UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

Método de Aceleração para a Equação do Transporte de Partículas com Anisotropia de Pico Avançado pela Aproximação de Fokker-Planck

por

Renato Aloisio dos Santos Klein

Dissertação submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de

Mestre em Matemática Aplicada

Prof. Dr. Julio Cesar Lombaldo Fernandes
Orientador

Porto Alegre, 30 de maio de 2023

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Klein, Renato Aloisio dos Santos

Método de Aceleração para a Equação do Transporte de Partículas com Anisotropia de Pico Avançado pela Aproximação de Fokker-Planck / Renato Aloisio dos Santos Klein.— Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2025.

109 p.: il.

Dissertação (mestrado)— Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2025.
Orientador: Fernandes, Julio Cesar Lombaldo

Dissertação: Matemática Aplicada: Transporte de Partículas, , , ,

Método de Aceleração para a Equação do Transporte de Partículas com Anisotropia de Pico Avançado pela Aproximação de Fokker-Planck

por

Renato Aloisio dos Santos Klein
Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada do Instituto de Matemática e Estatística da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para a obtenção do grau de

Mestre em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Transporte de Partículas

Orientador: Prof. Dr. Julio Cesar Lombaldo Fernandes

Banca examinadora:

Prof. Dr. Richard Vasques
Ohio State University

Prof. Dr. Pedro Henrique de Almeida Kozen
Universidade Federal do Rio Grande do Sul (UFRGS)

Prof. Dr. Marcelo Schramm
Universidade Federal de Pelotas (UFPel)

Dissertação apresentada e aprovada em
de .

Prof. Dr. Lucas da Silva Oliveira
Coordenador

"Matemática, vista de maneira correta, possui não só a verdade como suprema beleza.".

- Bertrand Russel.

AGRADECIMENTOS

Em primeiro lugar, gostaria de expressar minha profunda gratidão à minha mãe, Claudete, e à minha namorada, Gabriela, pelo apoio incondicional e incentivo durante toda essa jornada. Sua paciência, compreensão e amor foram fundamentais para que eu pudesse superar os desafios e dedicar-me aos estudos. Vocês são minha base e minha inspiração.

Agradeço de coração ao meu orientador, Professor Julio Cesar Lombaldo Fernandes, pela orientação, sabedoria e dedicação ao longo deste mestrado. Sua expertise, disponibilidade e conselhos foram essenciais para o desenvolvimento deste trabalho e para o meu crescimento acadêmico e profissional. Muito obrigado por acreditar em meu potencial e por me guiar com tanta generosidade.

Também gostaria de estender meus agradecimentos a todos os professores do Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada da UFRGS, que contribuíram de forma significativa para minha formação. Suas aulas, discussões e feedbacks enriqueceram minha trajetória e ampliaram meus horizontes. Foi uma honra fazer parte desta comunidade acadêmica tão dedicada e inspiradora.

Por fim, agradeço à CAPES pelo suporte financeiro durante este período. O auxílio concedido foi fundamental para que eu pudesse me dedicar integralmente aos estudos e à pesquisa, sem preocupações adicionais. Este apoio foi crucial para a conclusão bem-sucedida deste mestrado.

A todos que, de alguma forma, contribuíram para esta conquista, o meu muito obrigado.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS . . . . . **viii**

LISTA DE TABELAS . . . . . **ix**

LISTA DE SÍMBOLOS . . . . . **x**

RESUMO . . . . . **xii**

ABSTRACT . . . . . **xiii**

1 INTRODUÇÃO **1**

2 EQUAÇÃO DO TRANSPORTE **6**

2.1 Variáveis do problema 6

2.2 Definições 8

2.3 Derivando a Equação do Transporte 11

2.4 Hipóteses Adicionais: Estado Estacionário, Geometria de Placa e Partículas Monoenergéticas 14

3 RESOLVENDO A EQUAÇÃO DO TRANSPORTE **18**

3.1 Aproximações para a Equação do Transporte 18

3.1.1 Aproximação por Difusão 18

3.1.2 Aproximação por Fokker-Planck 21

3.1.3 Aproximação por Ordenadas Discretas S_N 24

3.2 Resolvendo a Equação do Transporte 26

3.2.1 Iteração de Fonte (SI) 26

3.2.2 Aceleração Sintética (SA) 28

3.2.3 Aceleração Sintética por Fokker-Planck (FPSA) 30

4 DISCRETIZAÇÃO 32

4.1 Discretização Espacial 32

4.2 Discretização Angular 36

4.3 Formulação Matricial e Algoritmos 39

4.3.1 Formulação da Matriz de Vazamento e Absorção 40

4.3.2 Formulação da Matriz de Espalhamento 42

4.3.3 Matrizes Para Aproximação de Fokker-Planck 45

4.3.4 Algoritmos 48

5 RESULTADOS NUMÉRICOS 52

5.1 Seções de Choque de Espalhamento 53

5.1.1 *Screened Rutherford Kernel* (SRK) 53

5.1.2 *Exponential Kernel* (EK) 55

5.1.3 *Henyey-Greenstein Kernel* (HGK) 57

5.2 Formulação do Problema e Simulações 59

5.2.1 Núcleo SRK 59

5.2.2 Núcleo EK 64

5.2.3 Núcleo HGK 68

6 CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS 74

6.1 Conclusão 74

6.2 Trabalhos Futuros 76

LISTA DE FIGURAS

2.1 Representação das variáveis do problema. 7

2.2 Espaço de fase. 9

4.1 Elementos não nulos da matriz $\mathcal{L}$ para $N = 2$ e $K = 3$. 42

4.2 Elementos não nulos da matriz Σ para $N = 2$ e $K = 3$. 44

4.3 Elementos não nulos da matriz D para $N = 2$ e $K = 3$. 44

4.4 Elementos não nulos da matriz M para $N = 2$ e $K = 3$. 44

4.5 Elementos não nulos da matriz M_m para $N = 2$ e $K = 3$. 44

4.6 Elementos não nulos da matriz $S = MM_m\Sigma D$ para $N = 2$ e $K = 3$. 45

4.7 Elementos não nulos da matriz $\mathcal{L}_{FP}$ para $N = 2$ e $K = 3$. 48

4.8 Elementos não nulos da matriz $\mathcal{F}_{FP}$ para $N = 2$ e $K = 3$. 48

5.1 Resultados do núcleo SRK com parâmetro $\eta = 10^{-7}$ para os métodos SI, GMRES, DSA e FPSA. 63

5.2 Resultados do núcleo EK com parâmetro $\delta = 10^{-7}$ para os métodos SI, GMRES, DSA e FPSA. 68

5.3 Resultados do núcleo HGK com parâmetro $g = 0.99$ para os métodos SI, GMRES, DSA e FPSA. 73

LISTA DE TABELAS

5.1 Valores do Núcleo de Rutherford para diferentes valores de η [18]. 55

5.2 Valores do Núcleo Exponencial para diferentes valores de δ [18]. 57

5.3 Valores do Núcleo de Hanyey-Greenstein para diferentes valores de g [18]. . 58

5.4 Iterações e Tempo de execução para diferentes parâmetros do núcleo SRK com $N = 4$. 60

5.5 Iterações e Tempo de execução para diferentes parâmetros do núcleo SRK com $N = 8$. 61

5.6 Iterações e Tempo de execução para diferentes parâmetros do núcleo SRK com $N = 16$. 62

5.7 Iterações e Tempo de execução para diferentes parâmetros do núcleo EK com $N = 4$. 64

5.8 Iterações e Tempo de execução para diferentes parâmetros do núcleo EK com $N = 8$. 65

5.9 Iterações e Tempo de execução para diferentes parâmetros do núcleo EK com $N = 16$. 66

5.10 Iterações e Tempo de execução para diferentes parâmetros do núcleo HGK com $N = 4$. 69

5.11 Iterações e Tempo de execução para diferentes parâmetros do núcleo HGK com $N = 8$. 70

5.12 Iterações e Tempo de execução para diferentes parâmetros do núcleo HGK com $N = 16$. 71

LISTA DE SÍMBOLOS

δ	Parâmetro exponencial.
ℓ	Indice de iteração.
η	Parâmetro de blindagem.
$\hat{i}, \hat{j}, \hat{k}$	Vetores unitários ortogonais.
$\mathcal{N}$	Distribuição de densidade de partículas.
μ	Cosseno do ângulo polar.
μ_n	Raízes do n-ésimo polinômio de Legendre.
∇_n^2	Operador discreto de Laplace.
Ω	Vetor direção de viagem das partículas.
ω	Ângulo azimutal.
ϕ	Fluxo escalar de partículas.
ϕ_l	Momentos do fluxo escalar de partículas.
ψ	Fluxo angular de partículas.
σ_a	Seção de choque de absorção.
σ_s	Seção de choque espalhamento.
σ_t	Seção de choque total.
$\sigma_{s,l}$	Momentos da seção de choque de espalhamento.
θ	Ângulo Polar.
E	Energia cinética das partículas.

g	Parâmetro de anisotropia.
m	Massa.
P_N	Polinômio de Legendre de ordem N.
Q	Fonte.
r	Vetor posição das partículas.
t	Tempo.
w_n	Pesos da quadratura.
x, y, z	Coordenadas no plano cartesiano.
DSA	*Diffusion Synthetic Acceleration.*
EK	*Exponetial Kernel.*
FPSA	*Fokker-Planck Synthetic Acceleration.*
HGK	*Henyey-Greenstein Kernel.*
SA	*Synthetic Acceleration.*
SI	*Source Iteration.*
SRK	*Screened Rutherford Kernel.*

RESUMO

Neste trabalho apresentaremos uma técnica de aceleração para o cálculo da equação do transporte partículas sob condições de pico avançado. Neste caso, assumimos que as partículas tem um livre caminho médio curto e uma seção de choque de espalhamento quase singular na direção frontal. Nestas condições a técnica de iteração de fonte (SI) converge muito lentamente. Introduzimos então um passo adicional dando origem a técnica de aceleração sintética (SA). Está técnica envolve resolver uma segunda equação diferencial que aproxime a equação original porém que possua mais baixa ordem, tal como a equação da difusão (DSA). Porém, para as condições do problema que estamos tratando, tanto SI quanto DSA são lentos. Introduzimos então a técnica de aceleração sintética por Fokker-Planck (FPSA) que é capaz de aproximar momentos de Legendre do fluxo angular com alta ordem, condição que leva a uma grande aceleração de problemas com pico avançado. Demonstramos isto através da solução numérica de um problema de placa homogênea sob condições de pico avançando, comparamos tanto técnicas não-aceleradas quanto a técnica DSA com a técnica FPSA, onde podemos ver com clareza a superioridade da aceleração para problemas de pico avançado através do uso do FPSA.

Palavras-chave: Reatores nucleares. Pico Avançado. Aceleração Sintética. Fokker-Planck.

ABSTRACT

In this work, we present an acceleration technique for solving the particle transport equation under forward-peaked conditions. In this case, we assume that the particles have a short mean free path and an almost singular scattering cross-section in the forward direction. Under these conditions, the source iteration (SI) technique converges very slowly. We then introduce an additional step, giving rise to the synthetic acceleration (SA) technique. This technique involves solving a secondary differential equation that approximates the original equation but with a lower order, such as the diffusion equation (DSA). However, for the conditions of the problem we are dealing with, both SI and DSA are slow. We then introduce the Fokker-Planck synthetic acceleration (FPSA) technique, which is capable of approximating the Legendre moments of the angular flux with high order, a condition that leads to a significant acceleration of forward-peaked problems. We demonstrate this through the numerical solution of a homogeneous slab problem under forward-peaked conditions, comparing both non-accelerated techniques and the DSA technique with the FPSA technique, where we can clearly see the superiority of the acceleration for forward-peaked problems using FPSA.

Keywords: Nuclear reactors. Forward-Peak. Synthetic Acceleration. Fokker-Planck.

1 INTRODUÇÃO

No final do século XIX, cientistas como Henri Becquerel, Marie Curie e Pierre Curie fizeram descobertas revolucionárias ao identificar o fenômeno da radioatividade, o que permitiu uma nova compreensão do comportamento de certos elementos e abriu caminho para suas possíveis aplicações tanto científicas quanto tecnológicas. Essas descobertas formaram a base para a física nuclear moderna.

Em 1905, Albert Einstein publicou sua famosa equação, $E = mc^2$, que revolucionou a física ao demonstrar a equivalência entre massa e energia. Essa descoberta foi fundamental para os avanços subsequentes em física nuclear, fornecendo a base teórica para entender como pequenas quantidades de matéria poderiam ser convertidas em enormes quantidades de energia.

No início do século XX, o desenvolvimento da mecânica quântica e os modelos atômicos, como o de Niels Bohr, foram essenciais para descrever e prever o comportamento das partículas subatômicas dentro do núcleo atômico. Esses avanços teóricos deram origem a uma nova forma de compreender as interações nucleares, permitindo uma análise mais profunda da estrutura e dos processos nucleares.

A descoberta da fissão nuclear, realizada em 1938 pelos físicos Otto Hahn, Fritz Strassmann e pela física Lise Meitner, teve um impacto monumental, pois demonstrou que era possível dividir o núcleo de um átomo, liberando grandes quantidades de energia. Essa descoberta levou diretamente ao desenvolvimento de armas nucleares e, posteriormente, à utilização da energia nuclear para fins pacíficos, como a geração de eletricidade.

Durante a década de 1940, o Projeto Manhattan reuniu cientistas de várias partes do mundo, em plena Segunda Guerra Mundial, para desenvolver as primeiras bombas atômicas. O teste bem-sucedido dessas armas em 1945 marcou

um ponto de virada crucial, não só na aplicação militar, mas também na percepção global sobre os riscos e o potencial da energia nuclear.

No período pós-Segunda Guerra Mundial, houve um movimento significativo em direção ao uso pacífico da energia nuclear. As potências mundiais começaram a explorar sua aplicação em reatores nucleares para a geração de eletricidade e em outras áreas da ciência e tecnologia, buscando formas de aproveitar essa poderosa fonte de energia de maneira controlada e segura.

Uma das ferramentas matemáticas essenciais para a área de energia nuclear é a equação do transporte de partículas, que descreve a movimentação e a interação de partículas subatômicas, como nêutrons e fótons, dentro de um reator nuclear ou em outros meios. Essa equação considera a distribuição espacial, a direção, a energia e o tempo de deslocamento das partículas, permitindo prever como elas se propagam e se comportam ao interagir com os materiais do reator. A equação do transporte de partículas é crucial para otimizar o design e a operação de reatores nucleares, garantindo que a reação em cadeia ocorra de maneira controlada e que a energia seja liberada e captada de forma eficiente. Ela também ajuda a identificar e minimizar os riscos de acidentes nucleares, ao prever cenários em que as partículas poderiam se comportar de maneira inesperada. Por isso, o desenvolvimento de métodos para resolver essa equação é um elemento central na engenharia nuclear e na física de reatores, contribuindo diretamente para o uso seguro e eficaz da energia nuclear [33].

Problemas modelados pela equação de transporte do partículas com picos avançados e anisotropia forte são comuns em diversas áreas, como a física nuclear, astrofísica e a simulação de plasmas [9]. Nesses contextos, as partículas interagem de maneira complexa com o meio, resultando em livres caminhos médios extremamente pequenos e seções de choque de espalhamento quase singulares na direção frontal, conhecidas como picos avançados. A anisotropia forte ocorre quando as partículas apresentam uma distribuição angular significativamente desigual, o que complica a

modelagem e a solução numérica desses problemas. Esse comportamento direcional pode ser induzido por campos externos, como eletromagnéticos, ou por interações específicas com o material, e resulta em dificuldades adicionais na discretização e na convergência dos métodos numéricos. Usualmente o método das ordenadas discretas é acurado quanto a modelagem deste tipo de fenômeno [21], porém as características do mesmo geram dificuldades quanto ao uso de métodos iterativos clássicos, podendo deixa-los extremamente lentos [40].

Problemas de transporte de partículas com espalhamento anisotrópico fortemente direcionado, também conhecidos como *forward-peaked scattering*, apresentam dificuldades significativas quando se trata de acelerar a convergência das soluções numéricas. As técnicas convencionais de aceleração, como a Aceleração Sintética de Difusão (DSA) [2, 3] e a Aceleração Não Linear de Difusão (NDA) [8, 41], mostram-se ineficazes para esses problemas devido à sua incapacidade de modelar com precisão os momentos de erro de ordem superior, que podem ter magnitudes significativas. Ao aplicar a DSA a esses problemas, assume-se que qualquer momento de erro acima do primeiro momento é zero, mesmo que esse não seja o caso na realidade. Como resultado, a aceleração dos momentos de ordem superior é negligenciada, tornando essas abordagens inadequadas para lidar com a complexidade do espalhamento altamente anisotrópico [18, 26].

