamos por manter a configuração espacial do problema modelo, ou seja, o domínio espacial é um único elemento combustível, mas consideramos uma fonte fixa de fissão igual a  $10^9$ , que é considerado um valor “hipotético” diante das propriedades físicas do problema modelo a ser tratado.

### **5.1.1 Análise do Número de Iterações Internas com Condição de Dirichlet Forte**

Esta subseção é devotada à análise do número de iterações internas para cada uma das formulações de elementos finitos consideradas nesta tese, com condição de contorno de Dirichlet forte.

Apresentaremos a seguir os resultados obtidos para quatro grupos de energia, ordem de quadratura  $S_2$  e  $S_4$  com ordem de espalhamento igual a 1 (aproximação  $P_1$  para a seção de choque macroscópica de espalhamento). As tabelas de 5.1 a 5.3 apresentam o número de iterações internas para cada uma das formulações de elementos finitos acima citadas.

**Tabela 5.1** Número de iterações internas das formulações de elementos finitos para uma tolerância de 1% e condição de contorno de Dirichilet forte.

| <b>Grupos de Energia= 4   Ordem de espalhamento = <math>P_1</math>   (Tolerância = 1%)</b> |                               |                              |                           |                           |
|--|-------------------------------|------------------------------|---------------------------|---------------------------|
| $S_N$  | n° de partições da malha (Np) | Número de iterações internas |                           |                           |
|  |                               | Método LS(2007)              | Método G                  | Método GpLS               |
|  |                               | C. C. de Dirichilet Forte    | C. C. de Dirichilet Forte | C. C. de Dirichilet Forte |
| $S_2$  | 16x16                         | 27                           | 27                        | 27                        |
|  | 32x32                         | 27                           | 27                        | 27                        |
|  | 48x48                         | 27                           | 27                        | 27                        |
|  | 64x64                         | 27                           | 27                        | 27                        |
| $S_4$  | 16x16                         | 33                           | 33                        | 33                        |
|  | 32x32                         | 33                           | 33                        | 33                        |
|  | 48x48                         | 33                           | 33                        | 33                        |
|  | 64x64                         | 33                           | 33                        | 33                        |

**Tabela 5.2** Número de iterações internas das formulações de elementos finitos para uma tolerância de 0,5% e condição de contorno de Dirichilet forte.

| <b>Grupos de Energia= 4   Ordem de espalhamento = <math>P_1</math>   (Tolerância = 0,5%)</b> |                               |                              |                           |                           |
|--|-------------------------------|------------------------------|---------------------------|---------------------------|
| $S_N$  | n° de partições da malha (Np) | Número de iterações internas |                           |                           |
|  |                               | Método LS(2007)              | Método G                  | Método GpLS               |
|  |                               | C. C. de Dirichilet Forte    | C. C. de Dirichilet Forte | C. C. de Dirichilet Forte |
| $S_2$  | 16x16                         | 31                           | 31                        | 31                        |
|  | 32x32                         | 31                           | 31                        | 31                        |
|  | 48x48                         | 31                           | 31                        | 31                        |
|  | 64x64                         | 31                           | 31                        | 31                        |
| $S_4$  | 16x16                         | 38                           | 38                        | 38                        |
|  | 32x32                         | 38                           | 38                        | 38                        |
|  | 48x48                         | 38                           | 38                        | 38                        |
|  | 64x64                         | 38                           | 38                        | 38                        |



**Tabela 5.3** Número de iterações internas das formulações de elementos finitos para uma tolerância de 0,1% e condição de contorno de Dirichlet forte .

| <b>Grupos de Energia= 4   Ordem de espalhamento = <math>P_1</math>   (Tolerância = 0,1%)</b> |                               |                              |                          |                          |
|--|-------------------------------|------------------------------|--------------------------|--------------------------|
| $S_N$  | n° de partições da malha (Np) | Número de iterações internas |                          |                          |
|  |                               | Método LS(2007)              | Método G                 | Método GpLS              |
|  |                               | C. C. de Dirichlet Forte     | C. C. de Dirichlet Forte | C. C. de Dirichlet Forte |
| $S_2$  | 16x16                         | 40                           | 40                       | 40                       |
|  | 32x32                         | 40                           | 40                       | 40                       |
|  | 48x48                         | 40                           | 40                       | 40                       |
|  | 64x64                         | 40                           | 40                       | 40                       |
| $S_4$  | 16x16                         | 49                           | 49                       | 49                       |
|  | 32x32                         | 49                           | 49                       | 49                       |
|  | 48x48                         | 49                           | 49                       | 49                       |
|  | 64x64                         | 49                           | 49                       | 49                       |

Podemos constatar pelos resultados apresentados nas tabelas numeradas de 5.1 a 5.3, que para uma fonte de fissão com valor elevado ( $10^9$ ) e para a condição de Dirichlet forte, quando se observa as tolerâncias de 1%, 0,5% e 0,1% os três métodos apresentam o mesmo número de iterações internas para as quatro malhas consideradas. Verificamos com isso que o método GpLS proposto nesta tese possui uma performance iterativa que se equipara aos métodos G e LS(2007), sendo que os três métodos possuem uma performance iterativa que não é sensível ao refinamento da malha.

### 5.1.2 Análise do Número de Iterações Internas com Condição de Dirichlet Fraca

Esta subseção é devotada à análise do número de iterações internas para cada uma das formulações de elementos finitos consideradas nesta tese, com condição de contorno de Dirichlet fraca. As formulações em questão são as mesmas citadas na subseção 5.1.1. Contudo vale ressaltar aqui, que a formulação LS apresentada na referência [20] não leva em consideração a condição de Dirichlet fraca. Portanto a

aplicação da condição de Dirichlet fraca a uma formulação do tipo LS é mais uma contribuição desta tese de doutorado às pesquisas realizadas em neutrônica.

As tabelas de 5.4 a 5.6 apresentam o número de iterações internas para cada uma das formulações de elementos finitos consideradas nesta tese, com condição de contorno de Dirichlet fraca.

Apresentaremos a seguir os resultados obtidos para quatro grupos de energia, ordem de quadratura  $S_2$  e  $S_4$  com ordem de espalhamento igual a 1 (aproximação  $P_1$  para a seção de choque macroscópica de espalhamento).

**Tabela 5.4** Número de iterações internas das formulações de elementos finitos para uma tolerância de 1% e condição de contorno de Dirichlet fraca.

| <b>Grupos de Energia= 4   Ordem de espalhamento = <math>P_1</math>   (Tolerância = 1%)</b> |                               |                              |                          |                          |
|--|-------------------------------|------------------------------|--------------------------|--------------------------|
| $S_N$  | n° de partições da malha (Np) | Número de iterações internas |                          |                          |
|  |                               | Método LS(2007)              | Método G                 | Método GpLS              |
|  |                               | C. C. de Dirichlet Fraca     | C. C. de Dirichlet Fraca | C. C. de Dirichlet Fraca |
| $S_2$  | 16x16                         | 35                           | 43                       | 30                       |
|  | 32x32                         | 33                           | 49                       | 45                       |
|  | 48x48                         | 28                           | 49                       | 35                       |
|  | 64x64                         | 42                           | 56                       | 43                       |
| $S_4$  | 16x16                         | 35                           | 44                       | 32                       |
|  | 32x32                         | 72                           | 57                       | 35                       |
|  | 48x48                         | 43                           | 58                       | 36                       |
|  | 64x64                         | 44                           | 56                       | 37                       |

**Tabela 5.5** Número de iterações internas das formulações de elementos finitos para uma tolerância de 0,5% e condição de contorno de Dirichilet fraca.

| <b>Grupos de Energia= 4   Ordem de espalhamento = <math>P_1</math>   (Tolerância = 0,5%)</b> |                               |                              |                           |                           |
|--|-------------------------------|------------------------------|---------------------------|---------------------------|
| $S_N$  | nº de partições da malha (Np) | Número de iterações internas |                           |                           |
|  |                               | Método LS(2007)              | Método G                  | Método GpLS               |
|  |                               | C. C. de Dirichilet Fraca    | C. C. de Dirichilet Fraca | C. C. de Dirichilet Fraca |
| $S_2$  | 16x16                         | 38                           | 46                        | 32                        |
|  | 32x32                         | 36                           | 53                        | 49                        |
|  | 48x48                         | 31                           | 53                        | 39                        |
|  | 64x64                         | 45                           | 59                        | 46                        |
| $S_4$  | 16x16                         | 40                           | 49                        | 37                        |
|  | 32x32                         | 76                           | 62                        | 39                        |
|  | 48x48                         | 47                           | 63                        | 40                        |
|  | 64x64                         | 48                           | 60                        | 42                        |

**Tabela 5.6** Número de iterações internas das formulações de elementos finitos para uma tolerância de 0.1% e condição de contorno de Dirichilet fraca.

| <b>Grupos de Energia= 4   Ordem de espalhamento = <math>P_1</math>   (Tolerância = 0,1%)</b> |                               |                              |                           |                           |
|--|-------------------------------|------------------------------|---------------------------|---------------------------|
| $S_N$  | nº de partições da malha (Np) | Número de iterações internas |                           |                           |
|  |                               | Método LS(2007)              | Método G                  | Método GpLS               |
|  |                               | C. C. de Dirichilet Fraca    | C. C. de Dirichilet Fraca | C. C. de Dirichilet Fraca |
| $S_2$  | 16x16                         | 47                           | 55                        | 39                        |
|  | 32x32                         | 45                           | 61                        | 57                        |
|  | 48x48                         | 40                           | 61                        | 47                        |
|  | 64x64                         | 54                           | 68                        | 55                        |
| $S_4$  | 16x16                         | 50                           | 59                        | 48                        |
|  | 32x32                         | 86                           | 72                        | 49                        |
|  | 48x48                         | 57                           | 73                        | 50                        |
|  | 64x64                         | 58                           | 70                        | 52                        |

Podemos constatar nos resultados apresentados nas tabelas numeradas de 5.4 a 5.6, que para uma fonte de fissão com valor elevado ( $10^9$ ) e para a condição de Dirichilet fraca, quando se observa as tolerâncias de 1%, 0,5% e 0,1% os três métodos apresentam números de iterações internas distintos para as quatro malhas consideradas. Logo para a condição de Dirichilet fraca os três métodos possuem uma performance iterativa que é sensível ao refinamento da malha. Essa sensibilidade verificada para a condição de contorno de Dirichilet fraca, ocorre em virtude da oscilação da solução no contorno do domínio espacial (dentro do loop iterativo), juntamente com a forte

descontinuidade apresentada pela fonte hipotética ao longo das sub-regiões que compõem o domínio espacial.

Temos que para toda a região de combustível a fonte fixa hipotética é igual  $10^9$ . Sendo que para as regiões de buraco d'água e veneno queimável, tendo em vista que não ocorre fissão nessas regiões, a fonte fixa hipotética é nula. Isso faz com que o termo de fonte de cada equação que constitui o sistema de EDPs em questão, apresente um enorme “salto” de uma região para outra. Dessa forma quando refinamos a malha, de um lado estamos aumentando o número de regiões onde ocorrem saltos nos termos de fontes das equações constituintes do sistema de EDPs, e do outro lado, estamos melhorando a solução obtida. Assim, dependendo de qual desses lados é o mais beneficiado, o refinamento da malha pode ocasionar tanto o aumento quanto a diminuição do número de iterações internas. Isso pode ser facilmente verificado nos resultados apresentados na Tabela 5.6.

Para o caso  $S_2$  e malha  $16 \times 16$ , o método GpLS apresenta o menor número de iterações internas. Para as malhas  $32 \times 32$  e  $48 \times 48$  o método que possui o menor número de iterações internas é o método LS(2007). No entanto quando analisamos a malha  $64 \times 64$  notamos a equivalência entre as performances iterativas dos métodos GpLS e LS(2007) para o caso  $S_2$ . Para  $S_4$  os resultados são análogos, entretanto para esse caso o método GpLS apresenta a melhor performance iterativa. Para os casos analisados nesta subseção, temos que em geral o método G apresenta o maior número de iterações internas.

Verificamos com isso que para a condição de Dirichlet fraca o método GpLS apresenta uma performance iterativa satisfatória para o problema em questão. Contudo, conjecturamos ainda que para níveis de refinamento relativamente altos, a performance

iterativa do método GpLS pode superar a performance iterativa do método LS(2007) mesmo para a condição de Dirichilet forte.

### 5.1.3 Análise de Convergência com Condição de Dirichilet Forte

O foco dessa subseção é fazer um estudo da convergência de cada uma das formulações de elementos finitos consideradas nesta tese, fazendo uso da condição de contorno de Dirichilet forte. Para isso, analisamos o comportamento da taxa de convergência dos métodos em questão diante da variação do nível de discretização (refinamento) do domínio espacial (malha). Nesse caso consideramos os pontos da malha com menor número de partições (malha 16x16) como sendo os pontos em que as soluções (fluxos angulares de nêutrons) são avaliadas, e tomamos as soluções obtidas com a malha de maior número de partições (malha 64x64) como sendo a solução referência para o cálculo dos erros relativos. Em geral o erro pode ser dado como segue:

$$ERRO\%(Np) \leq C_0 h^\alpha, \quad (5.1)$$

onde  $C_0$  é uma constante positiva.  $h \approx \frac{1}{Np}$ , com  $Np = (\text{numero total de elementos})^{\frac{1}{2}}$ , (caso bidimensional), é o número de partições uniforme correspondente. Temos que  $\alpha > 0$ , sendo " $\alpha$ " o indicador da taxa de convergência. Quanto maior for " $\alpha$ " melhor é a taxa de convergência do método aplicado. A equação (5.1) pode ser melhor apresentada como:

$$\frac{ERRO\%(Np)}{ERRO_{ref}} \leq \frac{C_0}{ERRO_{ref}} \times h^\alpha, \quad (5.2)$$

onde  $ERRO_{ref} > 0$  é o valor de referência.

Considerando agora as partições  $Np_0 < Np_1 < Np_2 < Np_3$ , a solução para a partição  $Np_3$  será considerada a de referência ou mais precisa. Dessa forma na equação (5.2) se aplica o logaritmo neperiano nos dois lados da desigualdade para obter:

$$\left| \text{Ln} \left( \frac{ERRO\%(Np)}{ERRO_{ref}} \right) \right| \leq C_0^* + \alpha |\text{Ln}(h)|. \quad (5.3)$$

O estudo das taxas de convergência pode ser feito analisando o gráfico de:

$$\left| \text{Ln} \left( \frac{ERRO\%(Np)}{ERRO_{ref}} \right) \right| \leq \alpha |\text{Ln}(h)| = \alpha \left| \text{Ln} \left( \frac{1}{Np} \right) \right|. \quad (5.4)$$

Apresentaremos a seguir os erros relativos obtidos para quatro grupos de energia, ordem de quadratura 2( $S_2$ ) e ordem de espalhamento igual a 1 (aproximação  $P_1$  para a seção de choque macroscópica de espalhamento). A norma utilizada para calculo dos erros relativos é a norma máxima discreta.

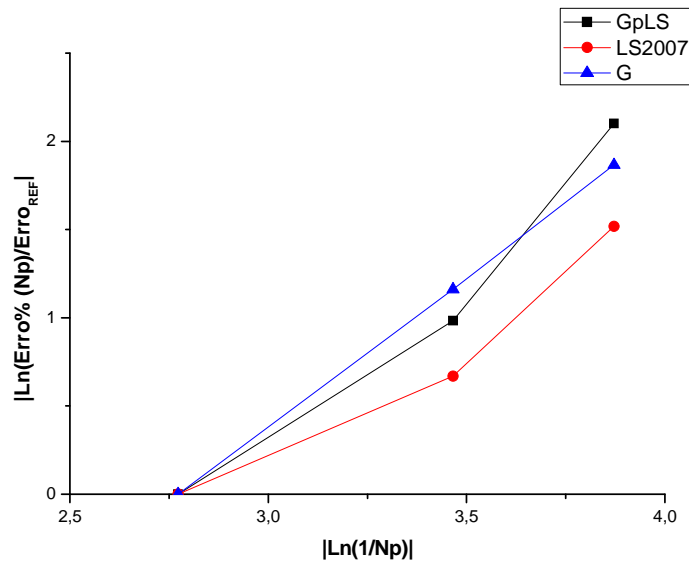
**Tabela 5.7** Erros relativos obtidos usando como referência a solução da malha 64x64 obtida com os respectivos métodos para uma tolerância de 0,1% e condição de contorno de Dirichilet forte.

| <b>Grupos de Energia= 4   Ordem de quadratura = <math>S_2</math>   Ordem de espalhamento = <math>P_1</math>  </b><br><b>(Tolerância = 0, 1%)</b> |                                       |                                |                                   |
|--|---------------------------------------|--------------------------------|-----------------------------------|
| <b>Erro%= <math>100 \times \left( \max \left  \frac{\varphi_X^{Np-3} - \varphi_X^{Np}}{\varphi_X^{Np-3}} \right  \right)</math></b>              |                                       |                                |                                   |
| <b>Nº de partições da malha (Np)</b>   | <b>Erro relativo% método LS(2007)</b> | <b>Erro relativo% método G</b> | <b>Erro relativo% método GpLS</b> |
| 16x16  | 9,26684                               | 28,58681                       | 17,00618                          |
| 32x32  | 4,75206                               | 8,94913                        | 6,36247                           |
| 48x48  | 2,03146                               | 4,42055                        | 2,08127                           |

**Tabela 5.8** Modulo dos logaritmos Neperianos dos erros relativos dos métodos GpLS, LS(2007) e G obtidos usando como referência o erro entre as malha de 16x16 e 64x64 partições obtido com os respectivos métodos para 4 grupos de energia,  $S_2$ ,  $P_1$  e uma tolerância de 0,1% com condição de contorno de Dirichilet forte.

| $ERRO^X(16x64)$ = erro relativo do método X entre as malhas de 16x16 e 64x64 partições<br>$ERRO^X(32x64)$ = erro relativo do método X entre as malhas de 32x32 e 64x64 partições<br>$ERRO^X(48x64)$ = erro relativo do método X entre as malhas de 48x48 e 64x64 partições |   |                 |          |             |
|--|---|-----------------|----------|-------------|
|  | $\left  \ln \left( \frac{ERRO\%(Np)}{ERRO_{ref}} \right) \right $       | método LS(2007) | método G | método GpLS |
|  | $\left  \ln \left( \frac{ERRO^X(16x64)}{ERRO^X(16x64)} \right) \right $ | 0               | 0        | 0           |
|  | $\left  \ln \left( \frac{ERRO^X(32x64)}{ERRO^X(16x64)} \right) \right $ | 0,66786         | 1,16139  | 0,98316     |
|  | $\left  \ln \left( \frac{ERRO^X(48x64)}{ERRO^X(16x64)} \right) \right $ | 1,51769         | 1,86668  | 2,10060     |

A Figura 5.3 nos fornece a variação das taxas de convergência dos métodos em questão com a correspondente variação do nível de discretização da malha.



**Figura 5.3** Comportamento da taxa de convergência dos métodos GpLS, LS2007 e G com a variação do nível de discretização da malha, usando como referência a solução da malha 16x16 obtida com os respectivos métodos para 4 grupos de energia,  $S_2$ ,  $P_1$  e uma tolerância de 0,1% com condição de contorno de Dirichilet forte.

A taxa de convergência de cada um dos métodos analisados corresponde à expressão

$$\alpha = \frac{\left| \text{Ln} \left( \frac{\text{ERRO}\%(Np)}{\text{ERRO}_{ref}} \right) \right|}{\left| \text{Ln} \left( \frac{1}{Np} \right) \right|}, \quad (5.5)$$

que nada mais é do que o coeficiente angular das retas contidas na Figura 5.3.

Ao observarmos a Figura 5.3. podemos constatar que para a região correspondente à malha menos refinada, onde  $\left| \text{Ln} \left( \frac{1}{16} \right) \right| \leq \left| \text{Ln} \left( \frac{1}{Np} \right) \right| \leq \left| \text{Ln} \left( \frac{1}{32} \right) \right|$ , o gráfico de G apresenta o maior coeficiente angular, no entanto a partir do primeiro refinamento sofrido pela malha verificamos, que o método que apresenta maior variação em seu coeficiente angular (taxa de convergência) é o método GpLS. A partir desse momento o coeficiente angular do gráfico do método LS(2007) é claramente maior que o coeficiente angular do método G. Nota-se claramente que para a condição de Dirichlet forte o método que apresenta a melhor taxa de convergência é o método GpLS proposto nessa tese de doutorado.

Tais resultados corroboram com as conjecturas feitas na seção 4.5.3, quando destacamos que o método GpLS possui propriedades de aproximação melhores que as apresentadas pelos métodos G e LS(2007), já que sua estimativa de erro é da ordem de  $h^{k+\frac{1}{2}}$  e G e LS(2007) possuem estimativas de erro da ordem de  $h^k$ .

Agora serão apresentados os resultados obtidos para quatro grupos de energia, ordem de quadratura 4 ( $S_4$ ) e ordem de espalhamento igual a 1 (aproximação  $P_1$  para a seção de choque macroscópica de espalhamento).



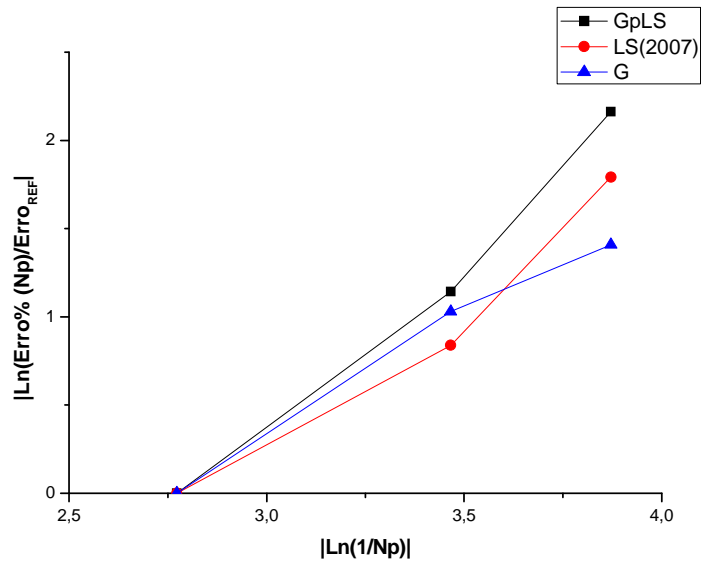
**Tabela 5.9** Erros relativos obtidos usando como referência a solução da malha 64x64 obtida com os respectivos métodos para uma tolerância de 0,1% e condição de contorno de Dirichilet forte.

| Grupos de Energia= 4   Ordem de quadratura = $S_4$   Ordem de espalhamento = $P_1$  <br>(Tolerância = 0,1%)       |                                |                         |                            |
|---|--------------------------------|-------------------------|----------------------------|
| $\text{Erro\%} = 100 \times \left( \max \left  \frac{\phi_x^{Np-3} - \phi_x^{Np}}{\phi_x^{Np-3}} \right  \right)$ |                                |                         |                            |
| Nº de partições da malha (Np)   | Erro relativo% método LS(2007) | Erro relativo% método G | Erro relativo% método GpLS |
| 16x16   | 11,13871                       | 20,83472                | 13,85490                   |
| 32x32   | 4,81321                        | 7,44193                 | 4,41963                    |
| 48x48   | 1,85505                        | 5,09593                 | 1,59213                    |

**Tabela 5.10** Modulo dos logaritmos Neperianos dos erros relativos dos métodos GpLS, LS(2007) e G obtidos usando como referência o erro entre as malha de 16x16 e 64x64 partições obtido com os respectivos métodos para 4 grupos de energia,  $S_4$ ,  $P_1$  e uma tolerância de 0,1% com condição de contorno de Dirichilet forte.

| ERRO <sup>X</sup> (16x64) = erro relativo do método X entre as malhas de 16x16 e 64x64 partições<br>ERRO <sup>X</sup> (32x64) = erro relativo do método X entre as malhas de 32x32 e 64x64 partições<br>ERRO <sup>X</sup> (48x64) = erro relativo do método X entre as malhas de 48x48 e 64x64 partições |  |                 |          |             |
|--|--|-----------------|----------|-------------|
|  | $\ln \left( \frac{\text{ERRO\%}(Np)}{\text{ERRO}_{ref}} \right)$         | método LS(2007) | método G | método GpLS |
|  | $\ln \left( \frac{\text{ERRO}^X_{16x64}}{\text{ERRO}^X_{16x64}} \right)$ | 0               | 0        | 0           |
|  | $\ln \left( \frac{\text{ERRO}^X_{32x64}}{\text{ERRO}^X_{16x64}} \right)$ | 0,83906         | 1,02949  | 1,14258     |
|  | $\ln \left( \frac{\text{ERRO}^X_{48x64}}{\text{ERRO}^X_{16x64}} \right)$ | 1,79251         | 1,40817  | 2,16356     |

A Figura 5.4 nos fornece a variação das taxas de convergência dos métodos em questão com a correspondente variação do nível de discretização da malha.



**Figura 5.4** Comportamento da taxa de convergência dos métodos GpLS, LS2007 e G com a variação do nível de discretização da malha, usando como referência a solução da malha  $16 \times 16$  obtida com os respectivos métodos para 4 grupos de energia,  $S_4$ ,  $P_1$  e uma tolerância de 0,1% com condição de contorno de Dirichlet forte.

A observação da Figura 5.4 nos permitir constatar que para a ordem de quadratura  $S_4$ , a taxa de convergência dos três métodos tem um comportamento semelhante ao apresentado para  $S_2$ . No entanto para o caso  $S_4$ , a diferença entre as performances dos métodos LS(2007) e GpLS torna-se mais suave. Mas temos que mesmo para o caso em que considera-se uma fonte de fissão hipotética e ordem de quadratura  $S_4$  que corresponde à situação mais favorável ao método LS(2007), de acordo com a Tabela 5.10, ele ainda possui uma coeficiente angular que é 7% menor que o coeficiente angular do método GpLS. Para  $S_2$  essa diferença percentual é de 31,5%.

Nesta subseção temos que os resultados obtidos para a ordem de quadratura  $S_2$  e  $S_4$  corroboram com a teoria apresentada em [22], pagina 249 (Remark 5.44), quando o autor destaca que as formulações GLS possuem maior acurácia que as formulações LS. Os resultados aqui obtidos também estão de acordo com os fundamentos teóricos

apresentados em [2], pagina 184, quando o autor evidencia por meio de estimativas de erro que as formulações GLS apresentam maior acurácia que as formulações Galerkin usuais, devido ao fato de que as formulações GLS possuem uma estabilidade extra no controle das derivadas advectivas (derivadas direcionais cujas direções são as mesmas dos campos advectivos correspondentes).

#### **5.1.4 Análise de Convergência com Condição de Dirichlet Fraca**

Assim como na subseção 5.1.3 O foco desta seção é fazer um estudo da convergência de cada uma das formulações de elementos finitos consideradas nesta tese, contudo aqui faz-se uso da condição de contorno de Dirichlet fraca. Para isso, analisamos o comportamento da taxa de convergência dos métodos em questão diante da variação do nível de refinamento malha. O procedimento de análise aqui é totalmente análogo a seção 5.1.3, naturalmente os resultados obtidos também são semelhantes.

Apresentaremos a seguir os erros relativos obtidos para quatro grupos de energia, ordem de quadratura 2(  $S_2$ ) e ordem de espalhamento igual a 1 (aproximação  $P_1$  para a seção de choque macroscópica de espalhamento ). A norma utilizada para calculo dos erros relativos é a norma máxima discreta.

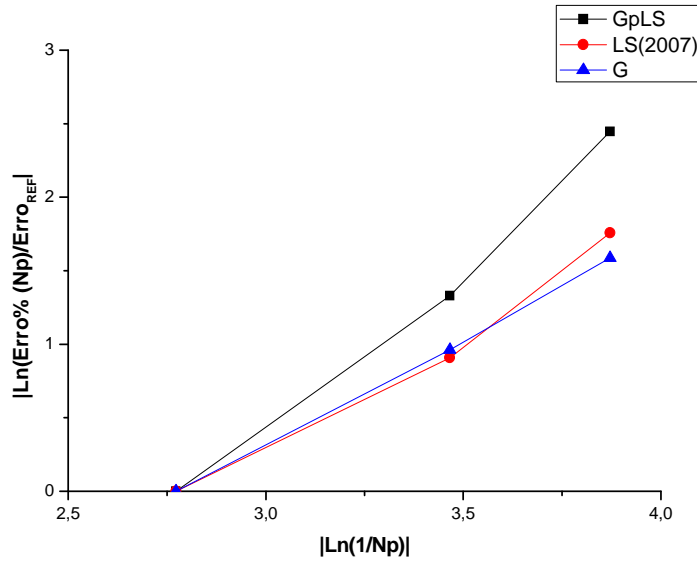
**Tabela 5.11** Erros relativos obtidos usando como referência a solução da malha 64x64 obtida com os respectivos métodos para uma tolerância de 0,1% e condição de contorno de Dirichlet fraca.

| <b>Grupos de Energia= 4   Ordem de quadratura = <math>S_2</math>   Ordem de espalhamento = <math>P_1</math>  </b><br><b>(Tolerância = 0,1%)</b> |                                |                         |                            |
|---|--------------------------------|-------------------------|----------------------------|
| <b>Erro%= <math>100 \times \left( \max \left  \frac{\phi_x^{Np,3} - \phi_x^{Np}}{\phi_x^{Np,3}} \right  \right)</math></b>                      |                                |                         |                            |
| Nº de partições da malha (Np)   | Erro relativo% método LS(2007) | Erro relativo% método G | Erro relativo% método GpLS |
| 16x16   | 11,78275                       | 22,16809                | 24,13309                   |
| 32x32   | 4,75147                        | 8,46748                 | 6,38408                    |
| 48x48   | 2,03055                        | 4,53270                 | 2,08695                    |

**Tabela 5.12** Modulo dos logaritmos Neperianos dos erros relativos dos métodos GpLS, LS(2007) e G obtidos usando como referência o erro entre as malhas de 16x16 e 64x64 partições obtido com os respectivos métodos para 4 grupos de energia,  $S_2$ ,  $P_1$  e uma tolerância de 0,1% com condição de contorno de Dirichlet fraca.

|   |   |                 |          |             |
|---|---|-----------------|----------|-------------|
| <b><math>ERRO^X</math> (16x64) = erro relativo do método X entre as malhas de 16x16 e 64x64 partições</b><br><b><math>ERRO^X</math> (32x64) = erro relativo do método X entre as malhas de 32x32 e 64x64 partições</b><br><b><math>ERRO^X</math> (48x64) = erro relativo do método X entre as malhas de 48x48 e 64x64 partições</b> |   |                 |          |             |
|   | $\left  \ln \left( \frac{ERRO\%(Np)}{ERRO_{ref}} \right) \right $     | método LS(2007) | método G | método GpLS |
|   | $\left  \ln \left( \frac{ERRO^X 16x64}{ERRO^X 16x64} \right) \right $ | 0               | 0        | 0           |
|   | $\left  \ln \left( \frac{ERRO^X 32x64}{ERRO^X 16x64} \right) \right $ | 0,90818         | 0,96242  | 1,32977     |
|   | $\left  \ln \left( \frac{ERRO^X 48x64}{ERRO^X 16x64} \right) \right $ | 1,75832         | 1,58733  | 2,44787     |

A Figura 5.5 nos fornece a variação das taxas de convergência dos métodos em questão com a correspondente variação do nível de refinamento da malha.



**Figura 5.5** Comportamento da taxa de convergência dos métodos GpLS, LS2007 e G com a variação do nível de discretização da malha, usando como referência a solução da malha  $16 \times 16$  obtida com os respectivos métodos para 4 grupos de energia,  $S_2$ ,  $P_1$  e uma tolerância de 0,1% com condição de contorno de Dirichlet fraca.

Ao interpretarmos a Figura 5.5 verificamos que a taxa de convergência dos três métodos considerados apresentam um comportamento análogo ao que foi mostrado da subseção 5.1.3 Ou seja, para a região correspondente à malha menos refinada, onde  $|\ln(\frac{1}{16})| \leq |\ln(\frac{1}{N_p})| \leq |\ln(\frac{1}{32})|$ , o gráfico de GpLS apresenta o maior coeficiente angular e o gráfico de LS(2007) o menor, no entanto a partir do primeiro refinamento sofrido pela malha verificamos que o coeficiente angular do gráfico do método LS(2007) é ligeiramente maior que o coeficiente angular do método G. Aqui a condição de Dirichlet fraca torna ainda mais evidente que entre o três métodos analisados, o método que apresenta a melhor taxa de convergência é o método GpLS adotado nessa tese de doutorado.

Agora serão apresentados os resultados obtidos para quatro grupos de energia, ordem de quadratura 4 ( $S_4$ ) e ordem de espalhamento igual a 1 (aproximação  $P_1$  para a seção de choque macroscópica de espalhamento).