A aceleração sintética padrão, como a DSA, decompõe a solução em uma varredura de transporte de ordem superior e uma correção de erro de ordem inferior. Em alguns casos, essa abordagem é segmentada em múltiplos estágios, onde a primeira etapa envolve a varredura de transporte de ordem superior, e a correção de erro é dividida em subetapas. No entanto, para problemas com espalhamento anisotrópico, a performance dessas técnicas degrada significativamente, uma vez que a aceleração baseada na difusão não consegue capturar os momentos angulares de ordem superior, que desempenham um papel crucial em problemas com espalhamento direcionado .

Para superar essas limitações, foram desenvolvidas técnicas de aceleração baseadas em aproximações assintóticas, como a Fokker-Planck Synthetic Acceleration (FPSA) [18, 26], que usa uma aproximação de ordem inferior com base na aproximação assintótica. A aproximação de Fokker-Planck (FP), que corresponde a um limite assintótico da equação de Boltzmann [29], quando o ângulo de espalhamento e a perda de energia se tornam pequenos, caracterizando o chamado limite de Fokker-Planck. Nesse contexto, técnicas de renormalização podem ser aplicadas para obter aproximações de ordem superior estáveis, resultando nas chamadas equações de Fokker-Planck generalizadas (GFP) [30].

Essas abordagens visam melhorar a convergência em problemas onde a DSA e outras técnicas de aceleração tradicionais falham. Além disso, outras técnicas, como o Método de Diferenças Finitas em Malha Grossa (CMFD) [38, 44], têm sido aplicadas para acelerar problemas de difusão em transportes transientes de nêutrons e demonstraram ser simples e eficazes.

Soluções alternativas têm sido propostas para lidar com esses desafios. Por exemplo, a aceleração PL, que utiliza momentos modificados da seção de choque de espalhamento, tem sido explorada para melhorar a convergência de problemas de transporte anisotrópico. Além disso, as equações Simplified PN (SPN) têm mostrado resultados promissores quando aplicadas a problemas com espalhamento anisotrópico elevado [43]. Essas abordagens indicam um caminho promissor para superar as limitações das técnicas de aceleração baseadas em difusão em problemas com picos avançados e anisotropia forte.

Este trabalho tem como objetivos principais introduzir as ferramentas matemáticas necessárias para a implementação do método de aceleração pela aproximação de Fokker-Planck (FPSA) desenvolvida por [26] e, posteriormente, expandida por [18] para incorporar problemas multi físicos, bem como apresentar as metodologias complementares que serão comparadas com o FPSA. O enfoque central reside na implementação computacional do método, adotando uma formulação matricial

completa que permita sua aplicação eficiente em problemas de grande escala. Para tanto, serão descritos em detalhes os algoritmos envolvidos, desde a discretização das equações até a solução numérica, garantindo clareza e reprodutibilidade. Além disso, serão abordadas as ferramentas matemáticas e computacionais necessárias para a implementação dos métodos comparativos, assegurando uma análise justa e robusta do desempenho do FPSA em relação às abordagens existentes. A elaboração de uma estrutura computacional eficiente e a análise detalhada dos algoritmos visam não apenas facilitar a aplicação prática do método, mas também contribuir para o avanço teórico e prático na área de otimização e aceleração de métodos numéricos.

2 EQUAÇÃO DO TRANSPORTE

A equação de Boltzmann originalmente foi derivada para ser usada na teoria cinética dos gases [5], se tratando de uma equação não linear. Quando consideramos esta equação sob a hipótese de ausência de interações entre as partículas que formam o gás, damos origem a Equação Linear de Boltzmann, ou também chamada de equação do transporte de partículas. A equação do transporte de partículas foi derivada a mais de um século por Ludwig Boltzmann para descrever o comportamento de gases rarefeitos em um meio assim como para descrever outras partículas que possuem a propriedade de não interação entre si como, por exemplo, fótons, prótons, elétrons e nêutrons [6]. Isto é, a equação do transporte de partículas fornece uma descrição quantitativa da distribuição espacial, energética, direcional e temporal das partículas dentro de um meio material. Esta equação pode ser usada para descrever a difusão de nêutrons através do núcleo de reatores nucleares, ou a difusão de fótons através da atmosfera terrestre, ou ainda para descrever o transporte de gases rarefeitos dentro de plasma, entre outras aplicações [4, 5, 7, 10, 24].

Dentro deste contexto, nosso objetivo é derivar a expressão para a equação do transporte de partículas em geometria de placa (ou *slab geometry*), monoenergética e em estado estacionário, que será o objeto de estudo deste trabalho.

2.1 Variáveis do problema

Para um problema tridimensional, a equação consistirá de sete variáveis independentes. Três para representar o vetor posição da partícula $r = (x, y, z)$, um vetor contendo dois ângulos para representar a direção de viagem das partículas $\Omega = (\theta, \omega)$, a energia cinética da partícula E e o tempo t. Podemos observar um diagrama representando essas variáveis na Figura (2.1).

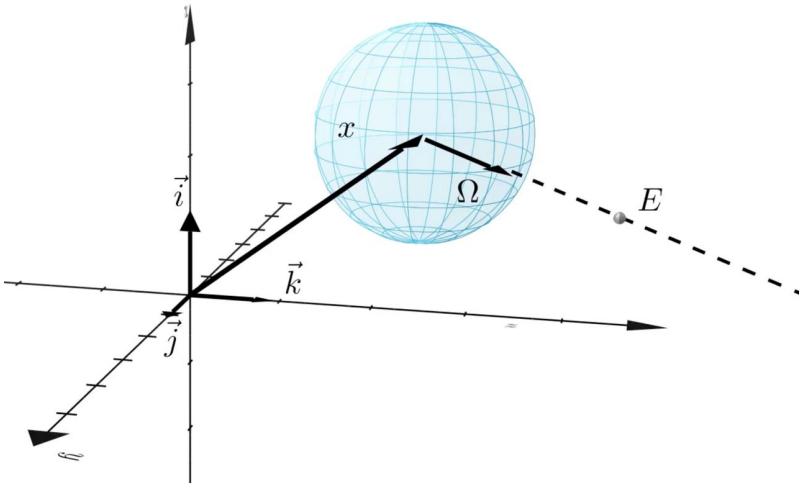

Figura 2.1: Representação das variáveis do problema.

Em termos de coordenadas cartesianas, o vetor posição é da forma

$$r = x\hat{i} + y\hat{j} + z\hat{k}, \tag{2.1}$$

com $\hat{i}, \hat{j}$ e $\hat{k}$ vetores ortonormais.

Para o vetor que descreve a direção de viagem das partículas, dado que é um vetor unitário pelo fato de termos decomposto a vetor velocidade da partícula (supondo uma partícula clássica) em um sentido de viagem e energia cinética, é conveniente descrevê-lo em termos de duas variáveis angulares que denotaremos por (θ, ω), onde θ, o ângulo polar, é medido a partir do eixo x e ω, o ângulo azimutal, é medido a partir do eixo y. Ainda, definimos $\mu = \cos(\theta)$. Em termos de coordenadas cartesianas temos

$$\Omega = \Omega_x\hat{i} + \Omega_y\hat{j} + \Omega_z\hat{k}, \tag{2.2}$$

com

$$\begin{cases} \Omega_x = \mu = \cos(\theta), \\ \Omega_y = \sqrt{1-\mu^2}\cos(\omega), \\ \Omega_z = \sqrt{1-\mu^2}\sin(\omega). \end{cases}$$

Se incrementarmos as variáveis angulares por quantidades infinitesimais $d\mu$ e $d\omega$ o incremento no ângulo sólido $d\Omega$ é descrito da seguinte forma

$$d\Omega = \sin(\theta)d\theta d\omega = d\mu d\omega. \tag{2.3}$$

Note que o sinal negativo na equação (2.3) foi omitido pois um incremento em μ tem sentido oposto a um incremento em ω.

Seja $\nu = (\nu_x, \nu_y, \nu_z)$ o vetor velocidade da partícula e $\Omega = \frac{\nu}{|\nu|}$ o vetor com a direção de viagem da partícula. Neste caso, as componentes do vetor velocidade ν são

$$\nu_x = |\nu|\Omega_x, \tag{2.4}$$

$$\nu_x = |\nu|\Omega_y, \tag{2.5}$$

$$\nu_x = |\nu|\Omega_z, \tag{2.6}$$

com $|\nu| = \sqrt{\frac{2E}{m}}$ a velocidade não-relativística da partícula e m a massa da partícula.

2.2 Definições

Definidas as variáveis do espaço de fase que representam o estado das partículas, precisamos definir certas quantidades que representam a física de interação das partículas com o meio. Considere uma situação como ilustrada na Figura (2.2). Dado um ponto no espaço tridimensional r no tempo t, levamos em conta as partículas que estão dentro de um volume diferencial dV no espaço, viajando dentro ângulo sólido $d\Omega$ no sentido do vetor Ω, tendo energias entre E e $E + dE$, veja na Figura (2.2). Definimos a densidade angular $\mathcal{N}(r, \Omega, E, t)$ como o valor médio da densidade de partículas de forma que

$$\mathcal{N}(r, \Omega, E, t)dVd\Omega dE \quad = \quad \text{Valor esperado de partículas em } (r, \Omega, E, t)$$

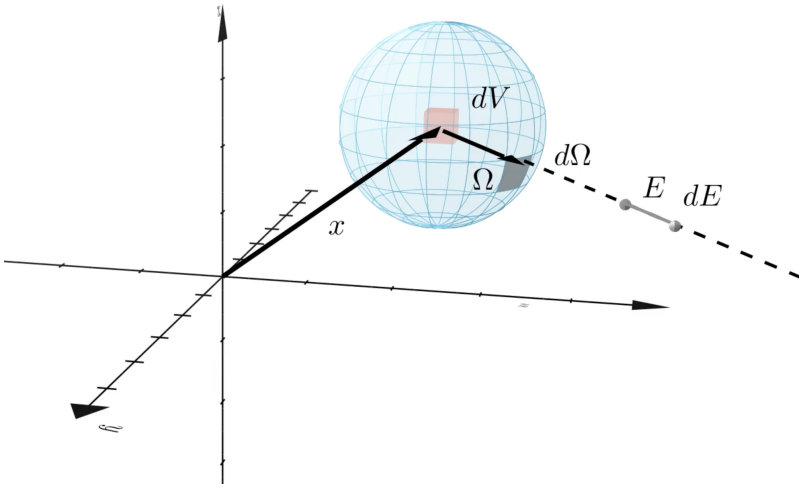

Figura 2.2: Espaço de fase.

dentro do volume do espaço de fase $dVd\Omega dE$. (2.7)

Definimos agora aquilo que é chamado de o fluxo angular de partículas, que descreve o fluxo de partículas através de uma área, como

$$\psi(r, \Omega, E, t) = |\nu|\mathcal{N}(r, \Omega, E, t). \tag{2.8}$$

O fluxo escalar de partículas é obtido integrando Ω em todo o domínio

$$\phi(r, E, t) = \int_{4\pi} \psi(r, \Omega, E, t) d\Omega. \tag{2.9}$$

Como discutido anteriormente, estamos considerando que as interações entre as partículas são negligenciáveis, mas não é possível fazer o mesmo com as interações das partículas com o meio material nas quais se encontram (interações atômicas). Estas interações ocorrem de duas maneiras: colisões do tipo absorção e colisões do tipo espalhamento, a direção de viagem das partículas Ω, para ambos os casos, não incide influências nos fenômenos. Nestas condições, para colisões do tipo absorção, precisamos levar em conta a probabilidade das partículas serem absorvidas após viajar uma distância incremental ds no espaço. Definimos então,

$$\sigma_a(r, E, t)ds = \text{probabilidade da partícula ser absorvida}$$

$$\text{ao viajar uma distância incremental } ds. \tag{2.10}$$

Com σ_a é chamado de seção de choque de absorção.Para colisões do tipo espalhamento, as partículas enfrentam interações de natureza diferente da anterior. A interação resultante de um espalhamento, *a priori*, pode causar uma mudança de direção de viagem das partículas que estão com direção Ω e passaram a ter, pós interação, uma direção Ω' que denotaremos por $\Omega \to \Omega'$ e uma mudança de energia saindo de E e indo para E' que denotaremos por $E \to E'$. Definimos então,

$$\begin{aligned}\sigma_s(r, \Omega \to \Omega', E \to E', t) d\Omega' dE' ds = &\text{ probabilidade da partícula} \\ &\text{espalhar de } \Omega \to \Omega' \text{ e } E \to E' \\ &\text{ao viajar uma distância } ds.\end{aligned} \tag{2.11}$$

Se supormos que o problema é rotacionalmente invariante, isto é, a probabilidade de espalhamento depende apenas do produto interno entre Ω e Ω' então definimos o termo de espalhamento usando o cosseno do ângulo entre Ω e Ω' da seguinte forma

$$\sigma_s(r, \Omega \to \Omega', E \to E', t) = \sigma_s(r, \Omega \cdot \Omega', E \to E', t). \tag{2.12}$$

Integrando (2.12) sobre todos os ângulos e todo o domínio de energia, obtemos a seção de choque de espalhamento macroscópica

$$\sigma_s(r, E, t) = \int_0^\infty \int_{4\pi} \sigma_s(r, \Omega \cdot \Omega', E \to E', t) d\Omega' dE'. \tag{2.13}$$

Ainda, dizemos que

$$\begin{aligned}\sigma_s(r, E, t) ds = &\text{ probabilidade da partícula espalhar} \\ &\text{ao percorrer uma distância incremental } ds.\end{aligned} \tag{2.14}$$

Finalmente, definimos a seção de choque macroscópica total simplesmente como a soma das seções de choque de absorção e espalhamento nas equações

(2.10) e (2.14), respectivamente. Ou seja,

$$\sigma_t(r, E, t) = \sigma_a(r, E, t) + \sigma_s(r, E, t). \tag{2.15}$$

De forma que as partículas viajando uma distância incremental ds tem uma probabilidade de enfrentar qualquer tipo de interação dado por

$$\sigma_t(r, \Omega \cdot \Omega', E \to E', t) dE' d\Omega' ds. \tag{2.16}$$

2.3 Derivando a Equação do Transporte

A equação do transporte de partículas neutras, ou simplesmente, equação do transporte como chamaremos a partir de agora, é derivada da lei de conservação de massa, o total de partículas dentro de um volume diferencial do espaço de fase é igual ao ganho de partículas menos o total de perda de partículas. Considere então o volume do espaço de fase definido por $\Delta\alpha = \Delta x \Delta y \Delta z \Delta\omega \Delta\mu \Delta E$. O número de partículas neste volume no tempo t é dado por $\Delta\alpha \mathcal{N}(r, \Omega, E, t)$. Assim, podemos definir a variação temporal da quantidade de partículas no volume do espaço de fase $\Delta\alpha$ como

$$\boxed{\text{Taxa de Variação}} = \Delta\alpha \frac{\partial}{\partial t} \mathcal{N}(x, y, z, \mu, \omega, E, t). \tag{2.17}$$

No que tange as diferentes maneiras que as partículas pode entrar ou sair do volume $\Delta\alpha$ temos cinco mecanismos possíveis: quantidade absoluta de partículas que deixam o sistema, absorção, espalhamento para fora do volume no espaço de fase $\Delta\alpha$ (*outscattering*), espalhamento para dentro de $\Delta\alpha$ (*inscattering*) e produção espontânea de partículas em $\Delta\alpha$.