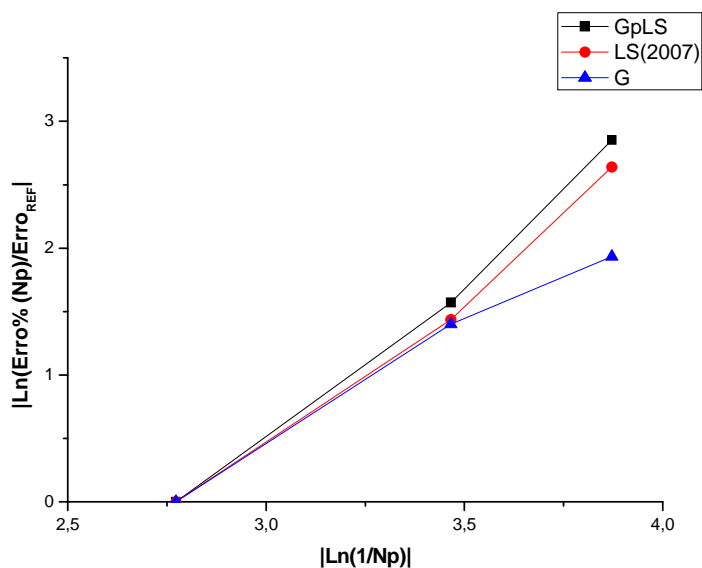
**Tabela 5.13** Erros relativos obtidos usando como referência a solução da malha 64x64 obtida com os respectivos métodos para uma tolerância de 0,1% e condição de contorno de Dirichlet fraca.

| Grupos de Energia= 4   Ordem de quadratura = $S_4$   Ordem de espalhamento = $P_1$  <br>(Tolerância = 0,1%)       |                                |                         |                            |
|---|--------------------------------|-------------------------|----------------------------|
| $\text{Erro\%} = 100 \times \left( \max \left  \frac{\phi_x^{Np,3} - \phi_x^{Np}}{\phi_x^{Np,3}} \right  \right)$ |                                |                         |                            |
| Nº de partições da malha (Np)   | Erro relativo% método LS(2007) | Erro relativo% método G | Erro relativo% método GpLS |
| 16x16   | 26,05237                       | 34,77951                | 52,0000                    |
| 32x32   | 6,19655                        | 8,58145                 | 10,8767                    |
| 48x48   | 1,86003                        | 5,03415                 | 3,0281                     |

**Tabela 5.14** Modulo dos logaritmos Neperianos dos erros relativos dos métodos GpLS, LS(2007) e G obtidos usando como referência o erro entre as malha de 16x16 e 64x64 partições obtido com os respectivos métodos para 4 grupos de energia,  $S_4$ ,  $P_1$  e uma tolerância de 0,1% com condição de contorno de Dirichlet fraca.

| $\text{ERRO}^X (16x64) = \text{erro relativo do método X entre as malhas de 16x16 e 64x64 partições}$<br>$\text{ERRO}^X (32x64) = \text{erro relativo do método X entre as malhas de 32x32 e 64x64 partições}$<br>$\text{ERRO}^X (48x64) = \text{erro relativo do método X entre as malhas de 48x48 e 64x64 partições}$ |   |                 |          |             |
|---|---|-----------------|----------|-------------|
|   | $\left  \text{Ln} \left( \frac{\text{ERRO\%}(Np)}{\text{ERRO}_{ref}} \right) \right $     | método LS(2007) | método G | método GpLS |
|   | $\left  \text{Ln} \left( \frac{\text{ERRO}^X 16x64}{\text{ERRO}^X 16x64} \right) \right $ | 0               | 0        | 0           |
|   | $\left  \text{Ln} \left( \frac{\text{ERRO}^X 32x64}{\text{ERRO}^X 16x64} \right) \right $ | 1,43612         | 1,39943  | 1,57172     |
|   | $\left  \text{Ln} \left( \frac{\text{ERRO}^X 48x64}{\text{ERRO}^X 16x64} \right) \right $ | 2,63952         | 1,93278  | 2,85041     |

A Figura 5.6 nos fornece a variação das taxas de convergência dos métodos em questão com a correspondente variação do nível de refinamento da malha.



**Figura 5.6** Comportamento da taxa de convergência dos métodos GpLS, LS2007 e G com a variação do nível de discretização da malha, usando como referência a solução da malha  $16 \times 16$  obtida com os respectivos métodos para 4 grupos de energia,  $S_4$ ,  $P_1$  e uma tolerância de 0,1% com condição de contorno de Dirichlet fraca.

Constatamos a partir interpretação da Figura 5.6 que para a ordem de quadratura  $S_4$  quando consideramos a condição de Dirichlet fraca, a taxa de convergência dos três métodos tem um comportamento semelhante ao apresentado para  $S_2$ . No entanto, análogo a subseção 5.1.3, temos que para o caso  $S_4$ , a diferença entre as performances dos métodos LS(2007) e GpLS torna-se mais suave. Sendo que mesmo para o caso em que considera-se uma fonte de fissão hipotética, condição de Dirichlet fraca e ordem de quadratura  $S_4$  que é uma situação ainda mais favorável ao método LS(2007) do que na subseção anterior, de acordo com a Tabela 5.14, ele ainda possui uma coeficiente angular que é 6,2% menor que o coeficiente angular do método GpLS. Para  $S_2$  essa diferença percentual é novamente de 31,5%.

Outra vez temos que os resultados obtidos nesta subseção para a ordem de quadratura  $S_2$  e  $S_4$  corroboram com as conjecturas feitas na seção 4.5.3. e com a teoria apresentada em [2 e 22].

### 5.1.5 Análise do nível de Refinamento da Malha (Condição de Dirichilet Fraca)

Os resultados apresentados nesta subseção visam estabelecer uma forma de avaliar se o nível de refinamento da malha está adequado ao problema e ao método proposto nesta tese. Para esse fim, comparamos os erros relativos entre as soluções (fluxos angulares de nêutrons) obtidas pelo método GpLS, com a condição de contorno de Dirichilet fraca, com e sem pós-processamento para as malhas com discretização 16x16, 32x32, 48x48 e 64x64. Os resultados obtidos com os métodos G e LS(2007) também são apresentados a fim de compararmos a estabilidade das soluções obtidas com a condição de contorno de Dirichilet fraca com os três MEFs utilizados nesta tese. Os erros relativos foram calculados a partir da norma máxima discreta.

**Tabela 5.15** Erros relativos obtidos a partir dos fluxos angulares de nêutrons obtidos com ordem de quadratura  $S_2$ , condição de contorno de Dirichilet fraca com e sem pós-processamento, para uma tolerância de 0,1%.

| Grupos de Energia= 4   Ordem de espalhamento = $P_1$   (Tolerância = 0,1%)  |                               |                 |          |             |
|---|-------------------------------|-----------------|----------|-------------|
| Erro relativo% = $100 \times \left( \max \left  \frac{\varphi_{\text{método } X_{\text{fraco}}(\text{com pp})} - \varphi_{\text{método } X_{\text{fraco}}(\text{sem pp})}}{\varphi_{\text{método } X_{\text{fraco}}(\text{com PP})}} \right  \right)$ |                               |                 |          |             |
| $S_N$   | nº de partições da malha (Np) | Erro relative % |          |             |
|   |                               | Método LS(2007) | Método G | Método GpLS |
| $S_2$   | 16x16                         | 8.9118          | 6.5978   | 8.9075      |
|   | 32x32                         | 4.8864          | 1.5313   | 2.6013      |
|   | 48x48                         | 3.2393          | 4.7192   | 1.5488      |
|   | 64x64                         | 3.9680          | 3.3207   | 1.1214      |
| $S_4$   | 16x16                         | 12.8651         | 5.2695   | 3.3164      |
|   | 32x32                         | 8.8712          | 2.4923   | 1.8318      |
|   | 48x48                         | 6.5029          | 1.9787   | 1.2267      |
|   | 64x64                         | 4.9923          | 1.5867   | 0.9164      |

Para o método GpLS, dada a estabilidade de sua performance com a condição de contorno de Dirichilet fraca, esses experimentos sugerem que para um erro relativo menor que 2%, estamos provavelmente com um nível de refinamento adequado para se



obter a precisão desejada para a solução do problema. O método LS(2007) apresenta uma estabilidade equivalente ao método GPLS, no entanto apresenta erros relativos substancialmente maiores que os métodos G e GpLS não atingindo em nenhuma das simulações o critério de 2%. Por sua vez, o método G mesmo com sua baixa estabilidade consegue atingir o critério de 2% quando se utiliza ordem de quadratura angular  $S_4$ , a partir do segundo refinamento da malha.

## 5.2 Experimentos Numéricos com Fonte Fixa Real

As simulações realizadas nessa seção consistem de resolver um problema de fonte fixa semelhante ao descrito no início deste capítulo e as análises aqui desenvolvidas são análogas as análises feitas ao longo de toda a seção 5.1. Entretanto a fonte fixa utilizada nessa seção trata-se de uma fonte de fissão fornecida por um código de transporte cuja modelagem matemática é baseada no método Diamond Difference (DD), descrito na referência [3]. Tal fonte é calculada a partir da resolução do problema de autovalor definido pela equação (2.2) e pelos parâmetros físicos apresentados nas tabelas contidas no Apêndice A, ou seja, considerando quatro grupos de energia, ordem de quadratura angular  $S_2$  e  $S_4$ , e espalhamento angular linearmente anisotrópico correspondente à ordem de espalhamento  $P_1$ , com a mesma geometria e com as mesmas condições de contorno descritas pelas Figuras 5.1 e 5.2, respectivamente.

Os experimentos dessa seção têm como objetivo analisar a sensibilidade dos métodos apresentados nessa tese, para uma fonte de fissão fixa cujo valor adequa-se às propriedades físicas do problema a ser tratado, sendo considerada por esse motivo uma fonte fixa “real”.

### 5.2.1 Análise do Número de Iterações Internas com Condição de Dirichilet Forte

Esta subsecção é devotada à análise do número de iterações internas para cada uma das formulações de elementos finitos consideradas nesta tese, com condição de contorno de Dirichilet forte. As formulações de elementos finitos em questão são as mesmas citadas no início deste capítulo.

Apresentaremos a seguir os resultados obtidos para quatro grupos de energia, ordem de quadratura  $S_2$  e  $S_4$  com ordem de espalhamento igual a 1 (aproximação  $P_1$  para a seção de choque macroscópica de espalhamento). As tabelas de 5.16 a 5.18 apresentam o número de iterações internas para cada uma das formulações de elementos finitos acima citadas.

**Tabela 5.16** Número de iterações internas das formulações de elementos finitos para uma tolerância de 1% e condição de contorno de Dirichilet forte.

| Grupos de Energia= 4   Ordem de espalhamento = $P_1$   (Tolerância = 1%) |                               |                              |                           |                           |
|--|-------------------------------|------------------------------|---------------------------|---------------------------|
| $S_N$  | nº de partições da malha (Np) | Número de iterações internas |                           |                           |
|  |                               | Método LS(2007)              | Método G                  | Método GpLS               |
|  |                               | C. C. de Dirichilet Forte    | C. C. de Dirichilet Forte | C. C. de Dirichilet Forte |
| $S_2$  | 16x16                         | 27                           | 27                        | 27                        |
|  | 32x32                         | 27                           | 27                        | 27                        |
|  | 48x48                         | 27                           | 27                        | 27                        |
|  | 64x64                         | 27                           | 27                        | 27                        |
| $S_4$  | 16x16                         | 33                           | 33                        | 33                        |
|  | 32x32                         | 33                           | 33                        | 33                        |
|  | 48x48                         | 33                           | 33                        | 33                        |
|  | 64x64                         | 33                           | 33                        | 33                        |

**Tabela 5.17** Número de iterações internas das formulações de elementos finitos para uma tolerância de 0,5% e condição de contorno de Dirichilet forte.

| <b>Grupos de Energia= 4   Ordem de espalhamento = <math>P_1</math>   (Tolerância = 0,5%)</b> |                               |                              |                           |                           |
|--|-------------------------------|------------------------------|---------------------------|---------------------------|
| $S_N$  | n° de partições da malha (Np) | Número de iterações internas |                           |                           |
|  |                               | Método LS(2007)              | Método G                  | Método GpLS               |
|  |                               | C. C. de Dirichilet Forte    | C. C. de Dirichilet Forte | C. C. de Dirichilet Forte |
| $S_2$  | 16x16                         | 31                           | 31                        | 31                        |
|  | 32x32                         | 31                           | 31                        | 31                        |
|  | 48x48                         | 31                           | 31                        | 31                        |
|  | 64x64                         | 31                           | 31                        | 31                        |
| $S_4$  | 16x16                         | 38                           | 38                        | 38                        |
|  | 32x32                         | 38                           | 38                        | 38                        |
|  | 48x48                         | 38                           | 38                        | 38                        |
|  | 64x64                         | 38                           | 38                        | 38                        |

**Tabela 5.18** Número de iterações internas das formulações de elementos finitos para uma tolerância de 0,1% e condição de contorno de Dirichilet forte .

| <b>Grupos de Energia= 4   Ordem de espalhamento = <math>P_1</math>   (Tolerância = 0,1%)</b> |                               |                              |                           |                           |
|--|-------------------------------|------------------------------|---------------------------|---------------------------|
| $S_N$  | n° de partições da malha (Np) | Número de iterações internas |                           |                           |
|  |                               | Método LS(2007)              | Método G                  | Método GpLS               |
|  |                               | C. C. de Dirichilet Forte    | C. C. de Dirichilet Forte | C. C. de Dirichilet Forte |
| $S_2$  | 16x16                         | 39                           | 39                        | 39                        |
|  | 32x32                         | 39                           | 40                        | 39                        |
|  | 48x48                         | 40                           | 40                        | 40                        |
|  | 64x64                         | 40                           | 39                        | 40                        |
| $S_4$  | 16x16                         | 49                           | 49                        | 49                        |
|  | 32x32                         | 49                           | 49                        | 49                        |
|  | 48x48                         | 49                           | 49                        | 49                        |
|  | 64x64                         | 49                           | 49                        | 49                        |

Podemos constatar nos resultados apresentados nas tabelas numeradas de 5.16 a 5.18, que para uma fonte de fissão fixa real e para a condição de Dirichilet forte, quando se observa as tolerâncias de 1%, 0,5% e 0,1% os três métodos apresentam números de iterações internas muito próximos para as quatro malhas consideradas. Verificamos que para uma fonte fixa de fissão com valor considerado real, o método GpLS proposto nesta tese possui uma performance iterativa que se equipara aos métodos G e LS(2007), sendo que os três métodos possuem uma performance iterativa que não é sensível ao refinamento da malha.

## 5.2.2 Análise do Número de Iterações Internas com Condição de Dirichlet Fraca

Esta subseção é devotada à análise do número de iterações internas para cada uma das formulações de elementos finitos consideradas nesta tese, com condição de contorno de Dirichlet fraca. As formulações em questão são as mesmas citadas no início deste capítulo. Contudo ressaltamos novamente, que a formulação LS apresentada na referência [20] não leva em consideração a condição de Dirichlet fraca. Portanto a aplicação da condição de Dirichlet fraca a uma formulação do tipo LS é mais uma contribuição desta tese de doutorado às pesquisas realizadas em neutrônica.

Apresentaremos a seguir os resultados obtidos para quatro grupos de energia, ordem de quadratura  $S_2$  e  $S_4$  com ordem de espalhamento igual a 1 (aproximação  $P_1$  para a seção de choque macroscópica de espalhamento).

As tabelas de 5.19 a 5.21 apresentam o número de iterações internas para cada uma das formulações de elementos finitos consideradas nesta tese, com condição de contorno de Dirichlet fraca.

**Tabela 5.19** Número de iterações internas das formulações de elementos finitos para uma tolerância de 1% e condição de contorno de Dirichlet fraca.

| <b>Grupos de Energia= 4   Ordem de espalhamento = <math>P_1</math>   (Tolerância = 1%)</b> |                               |                              |                          |                          |
|--|-------------------------------|------------------------------|--------------------------|--------------------------|
| $S_N$  | n° de partições da malha (Np) | Número de iterações internas |                          |                          |
|  |                               | Método LS(2007)              | Método G                 | Método GpLS              |
|  |                               | C. C. de Dirichlet Fraca     | C. C. de Dirichlet Fraca | C. C. de Dirichlet Fraca |
| $S_2$  | 16x16                         | 27                           | 27                       | 26                       |
|  | 32x32                         | 27                           | 27                       | 27                       |
|  | 48x48                         | 27                           | 27                       | 27                       |
|  | 64x64                         | 27                           | 27                       | 27                       |
| $S_4$  | 16x16                         | 32                           | 32                       | 32                       |
|  | 32x32                         | 32                           | 32                       | 32                       |
|  | 48x48                         | 32                           | 32                       | 32                       |
|  | 64x64                         | 32                           | 32                       | 32                       |

**Tabela 5.20** Número de iterações internas das formulações de elementos finitos para uma tolerância de 0,5% e condição de contorno de Dirichilet fraca.

| <b>Grupos de Energia= 4   Ordem de espalhamento = <math>P_1</math>   (Tolerância = 0,5%)</b> |                               |                              |                           |                           |
|--|-------------------------------|------------------------------|---------------------------|---------------------------|
| $S_N$  | n° de partições da malha (Np) | Número de iterações internas |                           |                           |
|  |                               | Método LS(2007)              | Método G                  | Método GpLS               |
|  |                               | C. C. de Dirichilet Fraca    | C. C. de Dirichilet Fraca | C. C. de Dirichilet Fraca |
| $S_2$  | 16x16                         | 30                           | 30                        | 30                        |
|  | 32x32                         | 31                           | 31                        | 31                        |
|  | 48x48                         | 31                           | 31                        | 31                        |
|  | 64x64                         | 31                           | 31                        | 31                        |
| $S_4$  | 16x16                         | 37                           | 37                        | 37                        |
|  | 32x32                         | 37                           | 37                        | 37                        |
|  | 48x48                         | 37                           | 37                        | 37                        |
|  | 64x64                         | 37                           | 37                        | 37                        |

**Tabela 5.21** Número de iterações internas das formulações de elementos finitos para uma tolerância de 0,1% e condição de contorno de Dirichilet fraca.

| <b>Grupos de Energia= 4   Ordem de espalhamento = <math>P_1</math>   (Tolerância = 0,1%)</b> |                               |                              |                           |                           |
|--|-------------------------------|------------------------------|---------------------------|---------------------------|
| $S_N$  | n° de partições da malha (Np) | Número de iterações internas |                           |                           |
|  |                               | Método LS(2007)              | Método G                  | Método GpLS               |
|  |                               | C. C. de Dirichilet Fraca    | C. C. de Dirichilet Fraca | C. C. de Dirichilet Fraca |
| $S_2$  | 16x16                         | 39                           | 39                        | 39                        |
|  | 32x32                         | 39                           | 39                        | 39                        |
|  | 48x48                         | 40                           | 40                        | 40                        |
|  | 64x64                         | 40                           | 40                        | 40                        |
| $S_4$  | 16x16                         | 48                           | 48                        | 48                        |
|  | 32x32                         | 48                           | 48                        | 48                        |
|  | 48x48                         | 48                           | 48                        | 48                        |
|  | 64x64                         | 48                           | 48                        | 48                        |

Podemos constatar nos resultados apresentados nas tabelas numeradas de 5.19 a 5.21, que para uma fonte de fissão fixa com valores reais e para a condição de Dirichilet fraca, quando se observa as tolerâncias de 1%, 0,5% e 0,1% os três métodos apresentam novamente números de iterações internas muito próximos para as quatro malhas consideradas. Verificamos com isso que a condição de Dirichilet fraca para problemas com fontes de fissão reais não ocasiona um aumento do esforço computacional tornando-a competitiva com a usual condição de Dirichilet forte. Além disso,

constatamos novamente que o método GpLS possui uma performance iterativa que se equipara aos métodos G e LS(2007).

### 5.2.3 Análise de Convergência com Condição de Dirichilet Forte

Assim como na subseção 5.1.3 o foco desta seção é fazer um estudo da convergência de cada uma das formulações de elementos finitos consideradas nesta tese fazendo uso da condição de contorno de Dirichilet forte. Para isso, analisamos o comportamento da taxa de convergência dos métodos em questão diante da variação do nível de discretização da malha. A metodologia de análise aqui é totalmente análoga a seção 5.1.3, naturalmente os resultados obtidos também são semelhantes.

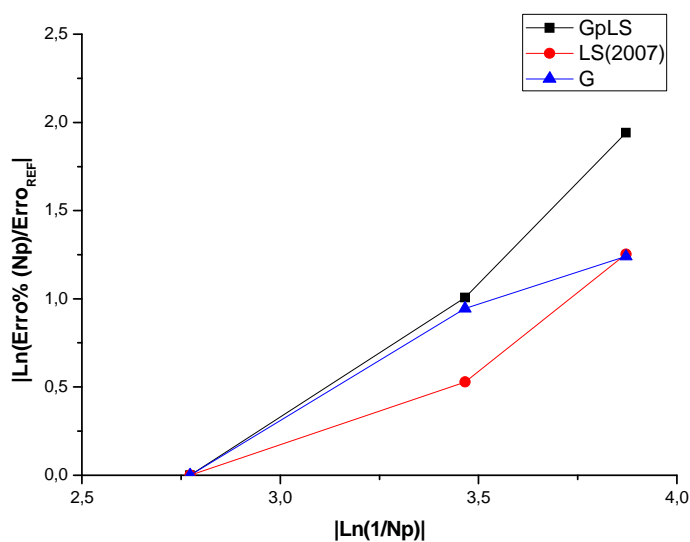
Apresentaremos a seguir os erros relativos obtidos para quatro grupos de energia, ordem de quadratura  $S_2$  e  $S_4$  com ordem de espalhamento igual a 1 (aproximação  $P_1$  para a seção de choque macroscópica de espalhamento). A norma utilizada para calculo dos erros relativos é a norma máxima discreta.

**Tabela 5.22** Erros relativos obtidos usando como referência a solução da malha 64x64 obtida com os respectivos métodos para uma tolerância de 0,1% e condição de contorno de Dirichilet forte.

| <b>Grupos de Energia= 4   Ordem de quadratura = <math>S_2</math>   Ordem de espalhamento = <math>P_1</math>  </b><br><b>(Tolerância = 0,1%)</b> |                                       |                                |                                   |
|---|---------------------------------------|--------------------------------|-----------------------------------|
| <b>Erro%=100 × <math>\left( \max \left  \frac{\varphi_X^{Np-3} - \varphi_X^{Np}}{\varphi_X^{Np-3}} \right  \right)</math></b>                   |                                       |                                |                                   |
| <b>Nº de partições da malha (Np)</b>  | <b>Erro relativo% método LS(2007)</b> | <b>Erro relativo% método G</b> | <b>Erro relativo% método GpLS</b> |
| 16x16   | 8,98929                               | 55,28219                       | 17,63519                          |
| 32x32   | 5,44328                               | 20,97025                       | 6,63207                           |
| 48x48   | 2,67718                               | 15,08418                       | 2,60895                           |

**Tabela 5.23** Modulo dos logaritmos Neperianos dos erros relativos dos métodos GpLS, LS(2007) e G obtidos usando como referência o erro entre as malha de 16x16 e 64x64 partições obtido com os respectivos métodos para 4 grupos de energia,  $S_2$ ,  $P_1$  e uma tolerância de 0,1% com condição de contorno de Dirichilet forte.

| $ERRO^X$ (16x64) = erro relativo do método X entre as malhas de 16x16 e 64x64 partições<br>$ERRO^X$ (32x64) = erro relativo do método X entre as malhas de 32x32 e 64x64 partições<br>$ERRO^X$ (48x64) = erro relativo do método X entre as malhas de 48x48 e 64x64 partições |   |                 |          |             |
|---|---|-----------------|----------|-------------|
|   | $\left  \ln \left( \frac{ERRO\%(Np)}{ERRO_{ref}} \right) \right $         | método LS(2007) | método G | método GpLS |
|   | $\left  \ln \left( \frac{ERRO^X_{16x64}}{ERRO^X_{16x64}} \right) \right $ | 0               | 0        | 0           |
|   | $\left  \ln \left( \frac{ERRO^X_{32x64}}{ERRO^X_{16x64}} \right) \right $ | 0,52868         | 0,94505  | 1,00725     |
|   | $\left  \ln \left( \frac{ERRO^X_{48x64}}{ERRO^X_{16x64}} \right) \right $ | 1,25302         | 1,23999  | 1,94244     |



**Figura 5.7** Comportamento da taxa de convergência dos métodos GpLS, LS2007 e G com a variação do nível de discretização da malha, usando como referência a solução da malha 16x16 obtida com os respectivos métodos para 4 grupos de energia,  $S_2$ ,  $P_1$  e uma tolerância de 0,1% com condição de contorno de Dirichilet forte.

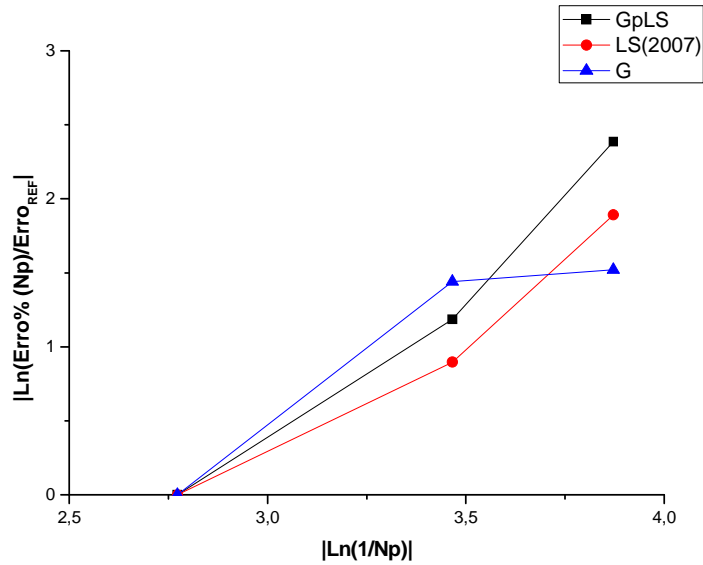
**Tabela 5.24** Erros relativos obtidos usando como referência a solução da malha 64x64 obtida com os respectivos métodos para uma tolerância de 0,1% e condição de contorno de Dirichlet forte.

| Grupos de Energia= 4   Ordem de quadratura = $S_4$   Ordem de espalhamento = $P_1$  <br>(Tolerância = 0,1%)       |                                |                         |                            |
|---|--------------------------------|-------------------------|----------------------------|
| $\text{Erro}\% = 100 \times \left( \max \left  \frac{\phi_x^{Np-3} - \phi_x^{Np}}{\phi_x^{Np-3}} \right  \right)$ |                                |                         |                            |
| Nº de partições da malha (Np)   | Erro relativo% método LS(2007) | Erro relativo% método G | Erro relativo% método GpLS |
| 16x16   | 13.51601                       | 49.77731                | 16.52584                   |
| 32x32   | 5.51018                        | 11.78310                | 5.03679                    |
| 48x48   | 2.04722                        | 10.89170                | 1.52523                    |

**Tabela 5.25** Modulo dos logaritmos Neperianos dos erros relativos dos métodos GpLS, LS(2007) e G obtidos usando como referência o erro entre as malha de 16x16 e 64x64 partições obtido com os respectivos métodos para 4 grupos de energia,  $S_4$ ,  $P_1$  e uma tolerância de 0,1% com condição de contorno de Dirichlet forte.

| $\text{ERRO}^X (16x64) = \text{erro relativo do método X entre as malhas de 16x16 e 64x64 partições}$<br>$\text{ERRO}^X (32x64) = \text{erro relativo do método X entre as malhas de 32x32 e 64x64 partições}$<br>$\text{ERRO}^X (48x64) = \text{erro relativo do método X entre as malhas de 48x48 e 64x64 partições}$ |   |                 |          |             |
|---|---|-----------------|----------|-------------|
|   | $\left  \text{Ln} \left( \frac{\text{ERRO}\%(Np)}{\text{ERRO}_{ref}} \right) \right $     | método LS(2007) | método G | método GpLS |
|   | $\left  \text{Ln} \left( \frac{\text{ERRO}^X 16x64}{\text{ERRO}^X 16x64} \right) \right $ | 0               | 0        | 0           |
|   | $\left  \text{Ln} \left( \frac{\text{ERRO}^X 32x64}{\text{ERRO}^X 16x64} \right) \right $ | 0,89687         | 1,44101  | 1,18717     |
|   | $\left  \text{Ln} \left( \frac{\text{ERRO}^X 48x64}{\text{ERRO}^X 16x64} \right) \right $ | 1,89048         | 1,51957  | 2,38586     |





**Figura 5.8** Comportamento da taxa de convergência dos métodos GpLS, LS2007 e G com a variação do nível de discretização da malha, usando como referência a solução da malha  $16 \times 16$  obtida com os respectivos métodos para 4 grupos de energia,  $S_4, P_1$  e uma tolerância de 0,1% com condição de contorno de Dirichilet forte.

Interpretando as figuras 5.7 e 5.8 verificamos que o comportamento da taxa de convergência dos métodos em questão, quando consideramos uma fonte fixa real (de fissão), é totalmente análogo ao comportamento verificado ao longo da seção 5.1. O método GpLS continua se destacando tanto para os casos  $S_2$  e  $S_4$ , sendo que nesta subseção as diferenças percentuais são menos suaves para o caso  $S_4$ .

A partir das tabelas 5.23 e 5.25 verificamos que para  $S_2$  o coeficiente angular do método GpLS é 29,1% maior que o coeficiente angular do método LS(2007), já para  $S_4$  essa diferença percentual é de 20,6%. Para ambos os casos analisados o método G apresenta pior taxa de convergência em virtude das oscilações espúrias intrínsecas ao método de Galerkin Clássico.

Aqui também temos que os resultados obtidos nesta subseção para a ordem de quadratura  $S_2$  e  $S_4$  corroboram com as conjecturas feitas na seção 4.5.3. e com a teoria apresentada em [2 e 22].

#### 5.2.4 Análise de Convergência com Condição de Dirichlet Fraca

Assim como na subseção 5.1.4 O foco desta seção é fazer um estudo da convergência de cada uma das formulações de elementos finitos consideradas nesta tese fazendo uso da condição de contorno de Dirichlet fraca. Para isso, analisamos o comportamento da taxa de convergência dos métodos em questão diante da variação do nível de refinamento da malha. O procedimento de análise aqui é totalmente análogo à seção 5.1.4, naturalmente os resultados obtidos também são semelhantes.

Apresentaremos a seguir os erros relativos obtidos para quatro grupos de energia, ordem de quadratura  $S_2$  e  $S_4$  com ordem de espalhamento igual a 1 (aproximação  $P_1$  para a seção de choque macroscópica de espalhamento). A norma utilizada para cálculo dos erros relativos é a norma máxima discreta.

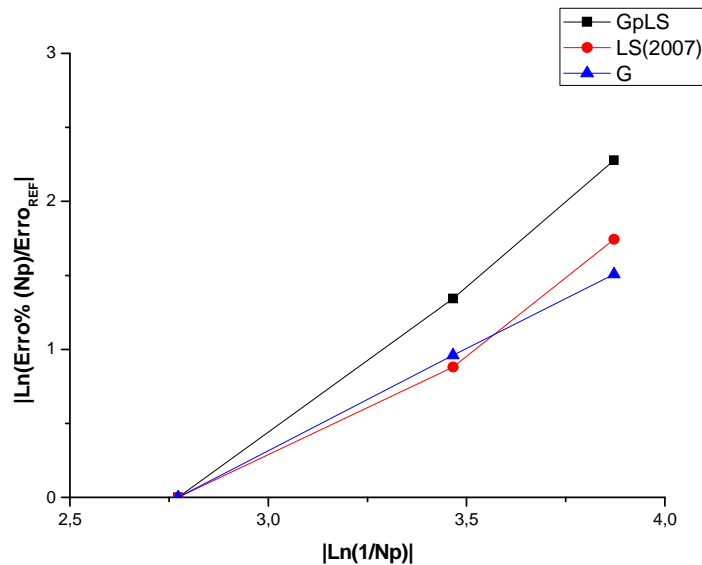
**Tabela 5.26** Erros relativos obtidos usando como referência a solução da malha 64x64 obtida com os respectivos métodos para uma tolerância de 0,1% e condição de contorno de Dirichlet fraca.

| <b>Grupos de Energia= 4   Ordem de quadratura = <math>S_2</math>   Ordem de espalhamento = <math>P_1</math>  </b><br><b>(Tolerância = 0,1%)</b> |                                       |                                |                                   |
|---|---------------------------------------|--------------------------------|-----------------------------------|
| <b>Erro%=100 × <math>\left( \max \left  \frac{\varphi_x^{Np-3} - \varphi_x^{Np}}{\varphi_x^{Np-3}} \right  \right)</math></b>                   |                                       |                                |                                   |
| <b>Nº de partições da malha (Np)</b>  | <b>Erro relativo% método LS(2007)</b> | <b>Erro relativo% método G</b> | <b>Erro relativo% método GpLS</b> |
| 16x16   | 14,05230                              | 58,12045                       | 25,56121                          |
| 32x32   | 5,82944                               | 22,23399                       | 6,67349                           |
| 48x48   | 2,46009                               | 12,85683                       | 2,61744                           |

**Tabela 5.27** Modulo dos logaritmos Neperianos dos erros relativos dos métodos GpLS, LS(2007) e G obtidos usando como referência o erro entre as malha de 16x16 e 64x64 partições obtido com os respectivos métodos para 4 grupos de energia,  $S_2$ ,  $P_1$  e uma tolerância de 0,1% com condição de contorno de Dirichilet fraca.

| $ERRO^X$ (16x64) = erro relativo do método X entre as malhas de 16x16 e 64x64 partições<br>$ERRO^X$ (32x64) = erro relativo do método X entre as malhas de 32x32 e 64x64 partições<br>$ERRO^X$ (48x64) = erro relativo do método X entre as malhas de 48x48 e 64x64 partições |   |                 |          |             |
|---|---|-----------------|----------|-------------|
|   | $\left  \ln \left( \frac{ERRO\%(Np)}{ERRO_{ref}} \right) \right $         | método LS(2007) | método G | método GpLS |
|   | $\left  \ln \left( \frac{ERRO^X_{16x64}}{ERRO^X_{16x64}} \right) \right $ | 0               | 0        | 0           |
|   | $\left  \ln \left( \frac{ERRO^X_{32x64}}{ERRO^X_{16x64}} \right) \right $ | 0,879865        | 0,960896 | 1,342933    |
|   | $\left  \ln \left( \frac{ERRO^X_{48x64}}{ERRO^X_{16x64}} \right) \right $ | 1,742588        | 1,508643 | 2,278879    |

A Figura 5.9 nos fornece a variação das taxas de convergência dos métodos em questão com a correspondente variação do nível de refinamento da malha.



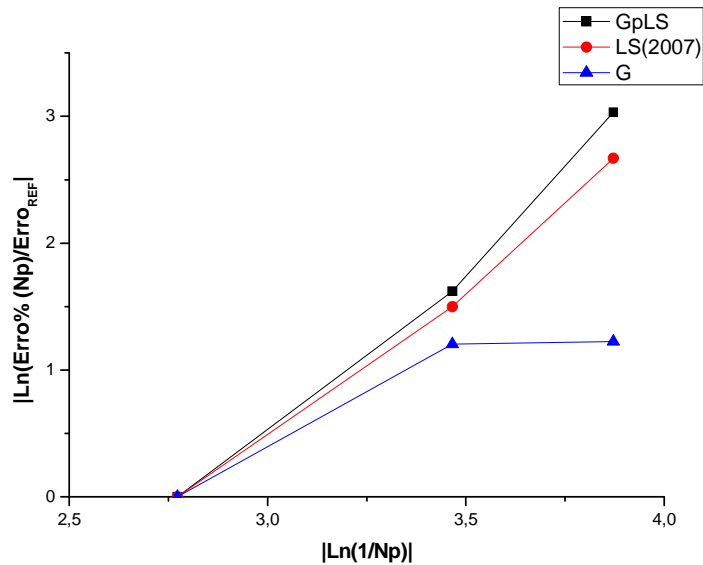
**Figura 5.9** Comportamento da taxa de convergência dos métodos GpLS, LS2007 e G com a variação do nível de discretização da malha, usando como referência a solução da malha 16x16 obtida com os respectivos métodos para 4 grupos de energia,  $S_2$ ,  $P_1$  e uma tolerância de 0,1% com condição de contorno de Dirichilet fraca.