As partículas podem escapar do volume $\Delta\alpha$ através de qualquer uma das dimensões que o mesmo engloba. Nesse caso, considere um cubo perpendicular ao eixo x. A quantidade de vazamento através da face perpendicular ao eixo x é

dada por

$$\boxed{(\text{Vazamento})_x} = \nu_x \mathcal{N}(r, \Omega, , E, t)|_x^{x+\Delta x} \Delta y \Delta z \Delta \mu \Delta \omega. \tag{2.18}$$

Tomando $\Delta x \to dx$ obtemos

$$\boxed{(\text{Vazamento})_x} = \frac{\partial}{\partial x} \nu_x \mathcal{N}(r, \Omega, E, t) \Delta \alpha. \tag{2.19}$$

Podemos repetir o mesmo raciocínio para as demais faces do cubo e generalizar o conceito de vetor velocidade ν para compreender todo o espaço de fase. Obtemos o valor total de partículas que escaparam do volume $\Delta\alpha$ através da expressão:

$$\boxed{\text{Vazamento}} = \left(\frac{\partial}{\partial x} \nu_x + \frac{\partial}{\partial y} \nu_y + \frac{\partial}{\partial z} \nu_z + \frac{\partial}{\partial E} \nu_E + \frac{\partial}{\partial \mu} \nu_\mu + \frac{\partial}{\partial \omega} \nu_\omega \right) \mathcal{N}(r, \Omega, E, t) \Delta \alpha. \tag{2.20}$$

Ainda, para partículas neutras, o vazamento ocorre sem variação de energia ($\nu_E = 0$) e a trajetória entre interações segue sem perturbações do meio ($\nu_\mu = \nu_\omega = 0$). Isto ocorre devido a ausência de interações de nêutrons com campo eletromagnético e também pelo fato de estarmos considerando partículas que se deslocaram livremente pelo meio entre interações, sem sofrer interações de nenhuma natureza dentro deste intervalo de espaço, conservando energia e direção de deslocamento. Nesse caso,

$$\begin{aligned} \boxed{\text{Vazamento}} &= \left(\frac{\partial}{\partial x} \nu_x + \frac{\partial}{\partial y} \nu_y + \frac{\partial}{\partial z} \nu_z \right) \mathcal{N}(r, \Omega, E, t) \Delta \alpha \\ &= \nu \cdot \nabla \mathcal{N}(r, \Omega, E, t) \Delta \alpha. \end{aligned} \tag{2.21}$$

A taxa com que as partículas são absorvidas é dado por

$$\boxed{\text{Absorção}} = |\nu| \sigma_a(r, E, t) \mathcal{N}\left(r, \Omega, E, t\right) \Delta \alpha. \tag{2.22}$$

Similarmente, a taxa com que ocorre um espalhamento para dentro (*inscattering*) ou para fora (*outscattering*) no volume $\Delta\alpha$ é dada por

$$\boxed{\textit{inscattering}} = \Delta \alpha \int_0^\infty \int_{4\pi} |\nu'| \sigma_s(r, \Omega' \cdot \Omega, E' \to E, t) \mathcal{N}(r, \Omega', E', t) d\Omega' dE', \tag{2.23}$$

para as partículas que espalharam para dentro de $\Delta\alpha$

$$\boxed{\textit{outscattering}} = \Delta\alpha \int_0^\infty \int_{4\pi} |\nu|\sigma_s(r, \Omega \cdot \Omega', E \to E', t)\mathcal{N}(r, \Omega, E, t) d\Omega' dE', \quad (2.24)$$

para as partículas que espalharam para fora de $\Delta\alpha$.

Note que as funções que estão sendo integradas na equação (2.24) não dependem das variáveis de integração, portanto,

$$\boxed{\textit{outscattering}} = |\nu|\sigma_s(r, E, t)\mathcal{N}(r, \Omega, E, t)\Delta\alpha. \quad (2.25)$$

Por ultimo, o termo fonte, que leva em consideram a produção espontânea de partículas,

$$\boxed{\text{Fonte}} = Q(r, \Omega, E, t)\Delta\alpha. \quad (2.26)$$

Combinando agora as equações (2.21), (2.22), (2.23), (2.24) e (2.26) obtemos uma expressão para a taxa de variação

$$\begin{aligned} \boxed{\text{Taxa de variação}} = &+ \boxed{\text{Fonte}} \\ &+ \boxed{\textit{Inscaterring}} \\ &- \boxed{\textit{Outscattering}} \\ &- \boxed{\text{Vazamento}} \\ &- \boxed{\text{Absorção}}. \end{aligned} \quad (2.27)$$

Observe que a equação (2.27) reflete na sua formulação o assunto discutindo anteriormente sobre a lei de conservação de massa. Isto é, a variação temporal de partículas dentro de $\Delta\alpha$ deve respeitar partículas removidas e incluídas dentro deste volume durante uma variação no tempo. Podemos, ainda, unificar o valor absoluto da velocidade das partículas, $|\nu|$ com a função de densidade de partículas $\mathcal{N}$ e definir o que é chamado de fluxo angular de partículas dependente do tempo

$$\psi(r, \Omega, E, t) = |\nu|\mathcal{N}(r, \Omega, E, t). \quad (2.28)$$

Temos, a partir da equação (2.27), finalmente, a equação do transporte de partículas na sua forma geral

$$\frac{1}{|\nu|}\frac{\partial\psi(r,\Omega,E,t)}{\partial t} + \Omega\cdot\nabla\psi(r,\Omega,E,t) + \sigma_t(r,E,t)\psi(r,\Omega,E,t)$$
$$= \int_0^\infty \int_{4\pi} \sigma_s(r,\Omega'\cdot\Omega,E'\to E,t)\psi(r,\Omega',E',t)d\Omega' dE' + Q(r,\Omega,E,t). \qquad (2.29)$$

Condições de contorno espaciais e condição inicial temporal são necessárias para determinar unicamente a solução de (2.29). Sejam elas então:

$$\psi(r_c,\Omega,E,t) = \psi_c(\Omega,E,t), \;\; \mathbf{n}\cdot\Omega < 0, \qquad (2.30)$$

com r_c um ponto no contorno do domínio espacial, $\mathbf{n}$ é o vetor normal apontando para fora da superfície do contorno espacial e ψ_c uma função especificada.

$$\psi(r,\Omega,E,0) = \psi_0(r,\Omega,E), \qquad (2.31)$$

com ψ_0 uma função especificada para a condição inicial do sistema.

2.4 Hipóteses Adicionais: Estado Estacionário, Geometria de Placa e Partículas Monoenergéticas

Sob certas hipóteses do problema podemos simplificar a equação (2.29). Isto é, no problema que consideraremos neste trabalho vamos tomar a condição de $t\to\infty$ que corresponde a considerar que um tempo suficiente se passou para que não haja mais variação temporal do fluxo de partículas. Podemos descartar também a dependência em energia da equação (2.29) levando em conta a contribuição de todos os valores de energia possíveis para as partículas do problema. Ainda, sob certas condições de simetria espacial para o problema, a dependência espacial se resume a uma dependência unidimensional, também chamada de geometria de placa ou *slab geometry*. Com efeito, vamos tomar

$$\psi(x,\Omega,t) = \int_0^\infty \psi(x,\Omega,E,t)dE, \qquad (2.32)$$

e nas condições de contorno

$$\psi(x_c, \Omega, t) = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_c(x_c, \Omega, E, t) dE. \tag{2.33}$$

Com $\psi(x, \Omega, t)$ sendo o fluxo angular de partículas monoenergéticas dependentes do tempo. Isto é, consideramos a contribuição de todos os valores possíveis de energia assumidos pelas partículas do sistema. Aplicando a (2.32) a (2.29) obtemos a expressão para o fluxo de partículas monoenergéticas dependente do tempo:

$$\begin{aligned} &\frac{1}{|\nu|}\frac{\partial \psi(x, \Omega, t)}{\partial t} + \Omega \cdot \nabla \psi(x, \Omega, t) + \sigma_t(x)\psi(x, \Omega, t) \\ &\quad = \int_{4\pi} d\Omega' \sigma_s(x, \Omega' \cdot \Omega, t)\psi(x, \Omega', t) + Q(x, \Omega, t), \end{aligned} \tag{2.34}$$

com condições de contorno espaciais

$$\psi(x_L, \Omega, t) = \psi_l(\Omega, t), \;\; \mathbf{n} \cdot \Omega > 0, \tag{2.35}$$

$$\psi(x_R \Omega, t) = \psi_r(\Omega, t), \;\; \mathbf{n} \cdot \Omega < 0. \tag{2.36}$$

Note que nas equações (2.34) e (2.35) estamos usando x ao invés de r, pois agora o problema está sendo tratado como unidimensional. Isto ocorre, assumindo uma simetria azimutal na direção x, isto é, o fluxo angular independe das direções y e z. O problema é tomado como tendo domínio infinito no plano formado pelas direções espaciais y e z e um domínio finito na direção espacial x, sendo chamado de problema em geometria de placa, ou ainda, *slab geometry*. Isto nos permite tomar $\Omega = (\mu, \omega)$, o que resulta em:

$$\psi(x, \Omega, t) = \psi(x, \mu, \omega, t) \tag{2.37}$$

A equação (2.34) fica

$$\begin{aligned} &\frac{1}{|\nu|}\frac{\partial \psi(x, \mu, \omega, t)}{\partial t} + \mu \frac{\partial \psi(x, \mu, \omega, t)}{\partial x} + \sigma_t(x, t)\psi(x, \mu, \omega, t) \\ &\quad = \int_{-1}^{1}\int_{0}^{2\pi} \sigma_s(x, \mu' \to \mu, \omega, t)\psi(x, \mu', \omega, t) d\omega d\mu' + Q(x, \mu, \omega, t), \end{aligned} \tag{2.38}$$

onde $\sigma_s(x, \mu' \to \mu, \omega)$ denota a seção de choque de espalhamento para as partículas que espalharam de uma direção μ' para a direção μ no ponto x e no ângulo azimutal

ω. Podemos eliminar a dependência azimutal do problema integrando ω em $0 \leq \omega \leq 2\pi$. De forma a obter a seguinte expressão para o fluxo angular

$$\psi(x,\mu,t) = \int_0^{2\pi} \psi(x,\mu,\omega,t)d\omega. \tag{2.39}$$

Substituindo a expressão de (2.39) em (2.38) obtemos a equação do transporte em geometria de placa dependente do tempo

$$\begin{aligned}\frac{1}{|\nu|}\frac{\partial\psi(x,\mu,t)}{\partial t} + \mu\frac{\partial\psi(x,\mu,t)}{\partial x} + \sigma_t(x,t)\psi(x,\mu,t) \\ = \int_{-1}^{1} \sigma_s(x,\mu' \to \mu,t)\psi(x,\mu',t)d\mu' + Q(x,\mu,t),\end{aligned} \tag{2.40}$$

com

$$Q(x,\mu,t) = \int_0^{2\pi} Q(x,\mu,\omega,t)d\omega. \tag{2.41}$$

As condições de contorno agora são

$$\psi(x_L,\mu,t) = \psi_l(\mu,t), \quad \mu > 0, \tag{2.42}$$

$$\psi(x_R,\mu,t) = \psi_r(\mu,t), \quad \mu < 0. \tag{2.43}$$

para o problema no intervalo espacial compacto $[x_L, x_R]$. A condição inicial é tomada como

$$\psi(x,\mu,0) = \psi_0(x,\mu). \tag{2.44}$$

Podemos ir adiante e consideramos se passou tempo suficiente para que o sistema atinja um estado o equilíbrio, isto é, definimos

$$\psi(x,\mu) = \lim_{t\to\infty} \psi(x,\mu,t). \tag{2.45}$$

Dessa forma, a equação (2.40) vira a equação do transporte de partículas em estado estacionário, em geometria de placa e monoenergética da forma:

$$\mu\frac{\partial\psi(x,\mu)}{\partial z} + \sigma_t(x)\psi(x,\mu) = \int_{-1}^{1} \sigma_s(x,\mu' \to \mu)\psi(x,\mu')d\mu' + Q(x,\mu). \tag{2.46}$$

Onde as condições de contorno em (2.42) e (2.43) se tornam

$$\psi(x_L, \mu) = \psi_L(\mu), \;\; \mu > 0, \tag{2.47}$$

$$\psi(x_R, \mu) = \psi_R(\mu), \;\; \mu < 0, \tag{2.48}$$

com ψ_l e ψ_r funções especificadas nos contornos do problema.

3 RESOLVENDO A EQUAÇÃO DO TRANSPORTE

A equação do transporte de partículas cobre uma variedade muito grande de fenômenos físicos que em geral requerem um método iterativo computacionalmente intensivo [1, 2, 18, 20, 21, 26, 39] para serem resolvidos, visto que soluções analíticas funcionam apenas para um número restrito de casos [5]. Entre os métodos numéricos para equação do transporte temos os métodos estocásticos [9, 15, 17] e os métodos determinísticos que serão nosso foco neste trabalho. Começaremos discutindo algumas aproximações para a equação do transporte [5, 12, 13, 23] e logo após discutiremos alguns métodos iterativos que utilizaram as aproximações discutidas para resolver a equação do transporte.

3.1 Aproximações para a Equação do Transporte

Iremos discutir três aproximações para equação do transporte de partículas na equação (2.46), a aproximação da difusão que se trata de assumirmos que o fluxo angular e o termo de espalhamento são linearmente anisotrópicos, a aproximação por Fokker-Planck que se trata de uma aproximação para quando o termo de espalhamento tem uma forte anisotropia na direção frontal e também a aproximação por ordenadas discretas S_N que se trata de tomar os pontos na malha para a variável angular como sendo as raízes do polinômio de Legendre P_N.

3.1.1 Aproximação por Difusão

A equação da difusão é uma aproximação da equação do transporte de partículas onde consideramos apenas os dois primeiros momentos de Legendre do

fluxo [5].

$$\phi_0(x) = \int_{-1}^{1} \psi(x,\mu)d\mu \tag{3.1}$$

e

$$\phi_1(x) = \int_{-1}^{1} \mu\psi(x,\mu)d\mu \tag{3.2}$$

são o fluxo total e a corrente líquida, respectivamente.

Integrando a equação (2.46) sobre sobre todo o domínio angular, isto é, sobre $\mu \in [-1,1]$ e usando a relação das equações (3.1) e (3.2) obtemos

$$\frac{d\phi_1(x)}{dx} + \sigma_t(x)\phi_0(x) = \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} \sigma_s(x,\mu' \to \mu)\psi(x,\mu')d\mu' d\mu + \int_{-1}^{1} Q(x,\mu). \tag{3.3}$$

Podemos agora expandir o termo $\sigma_s(x,\mu' \to \mu)$ usando polinômios de Legendre para obter

$$\begin{aligned}\sigma_s(x,\mu' \to \mu) &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2}\sigma_{s,l}(x)P_l(\mu' \to \mu) \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2}\sigma_{s,l}(x)P_l(\mu)P_l(\mu'),\end{aligned} \tag{3.4}$$

com $\sigma_{s,l}(x)$ sendo os momentos de Legendre da seção de choque de espalhamento. Substituindo a expressão (3.4) no termo de espalhamento para a equação do transporte (3.3) obtemos

$$\begin{aligned}\int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} \sigma_s(x,\mu,\mu')\psi(x,\mu')d\mu' d\mu &= \int_{-1}^{1}\int_{-1}^{1} \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2}\sigma_{s,l}(x)P_l(\mu)P_l(\mu')\psi(x,\mu')d\mu' d\mu \\ &= \sum_{l=0}^{\infty} \frac{2l+1}{2}\sigma_{s,l}(x)\phi_l(x)\int_{-1}^{1} P_l(\mu)d\mu,\end{aligned} \tag{3.5}$$

com

$$\phi_l(x) = \int_{-1}^{1} P_l(\mu')\psi(x,\mu')d\mu' \tag{3.6}$$

os momentos de Legendre do fluxo angular.