**Tabela 5.28** Erros relativos obtidos usando como referência a solução da malha 64x64 obtida com os respectivos métodos para uma tolerância de 0,1% e condição de contorno de Dirichilet fraca.

| Grupos de Energia= 4   Ordem de quadratura = $S_4$   Ordem de espalhamento = $P_1$  <br>(Tolerância = 0,1%) |                                |                         |                            |
|---|--------------------------------|-------------------------|----------------------------|
| $\text{Erro\%} = 100 \times \left  \frac{\varphi_X^{Np-3} - \varphi_X^{Np}}{\varphi_X^{Np-3}} \right $      |                                |                         |                            |
| Nº de partições da malha (Np)   | Erro relativo% método LS(2007) | Erro relativo% método G | Erro relativo% método GpLS |
| 16x16   | 29,5775                        | 33,3101                 | 54,05916                   |
| 32x32   | 6,60623                        | 9,99832                 | 10,69448                   |
| 48x48   | 2,05312                        | 9,78909                 | 2,61245                    |

**Tabela 5.29** Modulo dos logaritmos Neperianos dos erros relativos dos métodos GpLS, LS(2007) e G obtidos usando como referência o erro entre as malha de 16x16 e 64x64 partições obtido com os respectivos métodos para 4 grupos de energia,  $S_4$ ,  $P_1$  e uma tolerância de 0,1% com condição de contorno de Dirichilet fraca.

| $\text{ERRO}^X (16x64) = \text{erro relativo do método X entre as malhas de 16x16 e 64x64 partições}$<br>$\text{ERRO}^X (32x64) = \text{erro relativo do método X entre as malhas de 32x32 e 64x64 partições}$<br>$\text{ERRO}^X (48x64) = \text{erro relativo do método X entre as malhas de 48x48 e 64x64 partições}$ |   |                 |          |             |
|---|---|-----------------|----------|-------------|
|   | $\left  \text{Ln} \left( \frac{\text{ERRO}^X(Np)}{\text{ERRO}_{ref}} \right) \right $     | método LS(2007) | método G | método GpLS |
|   | $\left  \text{Ln} \left( \frac{\text{ERRO}^X 16x64}{\text{ERRO}^X 16x64} \right) \right $ | 0               | 0        | 0           |
|   | $\left  \text{Ln} \left( \frac{\text{ERRO}^X 32x64}{\text{ERRO}^X 16x64} \right) \right $ | 1,499           | 1,20344  | 1,62035     |
|   | $\left  \text{Ln} \left( \frac{\text{ERRO}^X 48x64}{\text{ERRO}^X 16x64} \right) \right $ | 2,66765         | 1,22459  | 3,02979     |



**Figura 5.10** Comportamento da taxa de convergência dos métodos GpLS, LS2007 e G com a variação do nível de discretização da malha, usando como referência a solução da malha 16x16 obtida com os respectivos métodos para 4 grupos de energia,  $S_4$ ,  $P_1$  e uma tolerância de 0,1% com condição de contorno de Dirichlet fraca.

Análogo à subseção anterior, através das figuras 5.9 e 5.10 verificamos que o comportamento da taxa de convergência dos métodos em questão, quando consideramos uma fonte fixa (de fissão) real, é totalmente análogo ao comportamento verificado quando consideramos a fonte fixa hipotética (seção 5.1). O método GpLS continua se destacando tanto para os casos  $S_2$  e  $S_4$ . Sendo que deferente do que acontece na subseção 5.1.4, aqui quando consideramos a condição de Dirichlet fraca as diferenças percentuais são suaves para  $S_2$  e mais perceptíveis para  $S_4$ . De modo que a partir das tabelas 5.27 e 5.29 verificamos que para  $S_2$  o coeficiente angular do método GpLS é 8,48% maior que o coeficiente angular do método LS(2007), já para  $S_4$  essa diferença percentual é de 38,65%, que corresponde a maior diferença registrada, tendo em vista todos os experimentos realizados.

Outra vez destacamos que os resultados obtidos nesta subseção para a ordem de quadratura  $S_2$  e  $S_4$  corroboram com as conjecturas feitas na seção 4.5.3. e com a teoria apresentada em [2 e 22].

### **5.2.5 Análise do nível de Refinamento da Malha(Condição de Dirichilet Fraca)**

Assim como na subseção 5.1.5, os resultados realizados nessa subseção visam estabelecer uma forma de avaliar se, o nível de refinamento da malha está adequado ao problema e ao método adotado nesta tese, sendo que nesta subseção consideramos uma fonte fixa real. Novamente, comparamos os erros relativos entre as soluções (fluxos angulares de nêutrons) obtidas pelo método GpLS com a condição de contorno de Dirichilet fraca, com e sem pós-processamento para as malhas com número de partições 16x16, 32x32, 48x48 e 64x64. Os resultados obtidos com os métodos G e LS(2007) também são apresentados a fim de compararmos a estabilidade das soluções obtidas com a condição de contorno de Dirichilet fraca com os três MEFs utilizados nesta tese. Os erros relativos foram calculados a partir da norma máxima discreta.

**Tabela 5.30** Erros relativos a partir dos fluxos angulares de nêutrons obtidos com ordem de quadratura  $S_2$ , condição de contorno de Dirichilet fraca com e sem pós-processamento, para uma tolerância de 0,1%.

| <b>Grupos de Energia= 4   Ordem de espalhamento = <math>P_1</math>   (Tolerância = 0,1%)</b><br><b>Erro relativo% = <math>100 \times \left( \max \left  \frac{\Phi_{\text{método } X_{\text{fraco}}(\text{com pp})} - \Phi_{\text{método } X_{\text{fraco}}(\text{sem pp})}}{\Phi_{\text{método } X_{\text{fraco}}(\text{com pp})}} \right  \right)</math></b> |                               |                 |          |             |
|--|-------------------------------|-----------------|----------|-------------|
| $S_N$  | n° de partições da malha (Np) | Erro relative % |          |             |
|  |                               | Método LS(2007) | Método G | Método GpLS |
| $S_2$  | 16x16                         | 9.0691          | 11.9475  | 9.0278      |
|  | 32x32                         | 4.9665          | 1.5206   | 2.6226      |
|  | 48x48                         | 6.0647          | 9.8242   | 1.5497      |
|  | 64x64                         | 3.2544          | 3.1102   | 1.1209      |
| $S_4$  | 16x16                         | 13.0680         | 5.2468   | 3.6033      |
|  | 32x32                         | 8.9922          | 2.5013   | 1.8245      |
|  | 48x48                         | 6.5882          | 2.8230   | 1.2694      |
|  | 64x64                         | 5.0564          | 1.4641   | 0.9314      |

Para o método GpLS, dada a estabilidade de sua performance com a condição de contorno de Dirichilet fraca para os casos  $S_2$  e  $S_4$ , esses experimentos sugerem que para um erro relativo menor que 2%, estamos provavelmente com um nível de refinamento adequado para se obter a precisão desejada para a solução do problema. O método GpLS atinge o critério de 2% para o caso  $S_2$  a partir do segundo refinamento da malha. Para o caso  $S_4$  esse critério é atingido já no primeiro refinamento.

Para o caso  $S_4$  com condição de Dirichilet fraca, o método LS(2007) apresenta uma estabilidade equivalente ao método GpLS. No entanto, para todas as simulações realizadas nesta subseção o método LS(2007) apresenta erros relativos substancialmente maiores que os métodos G e GpLS não atingindo em nenhuma das simulações o critério de 2%. Além disso, podemos verificar a falta de estabilidade do método LS(2007) no cálculo desses erros relativos para o caso  $S_2$ . Portanto, em se tratando do método LS(2007), os experimentos numéricos dessa subseção sugerem que a utilização dos soluções obtidas com a condição de Dirichilet fraca com e sem o pós-processamento, não servem como uma forma de avaliar se o nível de refinamento da malha esta

adequando ao problema. Por sua vez, o método G mesmo com sua baixa estabilidade consegue atingir o critério de 2% quando se utiliza ordem de quadratura angular  $S_4$ .

### **5.3 Validação do método Proposto**

#### **5.3.1 Comparação das Soluções Obtidas pelas Formulações de Elementos Finitos**

Com o intuito de validar a aplicação do método GpLS apresentado nesta tese ao problema de transporte de nêutrons, comparamos os fluxos escalares de nêutrons normalizados obtidos pelos métodos de elementos finitos G, LS(2007) e GpLS. Os fluxos escalares normalizados considerados nesta seção são provenientes da solução do problema de fonte fixa definido na seção 5.2.

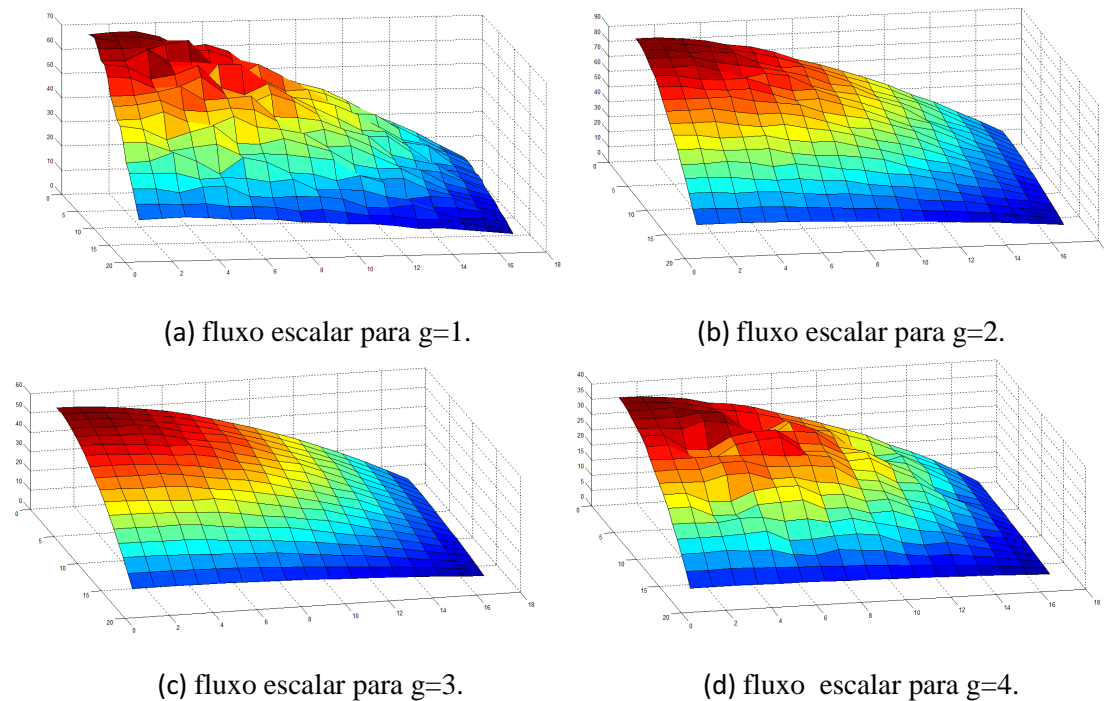
O método escolhido como referência é o método LS(2007). Essa escolha se deve ao fato de que o método LS(2007) apresentado na referência [20] também utiliza ordenadas discretas em sua formulação variacional e assim como o método GpLS, é também considerado como um método de elementos finitos estabilizado que exige um esforço computacional equivalente ao próprio GpLS. Além disso, o método LS(2007) foi devidamente validado na referência [20], quando teve sua performance analisada para diversos benchmarks tridimensionais, através de comparações com métodos numéricos tradicionais, dentre os quais destacamos o método de Monte Carlo.

Para obtermos os erros relativos entre as formulações acima citadas, inicialmente consideramos os fluxos escalares do método LS(2007) obtidos com a condição de Dirichlet forte, por ser essa a condição utilizada na referência [20] em seguida utilizamos também os fluxos escalares obtidos com as condições de Dirichlet fraca.

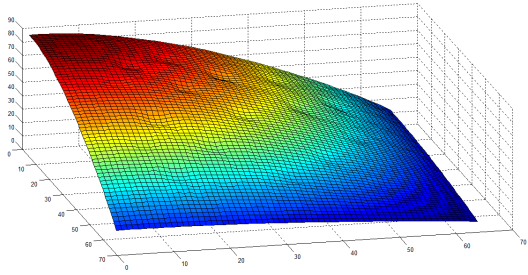


Entretanto, mais uma vez destacamos que a formulação LS apresentada na referência [20] não leva em consideração a condição de Dirichlet fraca. Portanto a aplicação da condição de Dirichlet fraca a uma formulação do tipo LS é mais uma contribuição desta tese de doutorado às pesquisas realizadas em neutrônica.

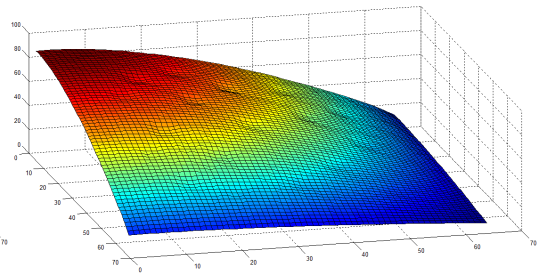
Os resultados apresentados a seguir mostram o comportamento da precisão das formulações G e GpLS para as malhas de 16x16 e 64x64 partições, levando em consideração a variação da ordem de quadratura  $S_N$  e da condição de contorno de Dirichlet.



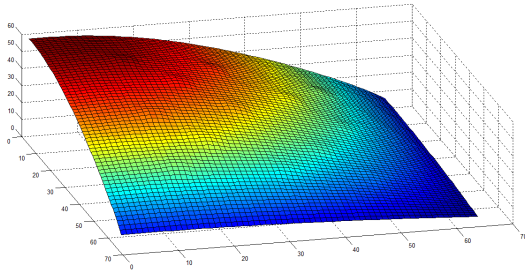
**Figura 5.11.** Fluxos escalares de nêutrons obtidos com o método G, para ordem de quadratura  $S_2$ , ordem de espalhamento  $P_1$ , condição de Dirichlet forte e malha de 16x16 partições.



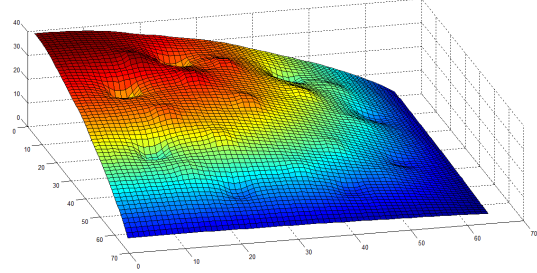
(a) fluxo escalar para  $g=1$ .



(b) fluxo escalar para  $g=2$ .

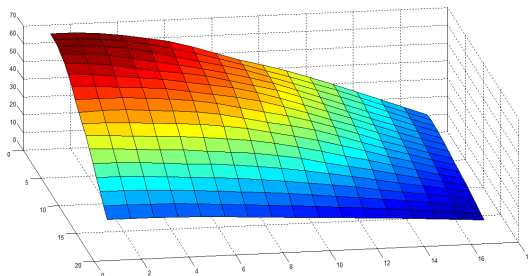


(c) fluxo escalar para  $g=3$ .

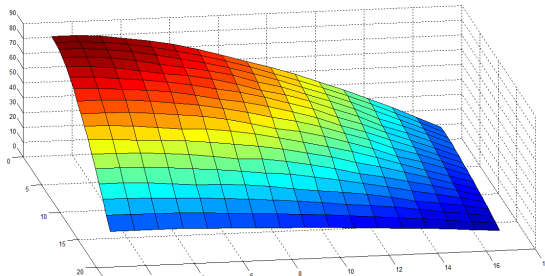


(d) fluxo escalar para  $g=4$ .

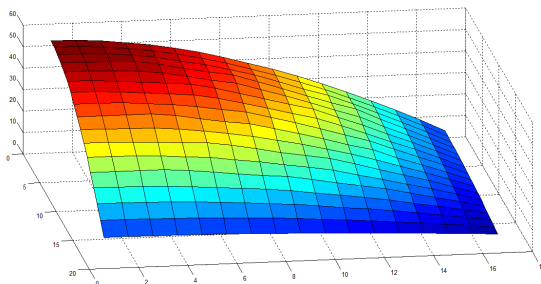
**Figura 5.12.** Fluxos escalares de nêutrons obtidos com o método G, para ordem de quadratura  $S_4$ , ordem de espalhamento  $P_1$ , condição de Dirichlet forte e malha de  $64 \times 64$  partições.



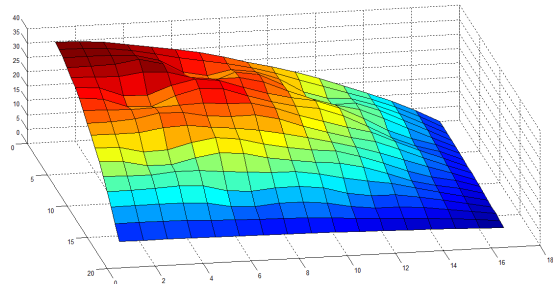
(a) fluxo escalar para  $g=1$ .



(b) fluxo escalar para  $g=2$ .

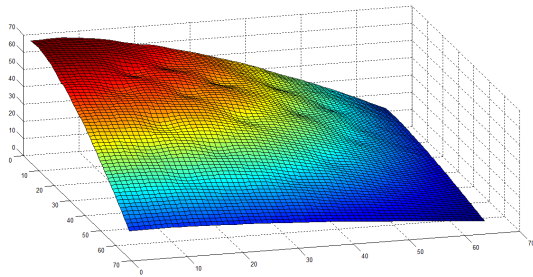


(c) fluxo escalar para  $g=3$ .