Assumiremos a seguir que a seção de choque de espalhamento pode ser aproximada de maneira satisfatória linearmente para que possamos reter apenas os

dois primeiros termos do somatório na expressão (3.5)

$$\begin{aligned}
\sum_{l=0}^{1} \frac{2l+1}{2}\sigma_{s,l}(x)\phi_l(x)\int_{-1}^{1} P_l(\mu)d\mu \\
&= \frac{1}{2}\sigma_{s,0}(x)\phi_0(x)\int_{-1}^{1} P_0(\mu)d\mu + \frac{3}{2}\sigma_{s,1}(x)\phi_1(x)\int_{-1}^{1} P_1(\mu)d\mu \\
&= \frac{1}{2}\sigma_{s,0}(x)\int_{-1}^{1} \phi_0(x)d\mu + \frac{3}{2}\sigma_{s,1}(x)\int_{-1}^{1} \mu\phi_1(x)d\mu \\
&= \sigma_{s,0}(x)\phi_0(x), \qquad (3.7)
\end{aligned}$$

pois $P_0(\mu) = 1$ e $P_1(\mu) = \mu$. Finalmente, juntando tudo que fizemos até agora

$$\frac{d\phi_1(x)}{dx} + \sigma_t(x)\phi_0(x) = \sigma_{s,0}(x)\phi_0(x) + Q_0(x), \qquad (3.8)$$

com

$$Q_0(x) = \int_{-1}^{1} Q(x,\mu)d\mu. \qquad (3.9)$$

Agora, consideramos o momento de primeira ordem da equação (2.46) e integrando a expressão para todo o domínio angular multiplicado por μ, isto é, integrando da forma: $\int_{-1}^{1} \mu(\cdot)d\mu$. Ainda, seguindo passos análogos aos anteriores obtemos

$$\frac{d}{dx}\int_{-1}^{1} \mu^2\psi(x,\mu)d\mu + \sigma_t(x)\phi_1(x) = \frac{3}{2}\sigma_{s,1}(x)\phi_1(x)\int_{-1}^{1} \mu^2 d\mu + \int_{-1}^{1} \mu Q(x,\mu)d\mu. \quad (3.10)$$

Para proceder, é necessário assumir que o fluxo angular é linearmente anisotrópico. Nesse caso, procedemos semelhantemente ao caso da seção de choque de espalhamento em que o fluxo é expandido em ângulo e retemos os dois primeiros termos da expansão obtendo

$$\psi(x,\mu) = \frac{1}{2}\phi_0(x) + \frac{3}{2}\mu\phi_1(x). \qquad (3.11)$$

Inserindo a relação (3.11) em (3.10) e simplificando a expressão obtemos

$$\frac{1}{3}\frac{d}{dx}\phi_0(x) + \sigma_t(x)\phi_1(x) = \sigma_{s,1}(x)\phi_1(z) + \int_{-1}^{1} \mu Q(x,\mu)d\mu. \qquad (3.12)$$

Note que assumimos que a aproximação por difusão é estacionária. Além disso, geralmente a fonte é tomada como isotrópica, ou seja,

$$Q(x,\mu) = \frac{Q(x)}{2}. \tag{3.13}$$

com $Q(x)$ o termo fonte isotrópico. Como tomamos a fonte como sendo isotrópica, a expressão envolvendo a fonte na equação (3.14) é nula, levando então a expressão

$$\frac{1}{3}\frac{d}{dx}\phi_0(x) + \sigma_t\phi_1(x) = \sigma_{s,1}(x)\phi_1(z). \tag{3.14}$$

ou ainda, isolando o termo $\phi_1(x)$,

$$\phi_1(x) = \frac{1}{3(\sigma_{s,1}(x) - \sigma_t(x))}\frac{d\phi_0(x)}{dx}. \tag{3.15}$$

Substituindo agora a expressão para $\phi_1(x)$ da equação (3.15) na equação (3.8), obtemos a equação da difusão de neutrôns

$$\frac{1}{3(\sigma_{s,1}(x) - \sigma_t(x))}\frac{d^2\phi_0(x)}{dx^2} + \sigma_a(x)\phi_0(x) = Q(x), \tag{3.16}$$

onde $\sigma_a(x)$ que aparece na expressão vem da definição da seção de choque total dada em (2.15)

3.1.2 Aproximação por Fokker-Planck

A aproximação por Fokker-Planck [18, 26, 28, 31] é obtida quando tomamos o ângulo médio de espalhamento $\mu \to 1$, isto é, os valores do núcleo de espalhamento não são significativos para valores distantes de 1. A equação que é obtida dessa aproximação é chamada de equação de Fokker-Planck.

Considere a equação do transporte (2.46) com o termo de espalhamento aproximado pela quadratura de Gauss-Legendre da seguinte forma

$$\mu\frac{\partial\psi(x,\mu)}{\partial x} + \sigma_a(x)\psi(x,\mu) = \sum_{l=0}^{L}\frac{2l+1}{2}\sigma_{s,l}(x)P_l(\mu)\phi_l(x) - \sigma_s(x)\psi(x,\mu) + Q(x,\mu), \tag{3.17}$$

Note que expandimos o termo $\sigma_t(x) = \sigma_a(x) + \sigma_s(x)$. Com $\phi_l(x)$ tendo a mesma definição que em (3.6) e

$$\sigma_s(x) = \int_{-1}^{1} \sigma_s(x,\mu)d\mu. \tag{3.18}$$

Além disso, introduzimos a seguinte definição

$$S\psi(x,\mu) = \sum_{l=0}^{L} \frac{2l+1}{2}\sigma_{s,l}(x)P_l(\mu)\phi_l(x) - \sigma_s(x)\psi(x,\mu), \tag{3.19}$$

isto é,

$$S = \sum_{l=0}^{L} \frac{2l+1}{2}\sigma_{s,l}(x)P_l(\mu)\int_{-1}^{1} P_l(\mu')(\cdot)d\mu' - \sigma_s(x). \tag{3.20}$$

Daí, substituindo a definição em (3.19) em (3.17) obtemos

$$\mu\frac{\partial\psi(x,\mu)}{\partial x} + \sigma_a(x)\psi(x,\mu) = S\psi(x,\mu) + Q(x,\mu). \tag{3.21}$$

Agora, vamos direcionar nossa atenção em tratar do termo $S\psi(x,\mu')$ na equação (3.21). Normalizamos os momentos de Legendre da seção de choque de espalhamento da seguinte forma

$$\sigma_{s,l}(x) = \sigma_s(x)f_l(x), \tag{3.22}$$

com

$$f_l(x) = \int_{-1}^{1} f(x,\mu)P_l(\mu)d\mu \tag{3.23}$$

Substituindo a definição de (3.22) em (3.17) obtemos

$$S\psi(x,\mu) = \sigma_s(x)\sum_{l=0}^{L} \frac{2l+1}{2}P_l(\mu)f_l(x)\phi_l(x) - \sigma_s(x)\psi(x,\mu). \tag{3.24}$$

No caso de pico avançando, $f(x,\mu)$ é significativo apenas para valores de $\mu \to 1$, ou seja, a equação (3.23) decresce rapidamente para valores distantes de $\mu = 1$. Neste caso, podemos expandir $P_l(\mu)$ em sua série de Taylor em torno de $\mu = 1$ e reter apenas os dois primeiros termos da expansão

$$P_l(\mu) = 1 - \left.\frac{dP_l(\mu)}{d\mu}\right|_{\mu=1}(1-\mu)$$

$$= 1 - \frac{l(l+1)}{2}(1-\mu). \tag{3.25}$$

Inserindo (3.25) em (3.23) obtemos

$$f_l(x) = 1 - \frac{l(l+1)}{2}(1-\bar{\mu}), \tag{3.26}$$

em que $\bar{\mu}$ é definido por

$$\bar{\mu}(x) = \int_{-1}^{1} \mu f(x,\mu) d\mu. \tag{3.27}$$

Note que as seções de choque de espalhamento com pico avançado satisfazem $1 - \bar{\mu} \ll 1$, pois, em média, $\bar{\mu} \to 1$. Inserindo (3.26) em (3.24) obtemos

$$S\psi(x,\mu) = \sigma_s(x) \sum_{l=0}^{L} \frac{2l+1}{2} P_l(\mu)\phi_l(x) \tag{3.28}$$

$$- \frac{\sigma_{tr}(x)}{2} \sum_{l=0}^{L} \frac{2l+1}{2} l(l+1) P_l(\mu)\phi_l(x) - \sigma_s(x)\psi(x,\mu), \tag{3.29}$$

com

$$\sigma_{tr}(x) = \sigma_s(x)(1 - \bar{\mu}(x)), \tag{3.30}$$

sendo a seção de choque de transferência de momento. Além disso, note que usando a equação diferencial que da origem aos polinômios de Legendre [10], temos que

$$\frac{\partial}{\partial \mu}(1-\mu^2)\, \frac{\partial P_l(\,\mu)}{\partial \mu} + l(l+1)P_l(\,\mu) = 0. \tag{3.31}$$

Isto nos permite eliminar o termo $l(l+1)P_l(\mu)$ da equação (3.28) e após alguma manipulação algébrica obter

$$\begin{aligned} S\psi(x,\mu) = \sigma_s(x) \int_{-1}^{1} \sum_{l=0}^{L} \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) P_l(\mu')\psi(x,\mu') d\mu' \\ - \sigma_s(x)\psi(x,\mu) + \frac{\sigma_{tr}(x)}{2} \mathcal{L}(\mu) \int_{-1}^{1} d\mu' \\ \times \sum_{l=0}^{L} \frac{2l+1}{2} P_l(\mu')\psi(x,\mu'), \end{aligned} \tag{3.32}$$

com

$$\mathcal{L}(\mu) = \frac{\partial}{\partial \mu}(1-\mu^2)\frac{\partial}{\partial \mu}. \tag{3.33}$$

Usando agora a relação

$$\sum_{l=0}^{L} \frac{2l+1}{2} P_l(\mu) P_l(\mu') = \delta(\mu - \mu') \tag{3.34}$$

na equação (3.32) obtemos, finalmente,

$$\begin{aligned} S\psi(x,\mu) \approx \mathcal{L}_{FP}\psi(x,\mu) &= \frac{\sigma_{tr}(x)}{2}\mathcal{L}(\mu)\psi(x,\mu) \\ &= \frac{\sigma_{tr}(x)}{2}\frac{\partial}{\partial\mu}(1-\mu^2)\frac{\partial\psi(x,\mu)}{\partial\mu}, \end{aligned} \tag{3.35}$$

onde $\mathcal{L}_{FP}\psi(x,\mu)$ é conhecido como aproximação de Fokker-Planck. Dessa forma, a equação de Fokker-Planck fica

$$\mu\frac{\partial\psi(x,\mu)}{\partial x} + \sigma_a(x)\psi(x,\mu) = \frac{\sigma_{tr}(x)}{2}\frac{\partial}{\partial\mu}(1-\mu^2)\frac{\partial\psi(x,\mu)}{\partial\mu} + Q(x,\mu). \tag{3.36}$$

3.1.3 Aproximação por Ordenadas Discretas S_N

A aproximação por ordenadas discretas teve sua origem nos métodos de transporte radiativo em atmosferas de estrelas [21]. O método trata de aplicarmos uma quadratura ao termo de espalhamento e escolhermos um conjunto discreto adequado de pontos para a variável angular μ [5]. Começamos aplicando a quadratura de Gauss-Legendre ao termo de espalhamento na (2.46). Nesse caso,

$$\mu\frac{\partial\psi(x,\mu)}{\partial x} + \sigma_t(x)\psi(x,\mu) = \sum_{l=0}^{L}\frac{2l+1}{2}\sigma_{s,l}(x)P_l(\mu)\phi_l(x) + Q(x,\mu), \tag{3.37}$$

com os momentos de Legendre do fluxo dados pela expressão

$$\phi_l(x) = \int_{-1}^{1} P_l(\mu')\psi(x,\mu')d\mu'. \tag{3.38}$$

Vale ressaltar ainda que

$$\phi_0(x) = \int_{-1}^{1}\psi(x,\mu')d\mu' \tag{3.39}$$

é chamado de fluxo total ou fluxo escalar. Note que truncamos os termos do somatório a partir do termo $(L+1)$, assumindo, portanto, que os termos até L aproximam de maneira satisfatória o termo de espalhamento.

Com a escolha de N raízes distintas do polinômio de Legendre de ordem N, P_N, obtemos um sistema de equações diferenciais, vindos da equação (3.37), que são denominadas equações S_N, ou ainda, aproximação S_N, ou método S_N. São elas,

$$\mu_n \frac{\partial \psi(x,\mu_n)}{\partial x} + \sigma_t(x)\psi(x,\mu_n) = \sum_{l=0}^{L} \frac{2l+1}{2} \sigma_{s,l}(x) P_l(\mu_n)\phi_l(x) + Q(x,\mu_n), \quad n = 1,\ldots,N. \tag{3.40}$$

Usualmente, $\psi(x,\mu_n)$ é escrito como $\psi_n(x)$ para simplificar a notação. A escolha dos μ_n é feita de forma a aproximar os momentos de Legendre $\phi_l(x)$ pela fórmula de quadratura dada a seguir. Para a equação (3.38) temos a expressão

$$\phi_l(x) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} w_n P_l(\mu_n) \psi_n(x) \tag{3.41}$$

e para (3.39) temos

$$\phi_0(x) = \frac{1}{2} \sum_{n=1}^{N} w_n \psi_n(x). \tag{3.42}$$

Os pesos w_n são dados por

$$w_n = \frac{2}{(1-\mu_n^2)\left(\left.\frac{dP_n(\mu)}{d\mu}\right|_{\mu=\mu_n}\right)^2}, \tag{3.43}$$

com condição de normalização dada por

$$\sum_{n=1}^{N} w_n = 2. \tag{3.44}$$

Além disso, μ_n é a n-ésima raiz do polinômio de Legendre P_N. Os polinômios de Legendre são as autofunções da solução de uma equação diferencial [10], porém podem ser extraídos da seguinte recursão, chamada de recursão de Bonnet [36]

$$P_0(\mu_n) = 0, \tag{3.45}$$

$$P_1(\mu_n) = \mu_n, \tag{3.46}$$

$$(n+1)P_{n+1}(\mu_n) = (2n+1)\mu_n P_n(\mu_n) - nP_{n-1}(\mu_n), \;\; n = 2, \ldots, N. \tag{3.47}$$

3.2 Resolvendo a Equação do Transporte

Soluções eficientes para a equação do transporte de partículas são um desafio computacional devido à natureza complexa do problema, que envolve o acoplamento entre variáveis espaciais e angulares como na equação (2.46). Para enfrentar este desafio, métodos numéricos iterativos são amplamente utilizados. Para os casos em que temos uma equação não linear acoplada, utilizamos métodos não lineares como *Non-Linear Diffusion Acceleration* (NDA) [41]. Para o problema que estaremos tratando neste trabalho, usaremos métodos lineares iterativos para resolver a equação do transporte de partículas. Discutiremos a seguir alguns métodos iterativos lineares como: Iteração de Fonte (SI) e Aceleração Sintética (SA) que é um método desenvolvido para acelerar o método SI quando o mesmo converge lentamente. Discutiremos o uso da aproximação pela equação da difusão (DSA) e pela equação de Fokker-Planck (FPSA) como alternativas de aproximações para serem usadas no método SA.

3.2.1 Iteração de Fonte (SI)

A partir da formulação na equação (3.37), antes de aproximarmos $\phi_l(x)$ pelo método S_N, podemos definir a formulação operacional da equação do transporte da seguinte forma:

$$\mathcal{L}\psi(x,\mu) = \left(\mu\frac{\partial}{\partial x} + \sigma_t(x)\right)\psi(x,\mu) \tag{3.48}$$

e

$$S\psi(x,\mu) = \left(\sum_{l=0}^{L}\frac{2l+1}{2}\sigma_{s,l}(x)P_l(\mu)\int_{-1}^{1}P_l(\mu)(\cdot)d\mu\right)\psi(x,\mu). \tag{3.49}$$

Dessa forma, é possível escrever a equação (3.37) na forma operacional como

$$\mathcal{L}\psi(x,\mu) = S\psi(x,\mu) + Q(x,\mu). \tag{3.50}$$

Note que na forma operacional da equação (3.50), tanto o operador $\mathcal{L}$ quanto o operador S, são operadores lineares de dimensão infinita. Após uma discretização angular, utilizando a aproximação S_N e uma discretização espacial, ambos se tornam operadores lineares de dimensão finita, portanto possuindo uma representação matricial.

O método da Iteração de Fonte ou *Source Iteration* (SI), consiste em atrasar o termo de espalhamento $S\psi(x,\mu)$ por uma iteração, obtendo o seguinte esquema iterativo:

$$\psi^{(0)}(x,\mu) = \psi_0(x,\mu), \tag{3.51}$$

$$\mathcal{L}\psi^{(\ell+1)}(x,\mu) = S\psi^{(\ell)}(x,\mu) + Q, \tag{3.52}$$

com $\psi_0(x,\mu)$ uma estimativa inicial para o fluxo angular (em geral tomamos $\psi_0(x,\mu) = 0$). O esquema SI funciona da seguinte maneira: uma estimativa para os momentos do fluxo é encontrada a partir da suposição inicial do fluxo angular e da relação mostrada na Equação (3.51). Em seguida, a equação (3.52) é resolvida para $\psi^{(\ell+1)}(x,\mu)$ invertendo o operador $\mathcal{L}$ para obter a próxima estimativa do fluxo angular. O fluxo angular da iteração $\ell+1$ é utilizado para encontrar o valor de $\phi_l(x)$ na equação (3.38), este valor então é usado para computar $S\psi^{(\ell)}$ da próxima iteração. Este processo iterativo é repetido até que algum critério de convergência seja atingido. Para problemas com baixo espalhamento e alta fuga, o método SI converge rapidamente [1]. No entanto, para problemas opticamente densos e altamente dispersivos, o SI se torna ineficiente e dispendioso, levando a uma convergência lenta [26].

3.2.2 Aceleração Sintética (SA)

Em um esforço de buscar métodos iterativos mais eficientes, desenvolveu-se uma técnica chamada Aceleração Sintética ou *Synthetic Acceleration* (SA) [19]. O método introduz um segundo passo ao método SI que é denominado passo corretor. Começamos executando uma iteração de fonte que estimará um valor intermediário $\psi^{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)}(x,\mu)$

$$\mathcal{L}\psi(x,\mu)^{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)} = S\psi^{(\ell)}(x,\mu) + Q(x,\mu). \tag{3.53}$$

Usamos o cálculo do passo intermediário $\psi^{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)}$ para calcular o valor de $\psi^{(\ell+1)}$ no passo de correção, a ideia é que a aproximação na iteração $\ell+1$ será mais acurada do que quando executamos apenas a Iteração de Fonte. Para chegarmos na formulação do método SA, primeiramente, subtraímos (3.52) de (3.50) para obter

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}\left(\psi(x,\mu) - \psi^{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)}(x,\mu)\right) &= S\left(\psi(x,\mu) - \psi^{(\ell)}(x,\mu)\right) \\
&= S\left(\psi(x,\mu) - \psi^{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)}(x,\mu)\right) && (3.54)\\
&+ S\left(\psi^{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)}(x,\mu) - \psi^{(\ell)}(x,\mu)\right). && (3.55)
\end{aligned}$$

Podemos rearranjar os termos da equação (3.55) para obter

$$(\mathcal{L}-S)\left(\psi(x,\mu) - \psi^{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)}(x,\mu)\right) = S\left(\psi^{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)}(x,\mu) - \psi^{(\ell)}(x,\mu)\right), \tag{3.56}$$

e assim, chegamos, explicitamente, a uma expressão para $\psi(x,\mu)$

$$\psi(x,\mu) = \psi^{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)}(x,\mu) + (\mathcal{L}-S)^{-1}S\left(\psi^{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)}(x,\mu) - \psi^{(\ell)}(x,\mu)\right). \tag{3.57}$$

Note que na equação (3.57) obtivemos o valor exato para $\psi(x,\mu)$. Porém, precisamos avaliar o operador do transporte completo $(\mathcal{L}-S)^{-1}$ mas, neste caso, poderíamos resolver o problema original simplesmente avaliando a expressão $\psi(x,\mu) = (\mathcal{L}-S)^{-1}Q(x,\mu)$ a partir da equação (3.50). Então, vamos tomar $\mathcal{P}$ de forma que

$$\mathcal{P} \approx \mathcal{L} - S, \tag{3.58}$$

com a condição de que $\mathcal{P}^{-1}$ seja mais fácil de avaliar que $(\mathcal{L}-S)^{-1}$. Aqui, a expressão 'mais fácil de avaliar' está sendo usada no sentido de que, após discretizarmos o problema nas variáveis angular e espacial, o sistema linear resultante de $\mathcal{P}$ é menos computacionalmente custoso do que o sistema linear resultante de $\mathcal{L} - S$.

A expressão completa para o método de aceleração sintética SA é dada pela seguinte iteração:

$$\text{Predição: } \mathcal{L}\psi^{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)}(x,\mu) = S\psi^{(\ell)}(x,\mu) + Q(x,\mu), \tag{3.59}$$

$$\text{Correção: } \psi^{(\ell+1)}(x,\mu) = \psi^{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)}(x,\mu) + \mathcal{P}^{-1}S\left(\psi^{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)}(x,\mu) - \psi^{(\ell)}(x,\mu)\right). \tag{3.60}$$

Aqui, $\mathcal{P} \approx \mathcal{L} - S$ é qualquer aproximação para o operador completo do transporte $\mathcal{L} - S$, isto é, para qualquer que seja $\mathcal{P}$ desde que o esquema SA nas equações (3.59) e (3.60) convirjam para alguma solução, esta solução é uma aproximação para a solução do problema original [1]. O método é iterado até que algum critério de convergência escolhido seja alcançado.

Como um exemplo, podemos tomar P na equação (3.60) como a aproximação da difusão como visto na equação (3.16). Isto é,

$$\mathcal{P} = \left(\frac{1}{3(\sigma_{s,1} - \sigma_t)}\frac{d^2}{dx^2} + \sigma_a\right)\int_{-1}^{1}(\cdot)d\mu. \tag{3.61}$$

O método de Aceleração Sintética por Difusão (3.61) é um dos mais amplamente usados e foi a primeira aproximação a ser tomada para o operador $\mathcal{P}$ por Kopp [19]. Depois destes resultados iniciais usando a equação da difusão como aproximação, [2] mostrou que o uso da aproximação por difusão no método SA é um algoritmo que converge rapidamente para malhas espaciais grossas e cunhou o termo Aceleração Sintética por Difusão, ou *Diffusion Synthetic Acceleration.* Ainda, também é possível tomar outras aproximações como Aceleração Sintética por Transporte, ou *Transport Synthetic Acceleration* (TSA) [1]. O método SA consiste em aplicar uma iteração de fonte, passo preditor (3.59), e em seguida corrigimos

acrescentando uma correção como na equação (3.60). Para alguns casos, embora tenhamos aumentado a complexidade de cada iteração, o número de iterações é significativamente reduzido caso tenhamos escolhido uma aproximação $\mathcal{P}$ adequada para o problema, levando a uma aceleração na convergência significativa em relação ao método não acelerado SI.

3.2.3 Aceleração Sintética por Fokker-Planck (FPSA)

O método de aceleração sintética por Fokker-Planck vem recebendo recente atenção [18, 26, 27], consistindo em usar a aproximação de Fokker-Planck (3.36) como operador $\mathcal{P}$ na equação (3.60). Ainda, [18] aborda o uso de um termo de consistência no método (FPSA) dando origem ao método modificado de aceleração sintética por Fokker-Planck ou ainda *modified Fokker-Planck synthetic acceleration* (MFPA) que permite o acoplamento de uma equação ao problema de transporte de partículas, permitindo o tratamento de problemas multifísicos. A vantagem do método (FSPA) é que a aproximação de Fokker-Planck é uma aproximação para problemas anisotrópicos de pico avançando, quando $\mu \to 1$, sendo então um bom candidato a aproximação $\mathcal{P}$ do operador completo do transporte quando estamos considerando um problema nestas condições.

A partir da equação (3.36) podemos definir $\mathcal{P}$ como sendo

$$\mathcal{P} = \mu\frac{\partial}{\partial x} + \sigma_a(x) - \frac{\sigma_{tr}(x)}{2}\frac{\partial}{\partial \mu}(1-\mu^2)\frac{\partial}{\partial \mu}. \tag{3.62}$$

Agora, substituindo (3.62) em (3.60) obtemos o esquema completo de aceleração sintética por Fokker-Planck (FPSA)

$$\begin{aligned} &\text{Predição: } \mathcal{L}\psi^{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)}(x,\mu) = S\psi^{(\ell)}(x,\mu) + Q(x,\mu), \\ &\text{Correção: } \psi^{(\ell+1)}(x,\mu) = \psi^{\left(\ell+\frac{1}{2}\right)}(x,\mu) \end{aligned} \tag{3.63}$$

$$+\left(\mu\frac{\partial}{\partial x}+\sigma_a(x)-\frac{\sigma_{tr}(x)}{2}\frac{\partial}{\partial\mu}(1-\mu^2)\frac{\partial}{\partial\mu}\right)^{-1} S\left(\psi^{(\ell+\frac{1}{2})}(x,\mu)-\psi^{(\ell)}(x,\mu)\right). \tag{3.64}$$

O método FPSA é executado de maneira similar àquela que foi discutida para o método DSA nas equações (3.59) e (3.60). Executamos uma iteração de fonte resolvendo (3.63). Logo após, corrigimos o resultado obtido acrescentando um termo como na equação (3.64), que consiste em resolver a equação da aproximação de Fokker-Planck. As iterações ocorrem até que algum critério de convergência escolhido seja atingido.

4 DISCRETIZAÇÃO

Vamos apresentar neste capítulo a discretização espacial e angular da equação do transporte bem como da equação de Fokker-Planck. A discretização espacial será feita através de Elementos Finitos Descontínuos [25], que divide o domínio espacial em uma série de células espaciais. Já na discretização angular podemos usar o método *moment preserving discretization* (MPD) que preserva até $N-1$ momentos da versão discreta da equação de Fokker-Planck pela aproximação S_N, com N sendo a ordem do método S_N [18, 26, 27]. No nosso caso, usamos o MPD para a discretização angular da equação de Fokker-Planck. Fornecemos uma formulação matricial completa, incorporando as discretizações espaciais e angular em um único sistema matricial. Além disso, fornecemos também algoritmos para a implementação dos métodos de Iteração de Fonte (SI) e Aceleração Sintética por Fokker-Planck (FPSA).

4.1 Discretização Espacial

Para a discretização espacial das equações S_N usaremos o método dos Elementos Finitos Descontínuos [18, 22, 25, 26, 37]. Dividiremos o domínio espacial $[x_L, x_R]$ em uma sequência de células espaciais (x_i^L, x_i^R) para $i = 1, \ldots, K$ de forma que $x_1^L = x_L$ e $x_K^R = x_R$. Vamos definir

$$\psi_i^L = \psi(x_i^L, \mu_n), \tag{4.1}$$

$$\psi_i^R = \psi(x_i^R, \mu_n). \tag{4.2}$$

Observe que a notação deixa implícito que o fluxo angular está sendo avaliado no ângulo μ_n, quando não for o caso, enunciaremos com o ângulo em questão.

Ainda, introduzimos a seguinte aproximação para o fluxo angular em cada uma das i-células como uma combinação linear de uma base de funções definidas em x da seguinte forma

$$\psi_i(x) = \psi_i^L B_i^L(x) + \psi_i^R B_i^R(x), \tag{4.3}$$

com

$$B_i^L(x) = \frac{x_i^R - x}{\Delta x_i}, \tag{4.4}$$

$$B_i^R(x) = \frac{x - x_i^L}{\Delta x_i}. \tag{4.5}$$

com

$$\Delta x_i = x_i^R - x_i^L. \tag{4.6}$$

Note que as funções da base são definidas de maneira a respeitar a seguinte relação

$$B_i^L(x_i^L) = 1, \tag{4.7}$$

$$B_i^L(x_i^R) = 0, \tag{4.8}$$

$$B_i^R(x_i^L) = 0, \tag{4.9}$$

$$B_i^R(x_i^R) = 1. \tag{4.10}$$

Vamos construir os resíduos ponderados a partir da equação (3.40). Isto é, rearranjamos os termos da equação (3.40) de forma que a equação seja nula. Considerando a equação (3.40) restrita ao domínio espacial da i-ésima célula, podemos aproximar $\psi(x, \mu_n)$ por $\psi_i(x)$ da equação (4.3). A partir daí, obtemos duas equações, uma delas multiplicando a equação (3.40) rearranja e aproximada por (4.3) pela função da base $B_i^L(x)$ e a outra multiplicando pela função da base $B_i^R(x)$. Por fim, integramos ambas as funções no domínio (x_i^L, x_i^R) . Temos então,

$$\int_{x_i^L}^{x_i^R} B_i^L(x) \left(\mu_n \frac{d\psi_i(x)}{dx} + \sigma_t \psi_i(x) - \sum_{l=0}^{L} \frac{2l+1}{2} \sigma_{s,l} P_l(\mu_n) \phi_l(x) - Q(x, \mu_n) \right) dx = 0, \tag{4.11}$$

$$\int_{x_i^L}^{x_i^R} B_i^R(x)\left(\mu_n\frac{d\psi_i(x)}{dx}+\sigma_t\psi_i(x)-\sum_{l=0}^{L}\frac{2l+1}{2}\sigma_{s,l}P_l(\mu_n)\phi_l(x)-Q(x,\mu_n)\right)dx=0 \tag{4.12}$$

para $n=1,\ldots,N$. Note que, nas equações (4.11) e (4.12), retiramos a dependência em x dos termos σ_t e σ_s, isto foi feito para facilitar na notação a seguir, visto que o problema que trataremos mais adiante é homogêneo em x. Porém, esta dependência em x pode ser carregada nas equações que seguiram, lembrando de tomar $\sigma_t(x_i^L)$ e $\sigma_s(x_i^L)$ quando estivermos tratando do lado esquerdo da célula espacial e $\sigma_t(x_i^R)$ e $\sigma_t(x_i^R)$ quando estivermos tratando do lado direito da célula espacial.

Seguimos inserindo a definição (4.3) nas equações (4.11) e (4.12) e calculando as integrais. As direções, ou ainda, os sinais de μ_n definem duas equações a partir de (4.11), uma para $\mu_n>0$ e outra para $\mu_n<0$. Da mesma forma, temos duas equações a partir de (4.12), com $\mu_n>0$ e $\mu_n<0$.

Para por $\mu_n>0$ avaliar as integrais em (4.11) e (4.12), resulta em duas equações, respectivamente,

$$\begin{aligned}&\left(\frac{\mu_n}{2}+\frac{\sigma_t\Delta x_i}{3}\right)\psi_i^L+\left(\frac{\mu_n}{2}+\frac{\sigma_t\Delta x_i}{6}\right)\psi_i^R\\&=\mu_n\psi_{i-1}^R(\mu_n)+\sum_{l=0}^{L}\frac{2l+1}{2}\sigma_{s,l}P_l(\mu_n)\left(\frac{\Delta x_i}{3}\phi_l(x_i^L)+\frac{\Delta x_i}{6}\phi_l(x_i^R)\right)+Q_i^L(\mu_n)\end{aligned} \tag{4.13}$$

e

$$\begin{aligned}&\left(-\frac{\mu_n}{2}+\frac{\sigma_t\Delta x_i}{6}\right)\psi_i^L+\left(\frac{\mu_n}{2}+\frac{\sigma_t\Delta x_i}{3}\right)\psi_i^R\\&=\sum_{l=0}^{L}\frac{2l+1}{2}\sigma_{s,l}P_l(\mu_n)\left(\frac{\Delta x_i}{6}\phi_l(x_i^L)+\frac{\Delta x_i}{3}\phi_l(x_i^R)\right)+Q_i^R(\mu_n)\end{aligned} \tag{4.14}$$

com

$$Q_i^L(\mu_n)=\int_{x_i^L}^{x_i^R} B_i^L(x)Q(x,\mu_n)dx, \tag{4.15}$$

$$Q_i^R(\mu_n)=\int_{x_i^L}^{x_i^R} B_i^R(x)Q(x,\mu_n)dx. \tag{4.16}$$

Na forma matricial,

$$\begin{bmatrix} \frac{\mu_n}{2} + \frac{\sigma_t \Delta x_i}{3} & \frac{\mu_n}{2} + \frac{\sigma_t \Delta x_i}{6} \\ -\frac{\mu_n}{2} + \frac{\sigma_t \Delta x_i}{6} & \frac{\mu_n}{2} + \frac{\sigma_t \Delta x_i}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_i^L \\ \psi_i^R \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} \mu_n \psi_{i-1}^R \\ 0 \end{bmatrix} + \sum_{l=0}^{L} \frac{2l+1}{2} \sigma_{s,l} P_l(\mu_n) \begin{bmatrix} \frac{\Delta x_i}{3} & \frac{\Delta x_i}{6} \\ \frac{\Delta x_i}{6} & \frac{\Delta x_i}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_l(x_i^L) \\ \phi_l(x_i^R) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} Q_i^L(\mu_n) \\ Q_i^R(\mu_n) \end{bmatrix}. \quad (4.17)$$

Para $\mu_n > 0$, ψ_i^L e ψ_i^R são avaliados a partir de ψ_{i-1}^R, ou seja, varremos o domínio espacial da esquerda para a direita, até atingirmos a K-ésima célula espacial.