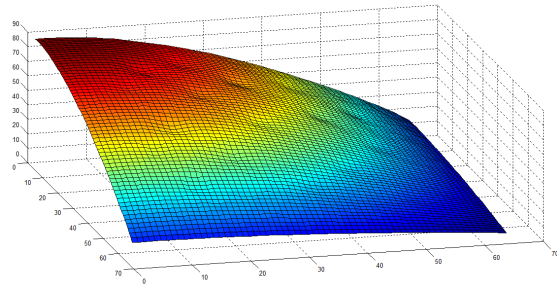


(d) fluxo escalar para  $g=4$ .

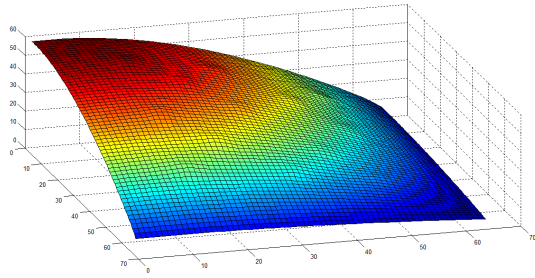
**Figura 5.13.** Fluxos escalares de nêutrons obtidos com o método LS(2007), para ordem de quadratura  $S_2$ , ordem de espalhamento  $P_1$ , condição de Dirichlet forte e malha de  $16 \times 16$  partições.



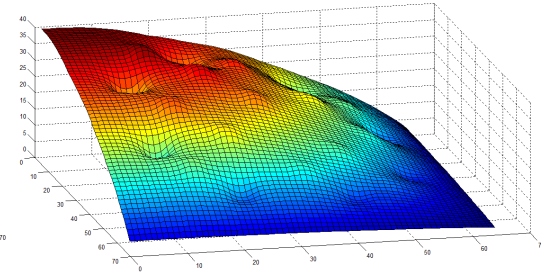
(a) fluxo escalar para  $g=1$ .



(b) fluxo escalar para  $g=2$

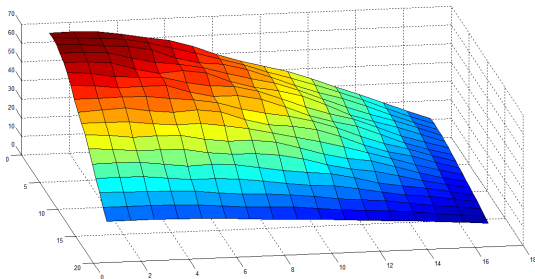


(c) fluxo escalar para  $g=3$ .

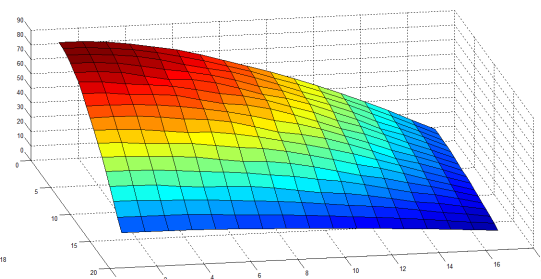


(d) fluxo escalar para  $g=4$ .

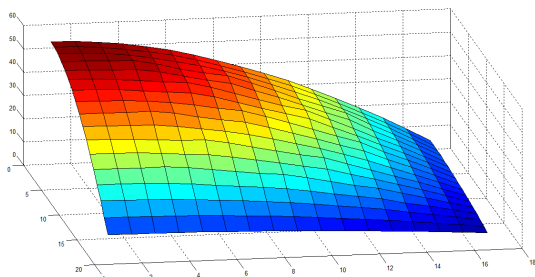
**Figura 5.14.** Fluxos escalares de nêutrons obtidos com o método LS(2007), para ordem de quadratura  $S_4$ , ordem de espalhamento  $P_1$ , condição de Dirichlet forte e malha de  $64 \times 64$  partições.



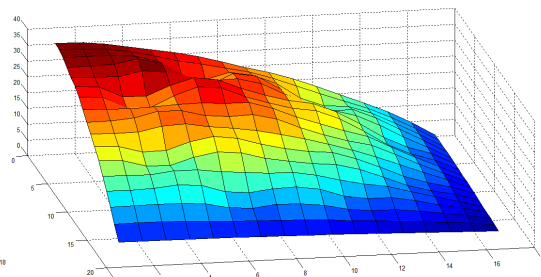
(a) fluxo escalar para  $g=1$ .



(b) fluxo escalar para  $g=2$

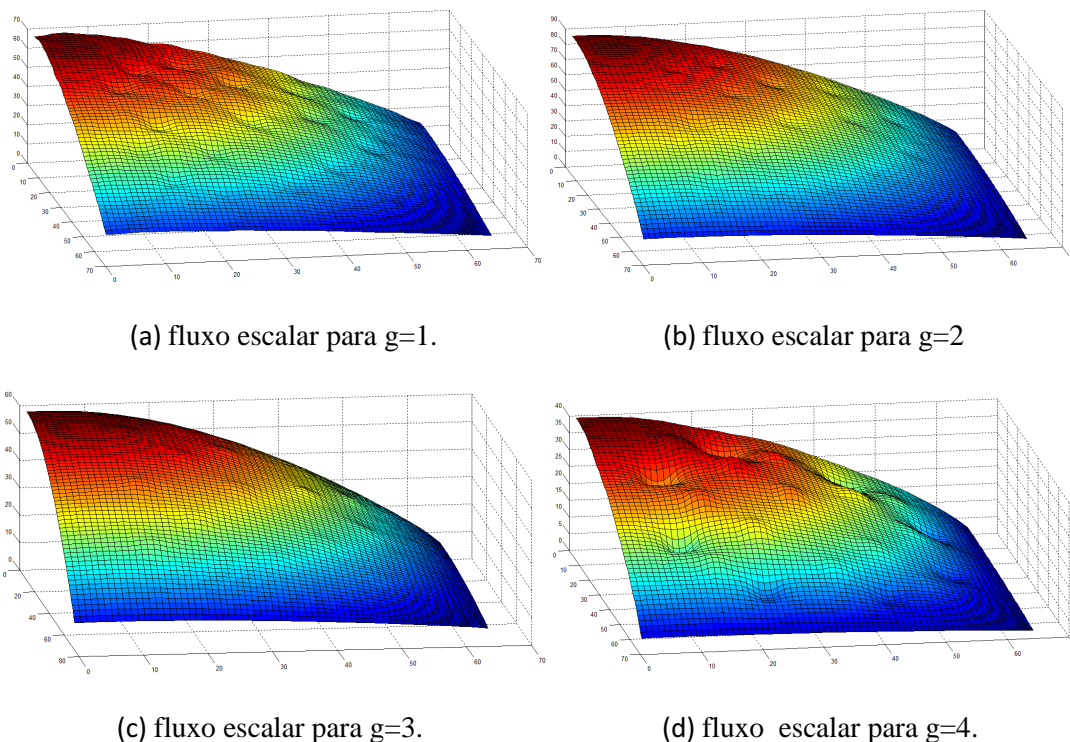


(c) fluxo escalar para  $g=3$ .



(d) fluxo escalar para  $g=4$ .

**Figura 5.15.** Fluxos escalares de nêutrons obtidos com o método GpLS, para ordem de quadratura  $S_2$ , ordem de espalhamento  $P_1$ , condição de Dirichlet forte e malha de  $16 \times 16$  partições.



**Figura 5.16.** Fluxos escalares de nêutrons obtidos com o método GpLS, para ordem de quadratura  $S_4$ , ordem de espalhamento  $P_1$ , condição de Dirichlet forte e malha de  $64 \times 64$  partições.

As oscilações espúrias inerentes ao método G podem ser facilmente visualizadas na Figura 5.11. A eliminação dessas oscilações através do refinamento da malha, conforme mencionamos na introdução, também pode ser visualizadas na Figura 5.12. A capacidade que os métodos LS(2007) e GpLS possuem de eliminar oscilações espúrias para malhas grossas, é demonstrada nos seus respectivos gráficos contidos nas Figuras 5.13 e 5.15. Os gráficos apresentados nas Figuras 5.12, 5.14 e 5.16 demonstram a consistência da taxa de convergência com o refinamento da malha, dos três métodos em questão.

A norma utilizada para calculo dos erros relativos apresentados a seguir, é a norma máxima discreta.

**Tabela 5.31** Erros relativos obtidos usando como referência os fluxos escalares obtidos com o método LS(S<sub>2</sub> e S<sub>4</sub>) com condição de contorno de Dirichlet forte e com fonte real, para a malha 16x16 e uma tolerância de 0,1%.

| Grupos de Energia= 4   Ordem de espalhamento = P <sub>1</sub>   (Tolerância = 0,1%)                                    |  |      |      |      |
|--|--|------|------|------|
| Erro%=100 × $\left( \max \left  \frac{\phi_{LS(2007)}^{Np,0} - \phi_X^{Np,0}}{\phi_{LS(2007)}^{Np,0}} \right  \right)$ |  |      |      |      |
| Método c/ cond.<br>De Dirichlet forte  | Erro Relativo % por grupo de energia (g) |      |      |      |
|  | g=1                                      | g=2  | g=3  | g=4  |
| G(s <sub>2</sub> )   | 18,39                                    | 5,52 | 2,46 | 6,06 |
| G(s <sub>4</sub> )   | 3,66                                     | 2,87 | 3,85 | 6,03 |
| GpLS(s <sub>2</sub> )  | 2,95                                     | 1,00 | 0,93 | 1,69 |
| GpLS(s <sub>4</sub> )  | 1,54                                     | 1,13 | 1,40 | 1,62 |

**Tabela 5.32** Erros relativos obtidos usando como referência os fluxos escalares obtidos com o método LS(S<sub>2</sub> e S<sub>4</sub>) com condição de contorno de Dirichlet forte e com fonte real, para a malha 64x64 e uma tolerância de 0,1%.

| Grupos de Energia= 4   Ordem de espalhamento = P <sub>1</sub>   (Tolerância = 0,1%)                                    |  |      |      |      |
|--|--|------|------|------|
| Erro%=100 × $\left( \max \left  \frac{\phi_{LS(2007)}^{Np,3} - \phi_X^{Np,3}}{\phi_{LS(2007)}^{Np,3}} \right  \right)$ |  |      |      |      |
| Método c/ cond.<br>De Dirichlet forte  | Erro Relativo % por grupo de energia (g) |      |      |      |
|  | g=1                                      | g=2  | g=3  | g=4  |
| G(s <sub>2</sub> )   | 14,25                                    | 6,93 | 1,98 | 3,15 |
| G(s <sub>4</sub> )   | 3,71                                     | 1,02 | 0,78 | 2,60 |
| GpLS(s <sub>2</sub> )  | 7,72                                     | 3,95 | 1,12 | 1,93 |
| GpLS(s <sub>4</sub> )  | 2,41                                     | 0,60 | 0,40 | 1,05 |

**Tabela 5.32** Erros relativos obtidos usando como referência os fluxos escalares obtidos com o método LS(S<sub>2</sub> e S<sub>4</sub>) com condição de contorno de Dirichlet fraca e com fonte real para a malha 16x16 e uma tolerância de 0,1%.

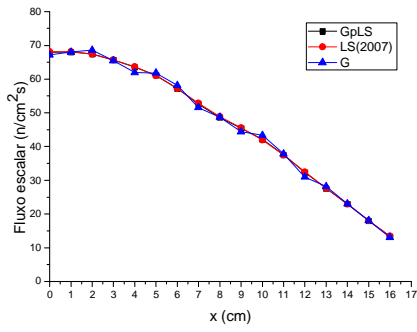
| Grupos de Energia= 4   Ordem de espalhamento = P <sub>1</sub>   (Tolerância = 0,1%)                                    |  |      |      |       |
|--|--|------|------|-------|
| Erro%=100 × $\left( \max \left  \frac{\phi_{LS(2007)}^{Np,0} - \phi_X^{Np,0}}{\phi_{LS(2007)}^{Np,0}} \right  \right)$ |  |      |      |       |
| Método c/ cond.<br>De Dirichlet fraca  | Erro Relativo % por grupo de energia (g) |      |      |       |
|  | g=1                                      | g=2  | g=3  | g=4   |
| G(s <sub>2</sub> )   | 17,72                                    | 5,54 | 2,47 | 5,89  |
| G(s <sub>4</sub> )   | 3,61                                     | 2,10 | 2,79 | 5,17  |
| GpLS(s <sub>2</sub> )  | 2,98                                     | 1,07 | 2,17 | 9,80  |
| GpLS(s <sub>4</sub> )  | 1,49                                     | 1,99 | 5,94 | 15,84 |

**Tabela 5.34** Erros relativos obtidos usando como referência os fluxos escalares obtidos com o método LS(S<sub>2</sub> e S<sub>4</sub>) com condição de contorno de Dirichlet fraca e com fonte real, para a malha 64x64 e uma tolerância de 0,1%.

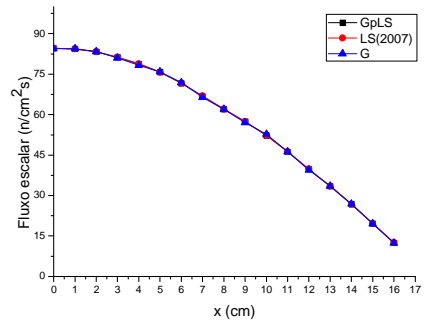
| Grupos de Energia= 4   Ordem de espalhamento = P <sub>1</sub>   (Tolerância = 0,1%)                                    |  |      |      |      |
|--|--|------|------|------|
| Erro%=100 × $\left( \max \left  \frac{\phi_{LS(2007)}^{Np,3} - \phi_X^{Np,3}}{\phi_{LS(2007)}^{Np,3}} \right  \right)$ |  |      |      |      |
| Método c/ cond.<br>De Dirichlet fraca  | Erro Relativo % por grupo de energia (g) |      |      |      |
|  | g=1                                      | g=2  | g=3  | g=4  |
| G(s <sub>2</sub> )   | 13,60                                    | 6,30 | 1,68 | 3,11 |
| G(s <sub>4</sub> )   | 3,72                                     | 0,99 | 0,50 | 2,57 |
| GpLS(s <sub>2</sub> )  | 7,80                                     | 3,78 | 1,05 | 1,90 |
| GpLS(s <sub>4</sub> )  | 2,42                                     | 0,57 | 0,25 | 0,99 |

As figuras a seguir correspondem aos gráficos em duas dimensões dos fluxos escalares obtidos pelas formulações de elementos finitos consideradas nesta tese. Como a configuração das condições de contorno aqui considerada, permite que todos os fluxos escalares apresentem comportamentos semelhantes ao longo de toda a malha, temos que a escolha de y=0 com o sendo plano de corte transversal é um escolha arbitrária.

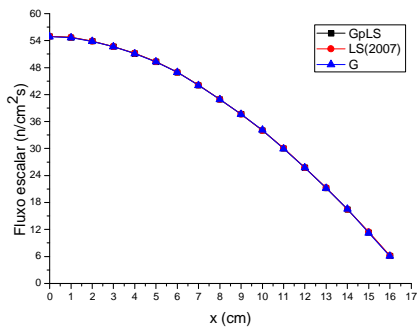
A Figura 5.17 visa demonstrar que mesmo para a malha menos refinada os fluxos escalares de nêutrons obtidos com os métodos G e GpLS estão muito próximos da referência. Temos que os erros relativos apresentam o comportamento esperado, diminuem à medida que aumentamos a ordem de quadratura S<sub>N</sub> e à medida que refinamos a malha, isso é confirmado pelo gráfico do fluxo escalar apresentado na Figura 5.18. Sendo que quando se utiliza a condição de contorno de Dirichlet fraca esses erros se tornam ainda menores do que quando se utiliza a condição de contorno de Dirichlet forte. Os erros relativos obtidos com a fonte fixa de fissão hipotética utilizada na seção 5.1 são análogos ao obtidos com a fonte fixa de fissão real da seção 5.2.



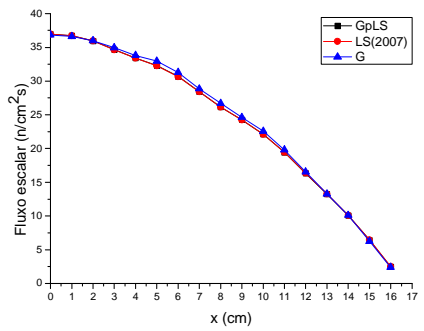
(a)



(b)



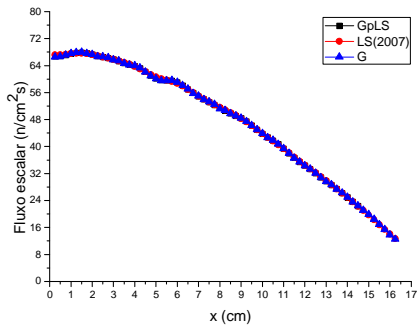
(c)



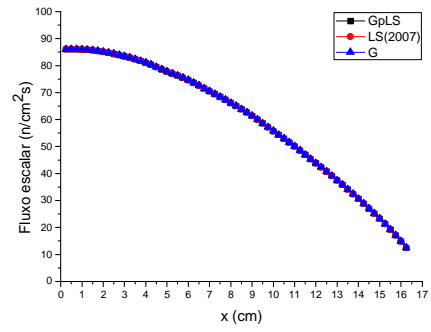
(d)

**Figura 5.17.** Fluxo escalar de nêutrons ao longo do eixo  $y=0$  para ordem de quadratura  $S_2$ , ordem de espalhamento  $P_1$ , condição de Dirichlet forte e malha de  $16 \times 16$  partições quando se utiliza fonte real: (a) fluxo escalar do grupo de energia  $g=1$ ; (b) fluxo escalar do grupo de energia  $g=2$ ; (c) fluxo escalar do grupo de energia  $g=3$ , (d) fluxo escalar do grupo de energia  $g=4$ .