Para $\mu_n < 0$, obtemos as seguintes expressões avaliando as integrais em (4.11) e (4.12), respectivamente,

$$\left(-\frac{\mu_n}{2} + \frac{\sigma_t \Delta x_i}{3}\right) \psi_i^L + \left(\frac{\mu_n}{2} + \frac{\sigma_t \Delta x_i}{6}\right) \psi_i^R$$
$$= \sum_{l=0}^{L} \frac{2l+1}{2} \sigma_{s,l} P_l(\mu_n) \left(\frac{\Delta x_i}{3} \phi_l(x_i^L) + \frac{\Delta x_i}{6} \phi_l(x_i^R)\right) + Q_i^L(\mu_n) \quad (4.18)$$

e

$$\left(-\frac{\mu_n}{2} + \frac{\sigma_t \Delta x_i}{6}\right) \psi_i^L + \left(-\frac{\mu_n}{2} + \frac{\sigma_t \Delta x_i}{3}\right) \psi_i^R$$
$$= -\mu_n \psi_{i-1}^R + \sum_{l=0}^{L} \frac{2l+1}{2} \sigma_{s,l} P_l(\mu_n) \left(\frac{\Delta x_i}{6} \phi_l(x_i^L) + \frac{\Delta x_i}{3} \phi_l(x_i^R)\right) + Q_i^R(\mu_n), \quad (4.19)$$

com forma matricial

$$\begin{bmatrix} -\frac{\mu_n}{2} + \frac{\sigma_t \Delta x_i}{3} & \frac{\mu_n}{2} + \frac{\sigma_t \Delta x_i}{6} \\ -\frac{\mu_n}{2} + \frac{\sigma_t \Delta x_i}{6} & -\frac{\mu_n}{2} + \frac{\sigma_t \Delta x_i}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_i^L \\ \psi_i^R \end{bmatrix}$$
$$= \begin{bmatrix} 0 \\ -\mu_n \psi_{i+1}^L \end{bmatrix} + \sum_{l=0}^{L} \frac{2l+1}{2} \sigma_{s,l} P_l(\mu_n) \begin{bmatrix} \frac{\Delta x_i}{3} & \frac{\Delta x_i}{6} \\ \frac{\Delta x_i}{6} & \frac{\Delta x_i}{3} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \phi_l(x_i^L) \\ \phi_l(x_i^R) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} Q_i^L(\mu_n) \\ Q_i^R(\mu_n) \end{bmatrix}. \quad (4.20)$$

Para $\mu_n < 0$, ψ_i^L e ψ_i^R são avaliados a partir de ψ_{i+1}^R, ou seja, varremos o domínio espacial da direita para a esquerda, até atingirmos a primeira célula espacial.

Vamos agora calcular os resíduos ponderados para a equação de Fokker-Planck (3.36). Analogamente as equações (4.11) e (4.12), temos as seguintes equações para cada célula espacial i

$$\int_{x_i^L}^{x_i^R} B_i^L(x)\left(\mu_n\frac{d\psi_i(x)}{dx}+\sigma_a\psi_i(x)-\frac{\sigma_{tr}}{2}\nabla_n^2\psi_i(x)-Q(x,\mu_n)\right)dx=0, \tag{4.21}$$

$$\int_{x_i^L}^{x_i^R} B_i^R(x)\left(\mu_n\frac{d\psi_i(x)}{dx}+\sigma_a\psi_i(x)-\frac{\sigma_{tr}}{2}\nabla_n^2\psi_i(x)-Q(x,\mu_n)\right)dx=0. \tag{4.22}$$

Da mesma forma que antes, os sinais de μ_n definem duas equações para cada uma das equações (4.21) e (4.22). Resolvendo as integrais em (4.21) e (4.22) e rearranjando os resultando, podemos escrever uma equação matricial como (4.17) para $\mu_n > 0$ da seguinte forma

$$\left(\begin{bmatrix} \frac{\mu_n}{2}+\frac{\sigma_a\Delta x_i}{3} & \frac{\mu_n}{2}+\frac{\sigma_t\Delta x_i}{6} \\ -\frac{\mu_n}{2}+\frac{\sigma_a\Delta x_i}{6} & \frac{\mu_n}{2}+\frac{\sigma_t\Delta x_i}{3} \end{bmatrix} - \frac{\sigma_{tr}}{2}\begin{bmatrix} \frac{1}{3}\nabla_n^2 & \frac{1}{6}\nabla_n^2 \\ \frac{1}{6}\nabla_n^2 & \frac{1}{3}\nabla_n^2 \end{bmatrix}\right)\begin{bmatrix}\psi_i^L \\ \psi_i^R\end{bmatrix} \tag{4.23}$$

$$=\begin{bmatrix}\mu_n\psi_{i-1}^R \\ 0\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}Q_i^L(\mu_n) \\ Q_i^R(\mu_n)\end{bmatrix} \tag{4.24}$$

e para $\mu_n < 0$

$$\left(\begin{bmatrix} -\frac{\mu_n}{2}+\frac{\sigma_a\Delta x_i}{3} & \frac{\mu_n}{2}+\frac{\sigma_t\Delta x_i}{6} \\ -\frac{\mu_n}{2}+\frac{\sigma_a\Delta x_i}{6} & -\frac{\mu_n}{2}+\frac{\sigma_t\Delta x_i}{3} \end{bmatrix} - \frac{\sigma_{tr}}{2}\begin{bmatrix} \frac{1}{3}\nabla_n^2 & \frac{1}{6}\nabla_n^2 \\ \frac{1}{6}\nabla_n^2 & \frac{1}{3}\nabla_n^2 \end{bmatrix}\right)\begin{bmatrix}\psi_i^L \\ \psi_i^R\end{bmatrix} \tag{4.25}$$

$$=\begin{bmatrix}0 \\ -\mu_n\psi_{i+1}^L\end{bmatrix}+\begin{bmatrix}Q_i^L(\mu_n) \\ Q_i^R(\mu_n)\end{bmatrix}. \tag{4.26}$$

Note que as equações matriciais em (4.23) e (4.25) são semelhantes aquelas em (4.17) e (4.20). Portanto, o processo descrito para resolver (4.17) e (4.20) também se aplica aqui.

4.2 Discretização Angular

No que se trata da discretização da equação de Fokker-Planck para os ângulos, [42] desenvolveu uma técnica de discretização chamada *Moments Preserving*

discretization (MPD) que preserva até N momentos de Legendre do fluxo angular para a equação de Fokker-Planck sendo uma técnica adequada para problemas de pico avançado e alto espalhamento.

Para abordarmos o método (MPD) começamos lembrando da equação (3.31) que nos garante que $P_l(\mu)$ é uma autofunção do operador de Fokker-Planck $\mathcal{L}_{FP}$, isto é,

$$\begin{aligned}\mathcal{L}P_l(\mu) &= \frac{\partial}{\partial\mu}(1-\mu^2)\frac{\partial}{\partial\mu}P_l(\mu)\\ &= -l(l+1)P_l(\mu).\end{aligned} \tag{4.27}$$

Dessa forma, como o operador $\mathcal{L}$ é auto adjunto [11], dado uma função $f(\mu)$ temos que

$$\begin{aligned}\int_{-1}^{1} P_l(\mu)\left[\mathcal{L}f(\mu)\right]d\mu &= \int_{-1}^{1}\left[\mathcal{L}P_l(\mu)\right]f(\mu)d\mu\\ &= -l(l+1)\int_{-1}^{1}P_l(\mu)f(\mu)d\mu.\end{aligned} \tag{4.28}$$

Usando a quadratura de Gauss-Legendre, podemos tomar $f(\mu) = \psi(x,\mu_n)$ em (4.28) e obter a seguinte expressão

$$\sum_{n=1}^{N} w_n P_l(\mu_n)\nabla_n^2\psi(x,\mu_n) = -l(l+1)\sum_{n=1}^{N} w_n P_l(\mu_n)\psi(x,\mu_n),\ \ l = 0,1,2\ldots N-1, \tag{4.29}$$

com

$$\nabla_n^2 = \frac{\partial}{\partial\mu}(1-\mu^2)\frac{\partial}{\partial\mu}\bigg|_{\mu=\mu_n},\ \ n = 1,2,\ldots,N, \tag{4.30}$$

sendo chamado de operador de Fokker-Planck discreto, ou versão discreta do operador angular de Laplace avaliado no n-ésimo ângulo. Note que, da equação (4.29) podemos montar um sistema matricial da seguinte forma

$$\begin{bmatrix} w_1P_0(\mu_1) & w_2P_0(\mu_2) & \cdots & w_NP_0(\mu_N)\\ w_1P_1(\mu_1) & w_2P_1(\mu_2) & \cdots & w_NP_1(\mu_N)\\ \vdots & & & \\ w_1P_{N-1}(\mu_1) & w_2P_{N-1}(\mu_2) & \cdots & w_NP_{N-1}(\mu_N)\end{bmatrix}\begin{bmatrix}\nabla_1^2\psi(x,\mu_1)\\ \nabla_2^2\psi(x,\mu_2)\\ \vdots\\ \nabla_N^2\psi(x,\mu_n)\end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} -0(0+1) & & \\ & \ddots & \\ & & -N(N+1) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} w_1 P_0(\mu_1) & w_2 P_0(\mu_2) & \cdots & w_N P_0(\mu_N) \\ w_1 P_1(\mu_1) & w_2 P_1(\mu_2) & \cdots & w_N P_1(\mu_N) \\ \vdots & & & \\ w_1 P_{N-1}(\mu_1) & w_2 P_{N-1}(\mu_2) & \cdots & w_N P_{N-1}(\mu_N) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi(x,\mu_1) \\ \psi(x,\mu_2) \\ \vdots \\ \psi(x,\mu_N) \end{bmatrix}. \tag{4.31}$$

Ou ainda, podemos definir as seguintes matrizes, com dimensões $N \times N$,

$$V_{i,j} = w_j P_{i-1}(\mu_j) \tag{4.32}$$

e

$$D_{i,i} = -i(i+1). \tag{4.33}$$

com $i, j = 1, \ldots, N$. Além dos vetores,

$$\psi = [\psi(x,\mu_i)]^T, \;\; i = 1, \ldots, N \tag{4.34}$$

o vetor com as componentes do fluxo angular, e

$$\nabla^2 \psi = [\nabla_i^2 \psi(x,\mu_i)]^T, \;\; i = 1, \ldots, N \tag{4.35}$$

o vetor com as componentes do operador de Fokker-Planck discreto aplicado no n-ésimo fluxo angular. Desta forma, podemos determinar o vetor $\nabla^2\psi$ da seguinte forma

$$\nabla^2 \psi = V^{-1} D V \psi. \tag{4.36}$$

Agora, podemos escrever a equação de Fokker-Planck (3.36) na sua forma matricial para a variável angular

$$H \frac{\partial}{\partial x} \psi + \sigma_a(x)\psi - \frac{\sigma_{tr}(x)}{2} \nabla^2 \psi = Q, \tag{4.37}$$

com

$$H = diag(\mu_i), \;\; i = 1, \ldots, N \tag{4.38}$$

uma matriz diagonal com as raízes μ_i do polinômio de Legendre de ordem N e

$$Q = [Q(x,\mu_i)]^T, \;\; i = 1, \ldots, N. \tag{4.39}$$

Resolver a equação (4.37) nos garante que N momentos de Legendre do fluxo angular serão preservados. Em [26] é discutido, usando Análise de Fourier, como a preservação dos N momentos de Legendre do fluxo angular afeta a convergência do problema.

4.3 Formulação Matricial e Algoritmos

Vimos até o momento como tratar ambas as discretizações de maneira separada, isto é, dado x descrevemos a discretização angular em μ_n. Da mesma forma, dado μ, descrevemos como efetuar a discretização da i-ésima célula espacial (x_i^L, x_i^R). Vamos agora unificar estas ideias e tratar de uma discretização conjunta tanto em x quanto em μ. Na forma operacional da equação (3.50) temos um operador linear de dimensão infinita. Ao efetuarmos as discretizações em x e μ obtemos um operador linear de dimensão finita que tem, portanto, uma representação matricial. Neste caso, usando a mesma notação, definimos a expressão

$$\mathcal{L}\psi = S\psi + Q \tag{4.40}$$

como sendo a forma discreta do operador linear em (3.50), com ψ sendo o vetor contendo os $\psi(x_i^L, \mu_n)$ e $\psi(x_i^R, \mu_n)$, Q sendo o vetor com os termos da fonte $Q(x_i, \mu_n)$. Estamos, neste caso, interessados em discutir como obtemos as matrizes $\mathcal{L}$ e S da equação (4.40).

Começamos reescrevendo a expressão em (4.40) da seguinte forma

$$\mathcal{L}\psi = MM_m\Sigma D\psi + Q. \tag{4.41}$$

Note que na equação (4.41), decompomos a matriz que representa o operador S em uma série de matrizes, com D sendo a matriz que converte o vetor de fluxos angulares em um vetor de momentos do fluxo angular, Σ é a matriz que contém os momentos da seção de choque de espalhamento que são relevantes, M_m é

a chamada matriz de massa que surge da discretização espacial em elementos finitos descontínuos da equação S_N e M é a matriz que transforma o vetor de momentos do fluxo angular em um vetor com fluxos angulares.

4.3.1 Formulação da Matriz de Vazamento e Absorção

Vamos começar discutindo a formulação da matriz $\mathcal{L}$ do lado esquerdo da equação (4.41). Esta matriz representa o operador de linear que descreve as partículas que vazaram ou foram absorvidas.

Estamos considerando um problema bidimensional, com o domínio espacial $[x_L, x_R]$ subdivido em células espaciais (x_i^L, x_i^R) com $i = 1, \ldots, K$ e um conjunto de $\{\mu_n\}_{n=1}^{n=N}$, $n = 1 \ldots N$, com cada μ_n sendo uma raiz do polinômio de Legendre P_N. Para que possamos preencher a matriz $\mathcal{L}$ em (4.41), vamos definir uma enumeração da malha composta pelos valores discretos de x e μ da seguinte forma

$$j = 2N(i-1) + n, \;\; i = 1, \ldots, K, \;\; n = 1, \ldots, N. \tag{4.42}$$

A partir desta enumeração, o vetor dos fluxos angulares ψ tem a seguinte forma:

$$\begin{aligned} \psi = (&\psi(x_1^L, \mu_1), \ldots, \psi(x_1^L, \mu_N), \;\; \psi(x_1^R, \mu_1), \ldots, \psi(x_1^R, \mu_N), \ldots, \\ &\psi(x_K^L, \mu_1), \ldots, \psi(x_K^L, \mu_N), \;\; \psi(x_K^R, \mu_1), \ldots, \psi(x_K^R, \mu_N))^T, \end{aligned} \tag{4.43}$$

com $2N$ funções para cada célula espacial, N para o lado esquerdo da célula espacial em x_i^L e N para o lado direito da célula espacial em x_i^R.

Com isso, seja $\mathcal{L} = [L_{l,m}]$ a matriz da equação (4.41) com tamanho $2KN \times 2KN$ e elementos $L_{l,m}$. Para $\mu_n > 0$

$$L_{j,j} = \frac{\mu_n}{2} + \frac{\Delta x_i}{3}\sigma_t, \tag{4.44}$$

$$L_{j,j+N} = \frac{\mu_n}{2} + \frac{\Delta x_i}{6}\sigma_t, \tag{4.45}$$

$$L_{j+N,j} = -\frac{\mu_n}{2} + \frac{\Delta x_i}{6}\sigma_t, \tag{4.46}$$

$$L_{j+N,j+N} = \frac{\mu_n}{2} + \frac{\Delta x_i}{3}\sigma_t, \tag{4.47}$$

$$L_{j,j-N} = -\mu_n \tag{4.48}$$

e $\mu_n < 0$

$$L_{j,j} = -\frac{\mu_n}{2} + \frac{\Delta x_i}{3}\sigma_t, \tag{4.49}$$

$$L_{j,j+N} = \frac{\mu_n}{2} + \frac{\Delta x_i}{6}\sigma_t, \tag{4.50}$$

$$L_{j+N,j} = -\frac{\mu_n}{2} + \frac{\Delta x_i}{6}\sigma_t, \tag{4.51}$$

$$L_{j+N,j+N} = -\frac{\mu_n}{2} + \frac{\Delta x_i}{3}\sigma_t, \tag{4.52}$$

$$L_{j+N,j+2N} = \mu_n. \tag{4.53}$$

Os demais elementos da matriz $\mathcal{L}$ são nulos. As equações (4.44)-(4.47) incorporam na matriz $\mathcal{L}$ os termos da matriz do lado esquerdo da equação (4.17) e (4.48) incorpora o termo que aparece do lado direito da equação (4.17) multiplicando $\psi^R_{i-1}(\mu_n)$. De forma análoga, (4.49)-(4.52) incorporam a matriz do lado esquerdo da equação (4.20) e (4.53) incorpora o termo que multiplica $\psi^L_{i+1}(\mu_n)$.

Considere uma instância do problema onde $N = 2$ a ordem da equação S_N e $K = 3$ como sendo o número de células espaciais. Neste caso, temos a seguinte representação gráfica da matriz $\mathcal{L}$ discutidas anteriormente, onde cada quadrado em azul representa um número real não nulo na matriz, as posições onde não há um quadrado azul são nulas.

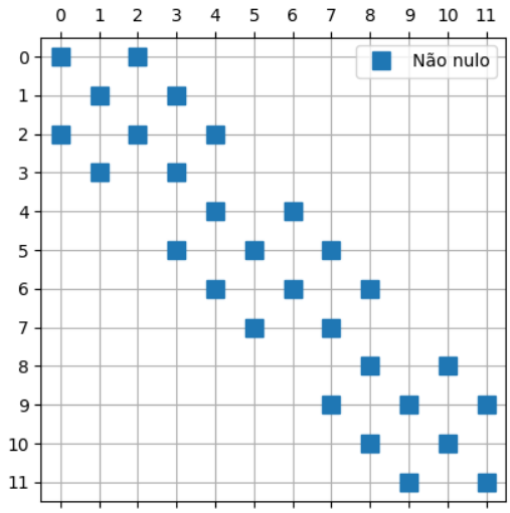

Figura 4.1: Elementos não nulos da matriz $\mathcal{L}$ para $N = 2$ e $K = 3$.

4.3.2 Formulação da Matriz de Espalhamento

Com a finalidade de montarmos as matrizes da decomposição do operador S vamos considerar as seguintes matrizes que serviram como blocos de construção para as matrizes da decomposição do operador S em (4.41).

$$\Sigma_k = diag\left(\sigma_{s,l}\right)_{l=0}^{l=N-1} \tag{4.54}$$

com $\sigma_{s,l}$ sendo os momentos do seção de choque de espalhamento da aproximação S_N definido na equação (3.22). Note que deixamos de lado a dependência em x, aqui tratamos $\sigma_{s,l}$ constante.

$$D_k = \left[w_n p_l(\mu_n)\right]_{l=0,n=1}^{l=N-1,n=N} \tag{4.55}$$

com w_n sendo o n-ésimo peso da quadratura de Gauss-Legendre e μ_n sendo a n-ésima raiz associada ao polinômio de Legendre P_N e p_l é o l-ésimo polinômio de Legendre.

$$M_k = \left[\frac{2l+1}{2} p_l(\mu_n)\right]_{n=1,l=0}^{n=N,l=N-1} \tag{4.56}$$

com p_l e μ_n sendo da mesma forma que na equação (4.55).

$$M_{mk} = \begin{bmatrix} diag(\frac{\Delta x_i}{3})_{i=1}^{i=N} & diag(\frac{\Delta x_i}{6})_{i=1}^{i=N} \\ diag(\frac{\Delta x_i}{6})_{i=1}^{i=N} & diag(\frac{\Delta x_i}{3})_{i=1}^{i=N} \end{bmatrix}. \tag{4.57}$$

A matriz em (4.57) é uma matriz em blocos formada por quatro matrizes diagonais de dimensões $N \times N$. Esta matriz está relacionada as termos contendo os intervalos da malha, Δx_i, que podem ser encontrados do lado direito das equações (4.17) e (4.20).

Definimos agora as matrizes I_c e I_v, ambas matrizes são matrizes identidade com I_c tendo dimensão $K \times K$, com K sendo o número de células espaciais do problema e I_v uma matriz 2×2 que corresponde ao número de vértices em cada célula espacial. Considere agora $A \otimes B$ como denotando o Produto de Kronecker entre as matrizes A e B. Considere agora,

$$I_{cv} = I_c \otimes I_v. \tag{4.58}$$

A matriz I_{cv} tem dimensão $2K \times 2K$ e a estrutura necessária para que possamos, juntamente com Σ_k, D_k, M_k e M_{mk}, formar as matrizes da decomposição do operador S em (4.41).

Juntando aquilo que desenvolvemos até agora, podemos escrever as matrizes da decomposição do operador S da equação (4.41) simplesmente como

$$\Sigma = I_{cv} \otimes \Sigma_k, \tag{4.59}$$

$$D = I_{cv} \otimes D_k, \tag{4.60}$$

$$M = I_{cv} \otimes M_k, \tag{4.61}$$

$$M_m = I_c \otimes M_{mk}. \tag{4.62}$$

As representações gráficas para as matrizes discutidas anteriormente, utilizando o mesmo exemplo anterior com parâmetros $N = 2$ e $K = 3$ são as seguintes:

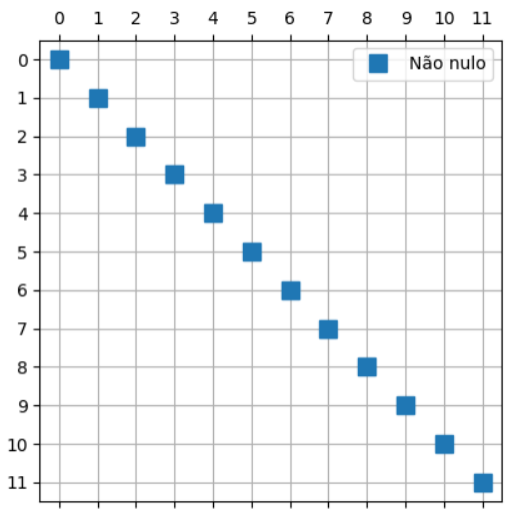

Figura 4.2: Elementos não nulos da matriz Σ para $N = 2$ e $K = 3$.

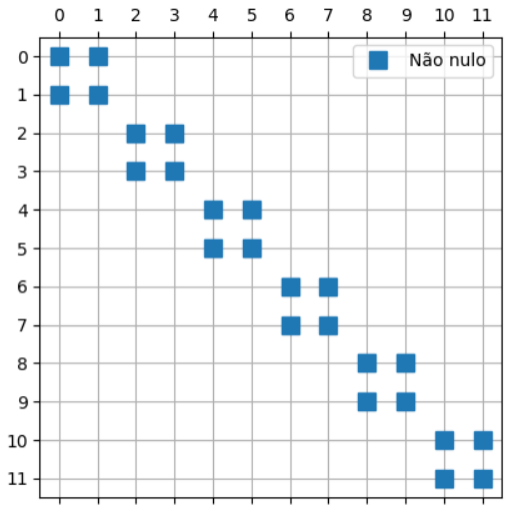

Figura 4.3: Elementos não nulos da matriz D para $N = 2$ e $K = 3$.

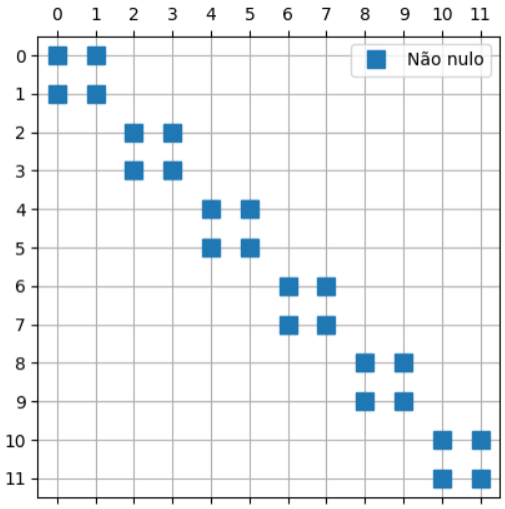

Figura 4.4: Elementos não nulos da matriz M para $N = 2$ e $K = 3$.

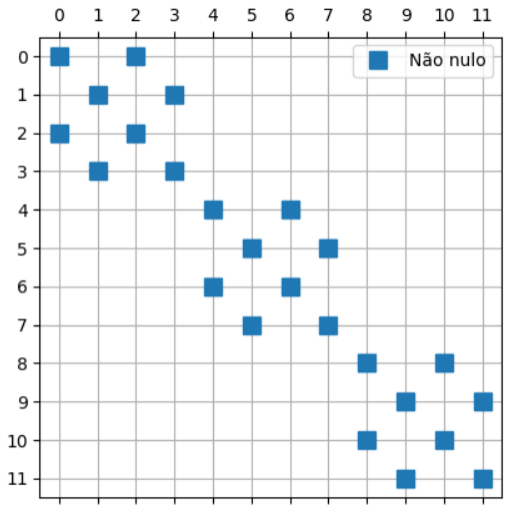

Figura 4.5: Elementos não nulos da matriz M_m para $N = 2$ e $K = 3$.

Podemos também olhar para o produto de todas estas matrizes que compões o operador S na equação (4.41)

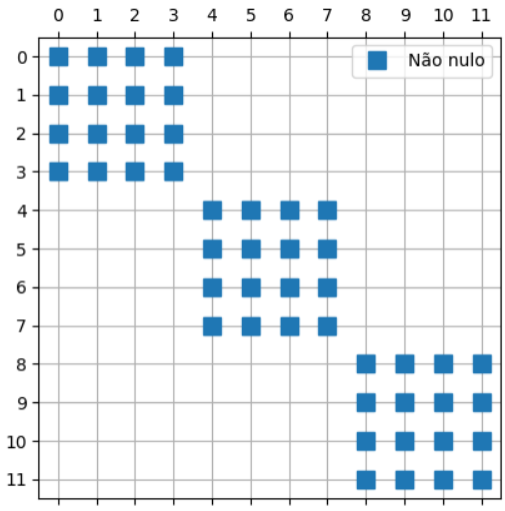

Figura 4.6: Elementos não nulos da matriz $S = MM_m\Sigma D$ para $N = 2$ e $K = 3$.

4.3.3 Matrizes Para Aproximação de Fokker-Planck

A partir da equação (4.37), vamos definir os seguintes operadores lineares:

$$\mathcal{L}_{FP} = H\frac{\partial}{\partial x} + \sigma_a, \tag{4.63}$$

$$\mathcal{F}_{FP} = \frac{\sigma_{tr}}{2}\nabla^2. \tag{4.64}$$

Neste caso, $\mathcal{L}_{FP}$ representa o gradiente espacial e absorção e $\mathcal{F}_{FP}$ representa o operador angular de Legendre multiplicado por $\frac{\sigma_{tr}}{2}$. Agora, podemos reescrever a equação em (4.37) como

$$\mathcal{L}_{FP}\psi - \mathcal{F}_{FP}\psi = Q. \tag{4.65}$$

Estamos interessados agora na formulação de ambas as matrizes $\mathcal{L}_{FP}$ e $\mathcal{F}_{FP}$.

Vamos começar pela matriz $\mathcal{L}_{FP}$. A matriz $\mathcal{L}_{FP}$ na equação (4.63) tem expressão muito semelhante a matriz $\mathcal{L}$ na equação (4.40) a úncia diferença é que

no lugar de σ_t colocamos σ_a como pode ser observado nas equações (4.23) e (4.25). Neste caso, seja $\mathcal{L}_{FP} = \left[L^{FP}_{l,m}\right]$ a matriz $\mathcal{L}_{FP}$ com elementos $L^{FP}_{l,m}$. Temos, para $\mu_n > 0$

$$L^{FP}_{j,j} = \frac{\mu_n}{2} + \frac{\Delta x_i}{3}\sigma_a, \tag{4.66}$$

$$L^{FP}_{j,j+N} = \frac{\mu_n}{2} + \frac{\Delta x_i}{6}\sigma_a, \tag{4.67}$$

$$L^{FP}_{j+N,j} = -\frac{\mu_n}{2} + \frac{\Delta x_i}{6}\sigma_a, \tag{4.68}$$

$$L^{FP}_{j+N,j+N} = \frac{\mu_n}{2} + \frac{\Delta x_i}{3}\sigma_a, \tag{4.69}$$

$$L^{FP}_{j,j-N} = -\mu_n. \tag{4.70}$$

E, para $\mu_n < 0$,

$$L^{FP}_{j,j} = -\frac{\mu_n}{2} + \frac{\Delta x_i}{3}\sigma_a, \tag{4.71}$$

$$L^{FP}_{j,j+N} = \frac{\mu_n}{2} + \frac{\Delta x_i}{6}\sigma_a, \tag{4.72}$$

$$L^{FP}_{j+N,j} = -\frac{\mu_n}{2} + \frac{\Delta x_i}{6}\sigma_a, \tag{4.73}$$

$$L^{FP}_{j+N,j+N} = -\frac{\mu_n}{2} + \frac{\Delta x_i}{3}\sigma_a, \tag{4.74}$$

$$L^{FP}_{j+N,j+2N} = \mu_n. \tag{4.75}$$

Os demais elementos da matriz $\mathcal{L}_{FP}$ são nulos.

Agora que já temos a formulação da matriz $\mathcal{L}_{FP}$ vamos focar em formular a matriz $\mathcal{F}_{FP}$ na equação (4.65). Esta matriz representa o operador de Fokker-Planck discreto ou também chamado de versão discreta do operador de Laplace.

Da equação (4.36) temos que o operador de Fokker-Planck discreto tem a seguinte expressão:

$$\nabla^2 = V^{-1}DV. \tag{4.76}$$

Queremos montar a matriz $\mathcal{F}_{FP}$ que irá representar a matriz ∇^2 para o problema de uma maneira geral, isto é, para todos os pontos da malha espacial.

Para isso, podemos usar uma abordagem semelhante aquela que foi usada para para a montagem do operador S decomposto na equação (4.41).

Começamos definindo a seguinte matriz:

$$M'_{mk} = \begin{bmatrix} diag(\frac{1}{3})_{i=1}^{i=N} & diag(\frac{1}{6})_{i=1}^{i=N} \\ diag(\frac{1}{6})_{i=1}^{i=N} & diag(\frac{1}{3})_{i=1}^{i=N} \end{bmatrix} \tag{4.77}$$

e a matriz

$$M'_m = I_c \otimes M'_{mk}, \tag{4.78}$$

com I_c tendo a mesma definição que na equação (4.58).

Note que a matriz na equação (4.77) é semelhante a matriz M_{mk} na equação (4.57), porém no lugar de Δx_i temos 1. Esta matriz incorpora os escalares que multiplicam os termos ∇_n^2 na matriz do operador de Fokker-Planck do lado esquerdo das equações (4.23) e (4.25).

Definida a matriz M'_m, escrevemos a matriz $\mathcal{F}_{FP}$ da seguinte forma:

$$\mathcal{F}_{FP} = M'_m \left(I_{cv} \otimes \frac{\sigma_{tr}}{2} \nabla^2 \right), \tag{4.79}$$

com I_{cv} tendo a mesma formulação que na equação (4.58). Esta matriz segue uma formulação semelhante aquelas para as equações (4.60) e (4.62) e incorpora o operador de Fokker-Planck discreto para todos os pontos espaciais da malha.

Da mesma forma que fizemos nos casos anteriores, considere uma instância do problema com parâmetros $N = 2$ e $K = 3$. Vamos olhar para as representações gráficas das matrizes $\mathcal{L}_{FP}$ e $\mathcal{F}_{FP}$.

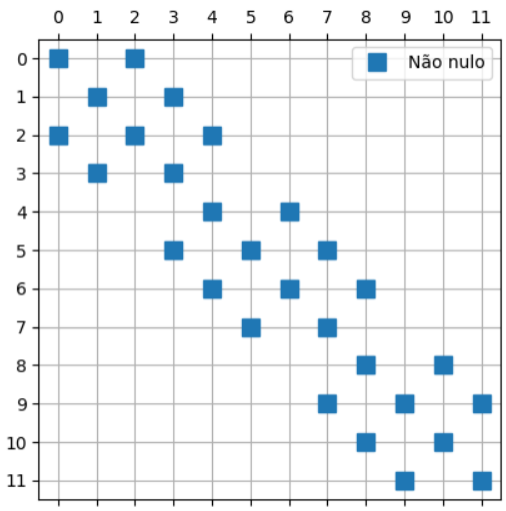

Figura 4.7: Elementos não nulos da matriz $\mathcal{L}_{FP}$ para $N = 2$ e $K = 3$.