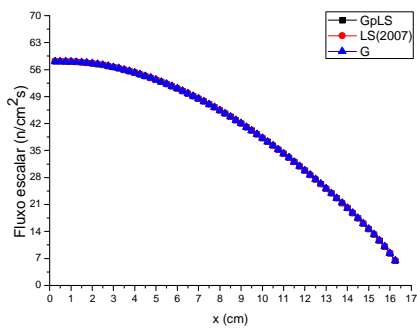




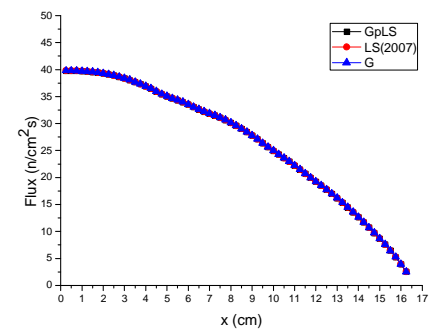
(a)



(b)



(c)



(d)

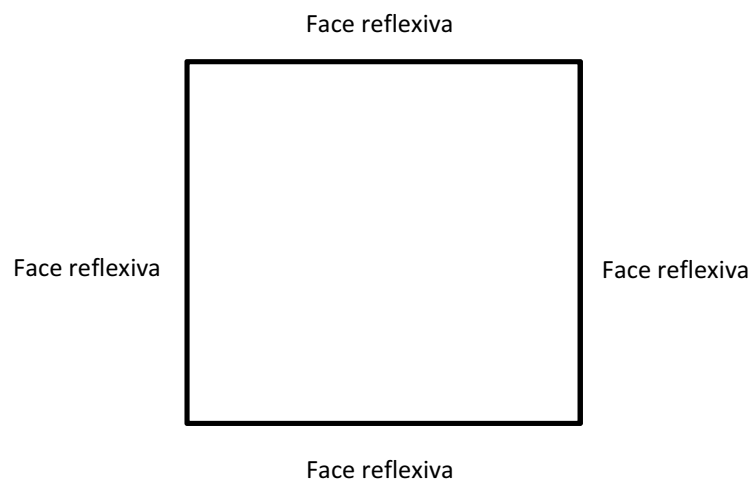
**Figura 5.18.** Fluxo escalar de nêutrons ao longo do eixo  $y=0$  para ordem de quadratura  $S_4$ , ordem de espalhamento  $P_1$ , condição de Dirichlet forte e malha de  $64 \times 64$  partições quando se utiliza fonte real: (a) fluxo escalar do grupo de energia  $g=1$ ; (b) fluxo escalar do grupo de energia  $g=2$ ; (c) fluxo escalar do grupo de energia  $g=3$ , (d) fluxo escalar do grupo de energia  $g=4$ .

### 5.3.2 Comparação das Soluções Obtidas pelas Formulações de Elementos Finitos e pelo Método Diamond Difference.

Com o mesmo objetivo da subseção 5.3.1, vamos comparar os fluxos escalares de nêutrons provenientes da solução do problema de fonte fixa definido na seção 5.2, obtidas pelos três métodos de elementos finitos utilizados ao longo das seções anteriores



com os fluxos escalares obtidos pelo método Diamond Difference (DD) através da resolução do problema de autovalor definido pela equação (2.2) considerando também os parâmetros físicos apresentados nas tabelas contidas no Apêndice A. Entretanto, nesta subseção a configuração das condições de contorno é diferente da configuração apresentada nas seções 5.1 e 5.2, aqui consideramos todas as faces reflexivas, conforme mostra a Figura 5.13.



**Figura 5.13** Condição de contorno com todas as faces reflexivas.

Para obtermos os erros relativos entre as formulações acima citadas, consideramos a norma máxima discreta e utilizamos como referência os fluxos escalares médios (a nível do elemento) normalizados do método DD obtidos com a condição de Dirichlet forte. Os fluxos escalares médios (a nível do elemento) normalizados dos métodos de elementos finitos foram calculados a partir da integração de Gauss para superfícies de acordo com o algoritmo contido no Apêndice B. Os resultados apresentados a seguir mostram o comportamento da acurácia das formulações GpLS, G, e LS(20074) para as malhas de 16x16 e 64x64 partições e ordem de quadratura  $S_2$  e  $S_4$ . A seguir apresentaremos os resultados obtidos.

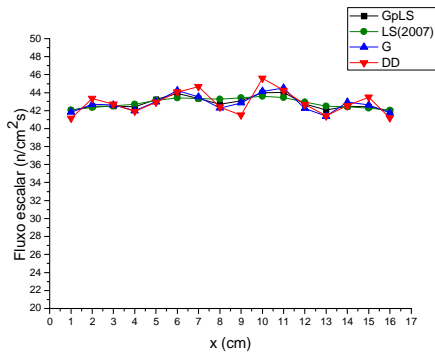
**Tabela 5.35** Erros relativos obtidos usando como referência os fluxos escalares obtidos com o método DD( $S_2$  e  $S_4$ ) com condição de contorno de Dirichlet forte e com fonte real, para a malha 16x16 e uma tolerância de 0,1%.

| Grupos de Energia= 4   Ordem de espalhamento = $P_1$   (Tolerância = 0,1%)                                 |  |      |       |       |
|--|--|------|-------|-------|
| Erro%=100 × $\left( \max \left  \frac{\phi_{DD}^{Np-0} - \phi_X^{Np-0}}{\phi_{DD}^{Np-0}} \right  \right)$ |  |      |       |       |
| Método c/ cond. De Dirichlet forte   | Erro Relativo % por grupo de energia (g) |      |       |       |
|  | g=1                                      | g=2  | g=3   | g=4   |
| LS(2007)( $s_2$ )  | 9,88                                     | 3,60 | 1,19  | 13,87 |
| LS(2007)( $s_4$ )  | 4,49                                     | 5,58 | 10,16 | 18,00 |
| G( $s_2$ )   | 6,72                                     | 2,30 | 0,77  | 10,95 |
| G( $s_4$ )   | 3,06                                     | 5,55 | 10,31 | 15,64 |
| GpLS( $s_2$ )  | 8,31                                     | 3,20 | 1,02  | 13,07 |
| GpLS( $s_4$ )  | 3,88                                     | 5,59 | 10,19 | 17,66 |

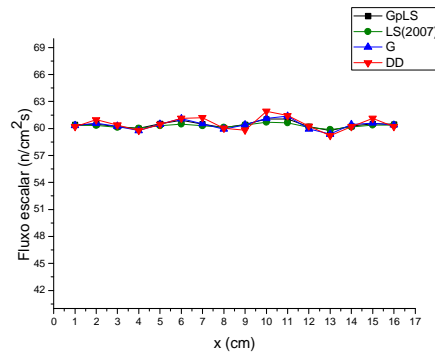
**Tabela 5.36** Erros relativos obtidos usando como referência os fluxos escalares obtidos com o método DD( $S_2$  e  $S_4$ ) com condição de contorno de Dirichlet forte e com fonte real, para a malha 64x64 e uma tolerância de 0,1%.

| Grupos de Energia= 4   Ordem de espalhamento = $P_1$   (Tolerância = 0,1%)                                 |  |      |       |       |
|--|--|------|-------|-------|
| Erro%=100 × $\left( \max \left  \frac{\phi_{DD}^{Np-3} - \phi_X^{Np-3}}{\phi_{DD}^{Np-3}} \right  \right)$ |  |      |       |       |
| Método c/ cond. De Dirichlet forte   | Erro Relativo % por grupo de energia (g) |      |       |       |
|  | g=1                                      | g=2  | g=3   | g=4   |
| LS(2007)( $s_2$ )  | 8,49                                     | 2,91 | 0,96  | 12,47 |
| LS(2007)( $s_4$ )  | 4,03                                     | 6,21 | 10,98 | 18,05 |
| G( $s_2$ )   | 2,34                                     | 1,36 | 0,72  | 10,43 |
| G( $s_4$ )   | 3,14                                     | 6,15 | 11,04 | 17,35 |
| GpLS( $s_2$ )  | 3,55                                     | 1,69 | 0,77  | 11,10 |
| GpLS( $s_4$ )  | 3,01                                     | 6,17 | 11,02 | 17,71 |

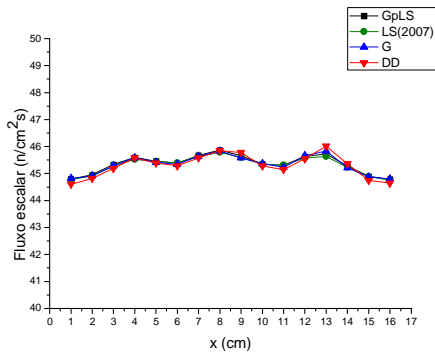
As figuras a seguir correspondem ao gráfico em duas dimensões dos fluxos escalares obtidos pelas formulações de elementos finitos consideradas nesta tese e pelo método DD. Aqui, diferente do que foi feito na subseção anterior, fizemos um corte transversal em  $y=8$ , com o objetivo de evidenciarmos as variações mais bruscas sofridas pelos fluxos escalares de cada grupo de energia, devido à influência das regiões de buraco d'água e veneno queimável. Pois temos que quando consideramos as quatro faces reflexivas, os fluxos escalares apresentam variações muito suaves no contorno  $y=0$ .



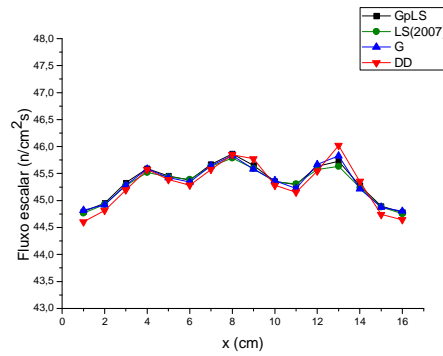
(a)



(b)

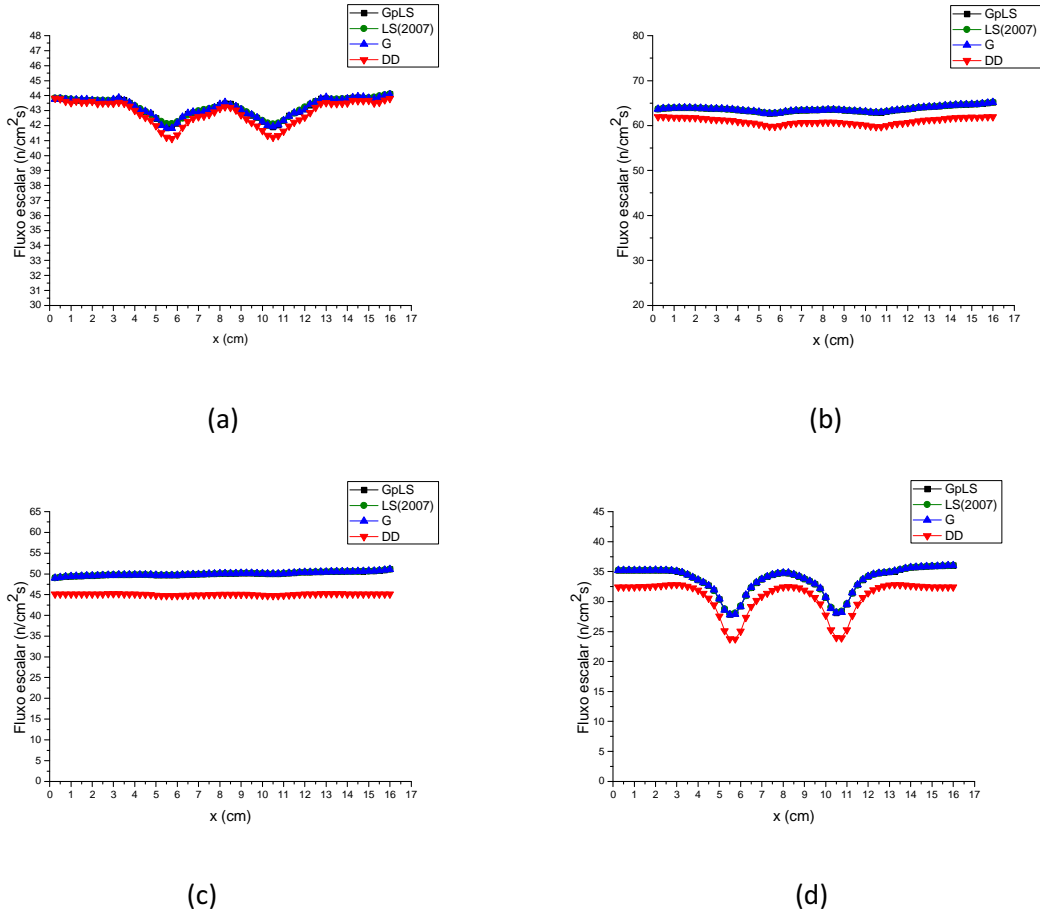


(c)



(d)

**Figura 5.13.** Fluxo escalar de nêutrons ao longo do eixo  $y=8$  para ordem de quadratura  $S_2$ , ordem de espalhamento  $P_1$ , condição de Dirichlet forte e malha de  $16 \times 16$  partições quando se utiliza fonte real: (a) fluxo escalar do grupo de energia  $g=1$ ; (b) fluxo escalar do grupo de energia  $g=2$ ; (c) fluxo escalar do grupo de energia  $g=3$ , (d) fluxo escalar do grupo de energia  $g=4$ .



**Figura 5.14.** Fluxo escalar de nêutrons ao longo do eixo  $y=8$  para ordem de quadratura  $S_4$ , ordem de espalhamento  $P_1$ , condição de Dirichilet forte e malha de  $64 \times 64$  partições quando se utiliza fonte real: (a) fluxo escalar do grupo de energia  $g=1$ ; (b) fluxo escalar do grupo de energia  $g=2$ ; (c) fluxo escalar do grupo de energia  $g=3$ , (d) fluxo escalar do grupo de energia  $g=4$ .

Aqui todos os MEFs considerados apresentam desvios significativos com relação às soluções obtidas com o método DD em todos os casos analisados. Contudo o MEF que mais se aproxima do método DD é o método G. O que é justificável devido ao fato de que em geral, o método de Galerkin é equivalente ao método de diferenças finitas quando os parâmetros que definem a EDP a ser resolvida são contínuos em todo o domínio espacial (malha). Os métodos LS(2007) e GpLS são os que mais se distanciam do método DD. O que é natural, dado que as soluções obtidas com o método GpLS são muito próximas das soluções obtidas com o método LS(2007).

## 6 CONCLUSÕES E SUGESTÕES FUTURAS

### 6.1 Conclusões

As análises do número de iterações internas revelam que o método GpLS apresenta uma performance iterativa que se equipara ao métodos LS(2007) e G para a condição de Dirichilt forte, mas que para a condição de Dirichilet fraca, pode em alguns casos até mesmo superar esses mesmos métodos.

A interpretação dos resultados obtidos nas subseções que tratam da análise de convergência juntamente com a estimativa de erro desenvolvida na subseção 4.5.3 demonstra que as propriedades de aproximação do método GpLS são superiores aos métodos LS(2007) e G. Tais resultados corroboram com os fundamento teóricos apresentados nas referências [2] e [22].

A análise dos resultados obtidos nas subseções em que comparamos as soluções obtidas com a condição de Dirichilet fraca com e sem o pós-processamento, comprovam que dentre os MEFs utilizados nesta tese, o que apresenta melhor estabilidade quando se utiliza a condição de contorno de Dirichilet fraca é o método GpLS.

Podemos concluir a partir dos resultados obtidos nos experimento numéricos realizados nas seções 5.1 e 5.2 que o método GpLS desenvolvido neste tese, mesmo sendo um método GLS parcial, possui as mesmas propriedades do método GLS completo.

Os resultados acima citados juntamente com os resultados obtidos ao logo da seção 5.3 nos permitem concluir que o método GpLS é uma excelente alternativa para

construção de esquemas que podem ser aplicados as iterações internas utilizadas na solução numérica da equação de transporte de nêutrons, pois:

- Apresenta boas taxas de convergência. O que é comprovado pela sua desempenho iterativo que se equipara ao desempenho dos métodos LS(2007) e G;
- Apresenta uma boa precisão, sendo mais preciso que os método G e LS(2007). O que comprovado pelo comportamento da sua taxa de convergência diante do refinamento da malha.

Além disso, o método GpLS possui uma estabilidade maior que a apresentada pelos métodos G e LS(2007).

## **6.2 Sugestões Para Trabalhos Futuros**

Com o intuito de prosseguir com a aplicação do MEF na área de engenharia nuclear, sugerem-se as seguintes aplicações para futuras publicações, dissertações e teses:

- (1) Desenvolver uma estratégia iterativa baseada no método GpLS que leve em consideração a iteração externa utilizada na solução numérica da equação de transporte de nêutrons para o mesmo caso particular de sistemas de Friedrich analisado nesta tese;
- (2) Resolver a equação de transporte de nêutrons para o mesmo caso particular de sistemas de Friedrich analisado nesta tese, a partir da implementação do método GLS completo, de acordo com a formulação apresentada em [22];

(3) Analisar a estabilidade da solução da equação de transporte de nêutrons como um caso particular de sistemas de Friedrich, a partir da implementação do método GLS parcial e/ou completo, juntamente com operadores de captura, como apresentado na referência [36].

## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] Bell G.I. and Glasstone S., **Nuclear Reactor Theory**, Van Nostrand Rienhold, New York, 1970.
- [2] Claes Johnson, **Numerical Solution of Partial Differential Equation by the Finite Element Method**, Cambridge University Press, New York ,1990.
- [3] Lewis E.E. and Miller, W.F. Jr., **Computational Methods of Neutron Transport**, Jhon Wiley & Sons, New York, 1985.
- [4] Reed, W., Hill, T., 1973. **Triangular Mesh Methods for the Neutron Transport Equation**. technical Report la-ur-73-479, Los Alamos Scientific Laboratory.
- [5] Reed, W.H., Hill, T.R., Brinkley, F.W., Lathrop, K.D., 1973. **TRIPLET: A Two Dimensional, Multigroup, Triangular Mesh, Planar Geometry**, Explicit Transport Code. Technical Report LA-5428-MS, Los Alamos National Laboratory.
- [6] Reed, W.H., Hill, T.R., Brinkley, F.W., Lathrop K.D., 1977. **TRIDENT: A Two Dimensional Multigroup, Triangular Mesh, Explicit Neutron Transport Code**. Technical Report LA-6735-MS, Los Alamos National Laboratory.
- [7] Seed, T.J., Miller, W.F., Brinkley, F.W., 1977. **TRIDENT: A Two-dimensional, Multigroup Triangular Discrete Ordinates, Explicit Neutron Transport Code**. Technical Report LA-5428-M, Los Alamos Laboratory.
- [8] Seed, J., Miller, W.F., Bosler, G.E., 1978. **TRIDENT: a new triangular mesh discrete ordinates code**. In: Topical Meeting on Advances in Reactor Physics, Gatlinburg, TN (April 9–12).



- [9] Wareing, T.A., McGhee, J.J., Morel, J.E., 1996. **ATTILA: A three-dimensional unstructured tetrahedral mesh discrete ordinates transport code**. In: American Nuclear Society Annual Winter Meeting, vol. 75, ANS, Washington, DC, p. 146.
- [10] Hong, Z., Yuan, G., Fu, X., 2010. **Oscillation of numerical solution for time-dependent particle transport equations**. Prog. Nucl. Energy 52, 315–320.
- [11] Bailey, T.S., Adams, M.L., Chang, J.H., 2009. **A piecewise linear discontinuous finite element spatial discretization of the transport equation in 2D cylindrical geometry**. In: International Conference on Advances in Mathematics, Computational Methods, and Reactor Physics, 3–7 May, 2009. Saratoga springs, NY, United States.
- [12] Eichholz, J. A., 2011. **Discontinuous Galerkin methods for the radiative transfer equation and its approximations**, Doctoral Dissertation, University of Iowa.
- [13] Manteuffel, T.A., Ressel, K.J., 1998. **Least-squares finite-element solution of the neutron transport equation in diffusive regimes**. Siam. J. Numer. Anal. 35, 806.
- [14] Manteuffel, T.A., Ressel, K.J., Starke, G., 2000. **A boundary functional for the least-squares finite-element solution of neutron transport problems**. Siam. J. Numer. Anal. 37, 556.
- [15] Barros, R.C., 1997. **On the equivalence of discontinuous finite element methods and discrete ordinates methods for the angular discretization of the linearized boltzmann equation in slab geometry**. Ann. Nucl. Energ. 24, 1013.
- [16] Pain C.C., Eaton M.D., Smedley-Stevenson R.P., Goddard A.J.H., Piggott M.D., C.R.E. de Oliveira, **Streamline upwind Petrov–Galerkin methods for the steady-state Boltzmann transport equation**, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 195 (2006) 4448–4472.

- [17] Codina R., **A discontinuity-capturing crosswind-dissipation for the finite element solution of the convection–diffusion equation**, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 110 (1993) 325.
- [18] Brooks A.N., Hughes T.J.R., **Streamline upwind/Petrov–Galerkin formulations for convection dominated flows with particular emphasis on the incompressible Navier–Stokes equations**, *Comput. Methods Appl. Mech. Engrg.* 32 (1982) 199.
- [19] Donea J., Huerta A., **Finite Element Methods for Fluid Flow**, John Wiley, Chichester, UK, 2003.
- [20] Hai-tao Ju, Hong-chun Wu, Dong Yao, Chun-yu Xian, **Least-squares finite-element SN method for solving three-dimensional transport equation**, *Annals of Nuclear Energy* 34 (2007) 527–532.
- [21] Merton S.R., Pain C.C., Smedley-Stevenson R.P., Buchan A.G., Eaton M.D., **Optimal discontinuous finite element methods for the Boltzmann transport equation with arbitrary discretisation in angle**, *Annals of Nuclear Energy* 35 (2008) 1741–1759.
- [22] Alexandre Ern, Jean-Luc Guermond, **Theory and Practice of Finite Elements**, Springer, New York, 2004.
- [23] Nitsche, J. **Über ein Variationsprinzip zur Lösung von Dirichlet Problem bei Verwendung von Teilräumen, die Keinen Randbedingungen unterworfen sind**. *Abh. Math. Sem. Univ. Hamburg* 36 (1971)9-15.
- [24] Abreu, M. M. P., **Solução Numérica do Problema de Transporte de Neutrons Independente do tempo na Formulação de Ordenadas Discretas**, Programa de Engenharia Nuclear COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, Brasil, 1994. (PEN 143).

- [25] Premuda F., Spiga G. and Vestrucci P., **The Galerkin – Petrov Method in Accelerating Convergence of Transport Calculations and in Providing Improved Diffusion Approximation**, Ann. nucL Energy, Vol. 9, pp. 11 to 20,( 1982).
- [26] Nicolas Martin, Alain Hébert, **A three-dimensional SN high-order diamond differencing discretization with a consistent acceleration scheme**, Annals of Nuclear Energy 36 (2009) 1787–1796.
- [27] Alves Filho, H., Da Silva, F. C., Barros, R.C., **A Coarse-mesh Method for One-speed Neutron Transport Eigenvalue Problems in Two-dimensional Cartesian Geometry**, Applied Numerical Mathematics 40, 167-177 (2002).
- [28] Barros, R.C., Alves Filho, H., Oliveira, F.B.S., **Advances in Spectral Nodal Methods Applied to  $S_n$  Nuclear Reactor Global Calculations in Cartesian Geometry**, Congresso Internacional Conjunto Cancún, México (2004).
- [29] Van Criekingen S., **A 2-D/3-D cartesian geometry non-conforming spherical harmonic neutron transport solver**, Annals of Nuclear Energy 34,177–187(2007).
- [30] Subramanian C., Van Criekingen S., Heuveline V., Nataf F., Havé P., **The Davidson method as an alternative to power iterations for criticality calculations**, Annals of Nuclear Energy 38, 2818–2823(2011).
- [31] Vyacheslav G. Zimin e Hisashi Ninokota , **Acceleration of the outer Iteration of the space-dependent neutron kinetics equations solutions**, Annals of Nuclear Energy Vol.23, No. 17, 1407–1424(1996).
- [32] Ziver A.K., Shahdatullah M.S., Eaton M.D., C.R.E. de Oliveira, Umpleby A.P., Pain C.C., Goddard A.J.H., **Finite element spherical harmonics (PN) solutions of the**

**three-dimensional Takeda benchmark problems**, Annals of Nuclear Energy 32, 925–948(2005).

[33] Sharma A., **Spherical harmonics moments of neutron angular flux for spherically symmetric systems**, Annals of Nuclear Energy 28, 715±721(2001).

[34] Adams R.A., **Sobolev Spaces**, Academic Press, INC(1975).

[35] Nieto, M. M., Haynes, A. C., Wilson, W. B., Teeter, C. M., and Stambro, W. D. , **Detection of Antineutrino for Nonproliferation**, Nuc. Scien. And Eng., 149, 270-276 (2005).

[36] Dutra do Carmo E. G., Alvarez G. B., **A new stabilized finite element formulation for scalar convection – diffusion problems: the streamline and approximate upwind/ Petrov-Galerkin method**, Comput. Methods Appl. Mech. Engrg. 192(2003) 3379 – 3396.

## Apêndices

### A. Parâmetros Nucleares

Esse apêndice contém os parâmetros nucleares utilizados ao longo do capítulo 5. Tais parâmetros consistem das seções de choque macroscópicas a quatro de energia, as quais definem fisicamente as regiões de combustível, buraco d'água e veneno queimável apresentadas na Figura 5.1.

A seguir apresentaremos os parâmetros nucleares correspondentes à região de combustível (urânio).

**Tabela A.1** Seção de choque macroscópica total para a região de combustível ( $\text{cm}^{-1}$ ).

| $\Sigma_{t1}^C$ | $\Sigma_{t2}^C$ | $\Sigma_{t3}^C$ | $\Sigma_{t4}^C$ |
|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| 0.23763E+00     | 0.54615E+00     | 0.91727E+00     | 0.11881E+01     |

**Tabela A.2** Seção de choque macroscópica de espalhamento de coeficiente  $l = 0$  para a região de combustível ( $\text{cm}^{-1}$ ).

| $\Sigma_{s0}^{C,g' \rightarrow g}$ | $g' = 1$    | $g' = 2$    | $g' = 3$    | $g' = 4$    |
|------------------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| $g = 1$                            | 0.16685E+00 | 0.00000E+00 | 0.00000E+00 | 0.00000E+00 |
| $g = 2$                            | 0.66753E-01 | 0.48427E+00 | 0.00000E+00 | 0.00000E+00 |
| $g = 3$                            | 0.29536E-03 | 0.59199E-01 | 0.83589E+00 | 0.00000E+00 |
| $g = 4$                            | 0.98012E-07 | 0.19310E-04 | 0.60048E-01 | 0.11050E+01 |

**Tabela A.3** Seção de choque macroscópica de espalhamento de coeficiente  $l = 1$  para a região de combustível ( $\text{cm}^{-1}$ ).

| $\Sigma_{s1}^{C,g' \rightarrow g}$ | $g' = 1$    | $g' = 2$    | $g' = 3$    | $g' = 4$    |
|------------------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| $g = 1$                            | 0.66240E-01 | 0.00000E+00 | 0.00000E+00 | 0.00000E+00 |
| $g = 2$                            | 0.21177E-01 | 0.19590E+00 | 0.00000E+00 | 0.00000E+00 |
| $g = 3$                            | 0.12619E-04 | 0.25369E-01 | 0.33477E+00 | 0.00000E+00 |
| $g = 4$                            | 0.77920E-10 | 0.15801E-06 | 0.25576E-01 | 0.00000E+00 |

**Tabela A.6** Número médio de nêutrons liberados por fissão multiplicado pela seção macroscópica de fissão para a região de combustível.

| $\nu\Sigma_{f1}^C$ | $\nu\Sigma_{f2}^C$ | $\nu\Sigma_{f3}^C$ | $\nu\Sigma_{f4}^C$ |
|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|
| 0.23763E+00        | 0.54615E+00        | 0.91727E+00        | 0.11881E+01        |

Agora, apresentamos os parâmetros nucleares correspondentes a região de buraco de água.

**Tabela A.7** Seção de choque macroscópica total para a região de buraco de água (cm<sup>-1</sup>).

| $\Sigma_{t1}^A$ | $\Sigma_{t2}^A$ | $\Sigma_{t3}^A$ | $\Sigma_{t4}^A$ |
|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| 0.21279E+00     | 0.62472E+00     | 0.10122E+01     | 0.16313E+01     |

**Tabela A.8** Seção de choque macroscópica de espalhamento de coeficiente  $l = 0$  para a região de buraco de água (cm<sup>-1</sup>).

| $\Sigma_{s0}^{A,g' \rightarrow g}$ | $g' = 1$    | $g' = 2$    | $g' = 3$    | $g' = 4$    |
|------------------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| $g = 1$                            | 0.13255E+00 | 0.00000E+00 | 0.00000E+00 | 0.00000E+00 |
| $g = 2$                            | 0.79428E-01 | 0.52687E+00 | 0.00000E+00 | 0.00000E+00 |
| $g = 3$                            | 0.47864E-03 | 0.97698E-01 | 0.91496E+00 | 0.00000E+00 |
| $g = 4$                            | 0.16061E-06 | 0.32373E-04 | 0.95073E-01 | 0.16044E+01 |

**Tabela A.9** Seção de choque macroscópica de espalhamento de coeficiente  $l = 1$  para a região de buraco de água (cm<sup>-1</sup>).

| $\Sigma_{s1}^{A,g' \rightarrow g}$ | $g' = 1$    | $g' = 2$    | $g' = 3$    | $g' = 4$    |
|------------------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| $g = 1$                            | 0.27389E-01 | 0.00000E+00 | 0.00000E+00 | 0.00000E+00 |
| $g = 2$                            | 0.10156E-01 | 0.92560E-01 | 0.00000E+00 | 0.00000E+00 |
| $g = 3$                            | 0.60560E-05 | 0.12354E-01 | 0.16182E+00 | 0.00000E+00 |
| $g = 4$                            | 0.37387E-10 | 0.76970E-07 | 0.11894E-01 | 0.00000E+00 |

**Tabela A.12** Número médio de nêutrons liberados por fissão multiplicado pela seção macroscópica de fissão para a região de buraco de água.

| $\nu\Sigma_{f1}^A$ | $\nu\Sigma_{f2}^A$ | $\nu\Sigma_{f3}^A$ | $\nu\Sigma_{f4}^A$ |
|--------------------|--------------------|--------------------|--------------------|
| 0.00000E+00        | 0.00000E+00        | 0.00000E+00        | 0.00000E+00        |

A partir daqui apresentaremos os parâmetros nucleares correspondentes à região de veneno queimável.

**Tabela A.13** Seção de choque macroscópica total para a região de buraco veneno queimável ( $\text{cm}^{-1}$ ).

| $\Sigma_{t1}^V$ | $\Sigma_{t2}^V$ | $\Sigma_{t3}^V$ | $\Sigma_{t4}^V$ |
|-----------------|-----------------|-----------------|-----------------|
| 0.14488E+00     | 0.37706E+00     | 0.63273E+00     | 0.12215E+01     |

**Tabela A.14** Seção de choque macroscópica de espalhamento de coeficiente  $l = 0$  para a região de veneno queimável ( $\text{cm}^{-1}$ ).

| $\Sigma_{s0}^{V,g' \rightarrow g}$ | $g' = 1$    | $g' = 2$    | $g' = 3$    | $g' = 4$    |
|------------------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| $g = 1$                            | 0.10072E+00 | 0.00000E+00 | 0.00000E+00 | 0.00000E+00 |
| $g = 2$                            | 0.43577E-01 | 0.32827E+00 | 0.00000E+00 | 0.00000E+00 |
| $g = 3$                            | 0.24230E-03 | 0.48108E-01 | 0.56223E+00 | 0.00000E+00 |
| $g = 4$                            | 0.80259E-07 | 0.15792E-04 | 0.45505E-01 | 0.88907E+00 |

**Tabela A.15** Seção de choque macroscópica de espalhamento de coeficiente  $l = 1$  para a região de veneno queimável ( $\text{cm}^{-1}$ ).

| $\Sigma_{s1}^{V,g' \rightarrow g}$ | $g' = 1$    | $g' = 2$    | $g' = 3$    | $g' = 4$    |
|------------------------------------|-------------|-------------|-------------|-------------|
| $g = 1$                            | 0.27360E-01 | 0.00000E+00 | 0.00000E+00 | 0.00000E+00 |
| $g = 2$                            | 0.10179E-01 | 0.92017E-01 | 0.00000E+00 | 0.00000E+00 |
| $g = 3$                            | 0.60747E-05 | 0.12162E-01 | 0.16240E+00 | 0.00000E+00 |
| $g = 4$                            | 0.37503E-10 | 0.75780E-07 | 0.11344E-01 | 0.00000E+00 |

**Tabela A.18** Número médio de nêutrons liberados por fissão multiplicado pela seção macroscópica de fissão para a região de veneno queimável.

| $\nu \Sigma_{f1}^V$ | $\nu \Sigma_{f2}^V$ | $\nu \Sigma_{f3}^V$ | $\nu \Sigma_{f4}^V$ |
|---------------------|---------------------|---------------------|---------------------|
| 0.00000E+00         | 0.00000E+00         | 0.00000E+00         | 0.00000E+00         |

Os espectros de fissão apresentados a seguir, são utilizados nas regiões de combustível, buraco de agua e veneno queimável.

**Tabela A.19** Espectro de fissão para todas a regiões.

| $\chi_1$    | $\chi_2$    | $\chi_3$    | $\chi_4$    |
|-------------|-------------|-------------|-------------|
| 0.75382E+00 | 0.24618E+00 | 0.00000E+00 | 0.00000E+00 |



## B. Algoritmo para Integração de Gauss Aplicada à Superfícies

```
(1) Do g=1,G
(2) Do m=1,M
(3) Do isub=1,nsubest
(4) Do ie=1,ntelsub(isub)
    Integral =0
    Call num_glob_do_num_subdomi_0(isub,ie,ie_glob,il_nop)
(5) Do il=1,npelsub(ie_glob)
    Ig=il
    If (npelsub(ie_glob)==4) then
        If(il==3) then
            Ig=4
        End if
        If(il==4) then
            Ig=3
        End if
    End if
    K=il_nop + ig
    Ip=nopssub(k)
(6) Do ip_gauss = 1,4
    Integral = integral +  $\varphi_{g,m}(ip) \times \eta(il, ip\_gauss) \times \frac{Area(ie)}{4}$ 
End do (6)
End do(5)
End do(4)
End do(3)
End do(2)
End do(1)
```

**Algoritmo B.1** – algoritmo para a integração de Gauss a nível do elemento ie.