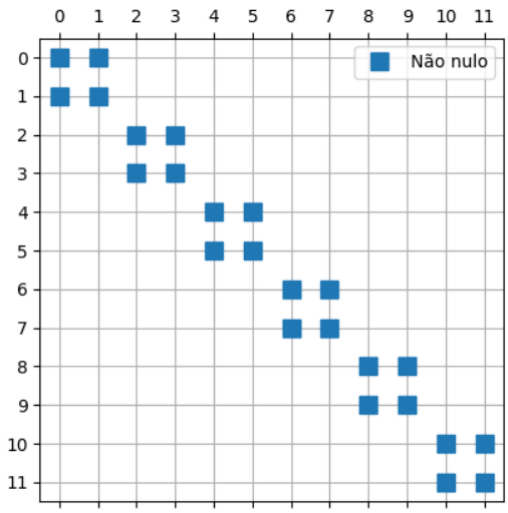

Figura 4.8: Elementos não nulos da matriz $\mathcal{F}_{FP}$ para $N = 2$ e $K = 3$.

4.3.4 Algoritmos

Agora que já temos as formulações de todas as matrizes de interesse para o problema, vamos tratar de como usamos estas matrizes para implementar os métodos iterativos da Iteração de Fonte (SI) das equações (3.51) e (**??**) bem como o método iterativo de aceleração para o esquema SI, chamado de Aceleração Sintética por Fokker-Planck (FPSA) nas equações (3.63) e (3.64).

O algoritmo para o método SI é da seguinte forma:

Algoritmo 1: Algoritmo para Iteração de Fonte (SI)

Input: $i_{\max}$ (número máximo de iteraões),

M, M_m, S, $\mathcal{L}$, D (matrizes),

$\phi^0_{LR_SI}$ (valor inicial para o fluxo escalar),

Q (fonte),

tol (tolerância para o critério de parada)

Output: ϕ_{LR_SI} (solução aproximada)

```
Inicialização;
```
$\phi_{LR_SI} \leftarrow \phi^0_{LR_SI}$;
```
Iteração de Fonte;
```
for $i \leftarrow 1$ **to** i_{max} **do**

  $b \leftarrow M \cdot M_m \cdot S \cdot \phi_{LR_SI} + Q$;

  $\psi \leftarrow \mathcal{L}^{-1} \cdot b$;

  $\phi_{LR_SI} \leftarrow D \cdot \psi$;

  err $\leftarrow \frac{||D \cdot \psi - \phi_{LR_SI}||_2}{||D \cdot \psi||_2}$;

  if $err < tol$ **then**

    break;

  end

end

Agora, o algoritmo para o método FPSA é da seguinte forma:

Algoritmo 2: Algoritmo para Aceleração Sintética por Fokker-Planck (FPSA)

Input: $i_{\max}$ (número máximo de iterações),
M, M_m, S, $\mathcal{L}$, D (matrizes),
$\mathcal{L}_{FP}$, $\mathcal{F}_{FP}$ (matrizes para a correção FPSA),
$\phi^0_{LR_FPSA}$ (valor inicial para o fluxo escalar),
Q (fonte),
tol (tolerância para o critério de parada)
Output: ϕ_{LR_FPSA} (solução aproximada)

```
Pré-cálculo;
T ← D · L^{-1} · M · S · M_m;
f ← D · L^{-1} · Q;
φ_{LR_FPSA} ← φ^0_{LR_FPSA};
Iteração FPSA;
for i ← 1 to i_max do
    Passo SI;
    y ← φ_{LR_FPSA};
    φ_{LR_FPSA} ← T · y + f;
    Passo de correção FPSA;
    r ← M · S · M_m · (φ_{LR_FPSA} − y);
    φ ← D · (L_FP − F_FP)^{-1} · r;
    φ_{LR_FPSA} ← φ_{LR_FPSA} + φ;
    err ← ||φ_{LR_FPSA} − y||_2 / ||y||_2;
    if err < tol then
        break;
    end
end
```

Com ambos os algoritmos acima, podemos computar as aproximações para o fluxo escalar.

5 RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo introduziremos os resultados numéricos comparando o método FPSA contra métodos não acelerados como SI e GMRES [35] e também com o método acelerado DSA. Aqui, escolhemos o GMRES como um método de comparação que não acelera os momentos do fluxo, servindo então como uma comparação de um método que não tem sua origem derivada do método SI.

Todos os métodos foram computados usando a linguagem de programação `Python 3.10`, os tempos de execução de cada método foram computados usando a função `time.time()` da biblioteca `time`. Foram usadas técnicas de armazenamento de matrizes esparsas através da biblioteca `scipy.sparse`, porém apenas os tempos de execução dos métodos foram computados, não incluindo o tempo de inicialização das matrizes. Utilizamos o método GMRES também da biblioteca `scipy.sparce` para resolver sistemas esparsos, cujo critério de convergência é dado por:

$$\frac{||b - Ax_k||_2}{||b||_2} < tol, \tag{5.1}$$

para um sistema linear $Ax = b$.

O computador utilizado foi um MacBook Air de 2022, o mesmo possui um processador Apple M1 @ 3.4 Ghz com 8GB de memória RAM LPDDR4.

A fim de compararmos o método FPSA com os métodos DSA, SI e GMRES, consideramos o problema de uma placa homogênea no domínio $[0, X]$, com fonte constante $Q(x) = 0.5$ e condições homogêneas nos contornos $\Psi(0, \mu) = 0$ para $\mu > 0$ e $\Psi(X, \mu) = 0$ para $\mu < 0$.

Resolveremos o problema nessas condições para três diferentes seções de choque de espalhamento ou núcleos de espalhamento, são elas: *Screened Rutherford Kernel* (SRK) [34] , *Exponencial Kernel* (EK) [32] e *Henyey-Greenstein Kernel*

(HGK) [14]. Vamos agora a uma discussão mais detalhada destes núcleos, bem como as tabelas de valores utilizadas para cada núcleo.

5.1 Seções de Choque de Espalhamento

Durante o espalhamento, as partículas incidentes (elétrons, nêutrons etc) colidem ou interagem com os átomos, resultando em uma mudança na direção e/ou energia das partículas incidentes. Este processo é descrito na equação do transporte através do termo $\sigma_s(x, \mu' \to \mu)$ na equação (2.46). Desta forma, para resolvermos o problema na forma da equação (3.37), precisamos definir quais são os termos $\sigma_{s,l}(x)$.

Neste caso, para comprarmos o método FPSA com os demais, tomamos para cada um dos núcleos SRK, EK e HGK três diferentes conjuntos de valores para $\sigma_{s,l}(x)$ variando os parâmetros dos mesmos. Ainda, como se trata de um problema homogêneo, o núcleo de espalhamento é constante ao longo de todo domínio espacial. Aqui, dois dos núcleos que trataremos. SRK e EK, possuem limites de Fokker-Planck válidos, isto é, estes núcleos satisfazem as condições de pico avançado o suficiente para que a aproximação de Fokker-Planck seja válida [26]. Vejamos em mais detalhes o que representam cada um dos núcleos e quais são os valores que foram usados.

5.1.1 *Screened Rutherford Kernel* (SRK)

O núcleo de espalhamento de Rutherford com blindagem SRK [34] é uma adaptação do modelo clássico de espalhamento de Rutherford que leva em consideração os efeitos da blindagem devido aos elétrons do átomo. No modelo clássico de Rutherford, o espalhamento de partículas carregadas, como partículas alfa, é descrito pela interação coulombiana pura entre a partícula incidente e o núcleo alvo. Esse modelo assume que a força eletrostática entre a partícula carregada e o núcleo

diminui com o quadrado da distância entre elas, sem considerar a influência dos elétrons circundantes.

No entanto, em um material real, os elétrons ao redor do núcleo criam um efeito de blindagem que modifica a interação coulombiana, especialmente em distâncias maiores. O núcleo de espalhamento de Rutherford com blindagem ajusta a descrição da força de interação para incorporar essa blindagem, proporcionando uma representação mais realista das interações de espalhamento [9, 18, 26].

A expressão para os momentos de Legendre do SRK depende do termo η e tem um limite de Fokker-Planck válido quando $\eta \to 0$ [26, 27].

$$\sigma_{s,l}^{SRK} = \sigma_s \int_{-1}^{1} P_l(\mu) \frac{\eta(\eta+1)}{(1+2\eta-\mu)^2} d\mu. \tag{5.2}$$

Para nossas simulações, usamos os valores para $\eta \in \{10^{-5}, 10^{-6}, 10^{-7}\}$ como podem ser vistos na Tabela (5.1).

$\sigma_{s,l}$	$\eta = 10^{-7}$	$\eta = 10^{-6}$	$\eta = 10^{-5}$
$\sigma_{s,0}$	0.5	0.5	0.5
$\sigma_{s,1}$	0.4999984881902637	0.4999871844746265	0.4998948694940573
$\sigma_{s,2}$	0.4999957645698841	0.4999645533469864	0.4997146021743414
$\sigma_{s,3}$	0.4999919291371969	0.499933106478293	0.4994691869248763
$\sigma_{s,4}$	0.4999870485565143	0.4998935103411987	0.4991652751543127
$\sigma_{s,5}$	0.4999811728248328	0.4998462646906273	0.4988078478784902
$\sigma_{s,6}$	0.4999743419385311	0.4997917692335063	0.4984008826928098
$\sigma_{s,7}$	0.4999665892267273	0.4997303569645318	0.497947687347766
$\sigma_{s,8}$	0.4999579432560612	0.4996623132158051	0.4974510904257452
$\sigma_{s,9}$	0.4999484290211878	0.4995878875633187	0.4969135605598148
$\sigma_{s,10}$	0.4999380687384428	0.4995073017649702	0.4963372859480047
$\sigma_{s,11}$	0.4999268824014123	0.4994207553174542	0.4957242300410234
$\sigma_{s,12}$	0.4999148881849843	0.4993284294978682	0.4950761720648456
$\sigma_{s,13}$	0.4999021027483907	0.4992304903951062	0.4943947374311556
$\sigma_{s,14}$	0.4998885414683172	0.499127091241861	0.4936814211455058
$\sigma_{s,15}$	0.4998742186220628	0.4990183742470478	0.4929376062126142

Tabela 5.1: Valores do Núcleo de Rutherford para diferentes valores de η [18].

5.1.2 *Exponential Kernel* (EK)

O núcleo de espalhamento EK [28], é um núcleo com forma exponencial de teste criado para satisfazer o limite de Fokker-Planck. É um núcleo de um único parâmetro criado para satisfazer as condições de espalhamento de pico avançado cuja expansão em polinômios de Legendre satisfaz uma relação de recorrência simples [26, 18].

Este núcleo é dado em termos do parâmetro δ na forma

$$\sigma_s^{EK}(\mu) = \frac{\sigma_s^{EK}}{2\pi\delta(1-e^{-2/\delta})}\, e^{-(1-\mu)/\delta} \tag{5.3}$$

Normalizando a equação (5.3) temos

$$2\pi \int_{-1}^{1} \sigma_s^{EK}(\mu) d\mu = \sigma_s^{EK} \tag{5.4}$$

Podemos mostrar que

$$\lim_{\delta \to 0} \sigma_s(\mu) = \sigma_s^{EK} \frac{\boldsymbol{\delta}(\mu - 1)}{2\pi} \tag{5.5}$$

com $\boldsymbol{\delta}(\mu)$ a função delta de Dirac. Neste caso, podemos observar que δ mede o quão avançado é o pico. A fórmula de recorrência para o núcleo EK é dada por

$$\sigma_{s,1}^{EK} = \sigma_{s,0}^{EK}(\,1-\delta), \tag{5.6}$$

$$\sigma_{s.2}^{EK} = \sigma_{s.0}^{EK}(1 - 3\delta + 3\delta^2), \tag{5.7}$$

$$\sigma_{s,l+1}^{EK} = \sigma_{s,l-1}^{EK} - \sigma_{s,l}^{EK}(2l\delta + \delta) \text{ para } l > 2. \tag{5.8}$$

Três valores diferentes para δ foram usados nas simulações, sendo eles, $\delta \in \{10^{-5}, 10^{-6}, 10^{-7}\}$ na Tabela (5.2).

$\sigma_{s,l}$	$\delta = 10^{-7}$	$\delta = 10^{-6}$	$\delta = 10^{-5}$
$\sigma_{s,0}$	0.5	0.5	0.5
$\sigma_{s,1}$	0.49999995	0.4999995	0.499995
$\sigma_{s,2}$	0.499999850000015	0.4999985000015	0.49998500015
$\sigma_{s,3}$	0.499999650000035	0.4999965000035	0.49996500035
$\sigma_{s,4}$	0.499999500000135	0.4999950000135	0.4999500013499865
$\sigma_{s,5}$	0.4999993000004	0.49999300004	0.4999300039999615
$\sigma_{s,6}$	0.499999000000685	0.4999900000684998	0.4999000068498245
$\sigma_{s,7}$	0.499998750001185	0.4999875001184994	0.4998750118493865
$\sigma_{s,8}$	0.4999984500021	0.4999845002099988	0.499845020998797
$\sigma_{s,9}$	0.49999805000306	0.4999805003059975	0.4998050305975731
$\sigma_{s,10}$	0.49999770000444	0.499977000443995	0.4997700443949768
$\sigma_{s,11}$	0.499997300006585	0.4999730006584918	0.4997300658417596
$\sigma_{s,12}$	0.49999680000881	0.4999680008809864	0.4996800880864744
$\sigma_{s,13}$	0.49999635001173	0.4999635011729772	0.4996351172771995
$\sigma_{s,14}$	0.499995850015865	0.4999585015864663	0.4995851586162145
$\sigma_{s,15}$	0.499995250020125	0.49995250201245	0.4995252012001185

Tabela 5.2: Valores do Núcleo Exponencial para diferentes valores de δ [18].

5.1.3 *Henyey-Greenstein Kernel* (HGK)

O núcleo de Henyey-Greenstein [16] é usado em transporte de fótons em nuvens. Este núcleo depende de um parâmetro de anisotropia g tal que

$$\sigma_{s,l} = \sigma_s g^l. \tag{5.9}$$

Para $g \to 0$ temos um núcleo anisotrópico e para $g \to 1$ temos um núcleo altamente anisotrópico. O núcleo HGK não possui um limite de Fokker-

Planck válido [18, 26, 29]. Três valores foram usados para o parâmetro g, sendo eles, $g \in \{0.9, 0.95, 0.99\}$ como mostrados na Tabela (5.3).

$\sigma_{s,l}$	g = 0.99	g = 0.95	g = 0.9
$\sigma_{s,0}$	1	1	1
$\sigma_{s,1}$	0.99	0.95	0.9
$\sigma_{s,2}$	0.9801	0.9025	0.8100000000000001
$\sigma_{s,3}$	0.970299	0.857375	0.729
$\sigma_{s,4}$	0.9605960099999999	0.81450625	0.6561
$\sigma_{s,5}$	0.9509900499	0.7737809375	0.59049
$\sigma_{s,6}$	0.9414801494	0.7350918906	0.5314410000000001
$\sigma_{s,7}$	0.9320653479	0.6983372960999999	0.4782969
$\sigma_{s,8}$	0.9227446944	0.6634204312999999	0.43046721
$\sigma_{s,9}$	0.9135172475	0.6302494097	0.387420489
$\sigma_{s,10}$	0.904382075	0.5987369392	0.3486784401
$\sigma_{s,11}$	0.8953382543	0.5688000922999999	0.3138105961
$\sigma_{s,12}$	0.8863848717	0.5403600877	0.2824295365
$\sigma_{s,13}$	0.877521023	0.5133420833	0.2541865828
$\sigma_{s,14}$	0.8687458128	0.4876749791	0.2287679245
$\sigma_{s,15}$	0.8600583546	0.4632912302	0.2058911321

Tabela 5.3: Valores do Núcleo de Hanyey-Greenstein para diferentes valores de g [18].

5.2 Formulação do Problema e Simulações

A fim de comparar os métodos, vamos tomar a espessura da placa homogênea como sendo $X = 400\ cm$, além disso, tomamos $\sigma_a = 0$ e $\sigma_t = \sigma_{s,0}$. Dividiremos a placa em $K = 200$ células espaciais e tomaremos N, a ordem de discretização do método S_N, variável. Este problema é semelhantes a um problema tratado por [18, 26].

As simulações consistem em inserirmos os valores dos núcleos SRK, EK e HGK para diferentes parâmetros dos mesmos, no problema em geometria de placa descrito anteriormente. Para cada um dos núcleos, resolveremos o problema utilizando os métodos SI, GMRES, DSA e FPSA para três ordens diferentes do método S_N, sendo elas $N \in \{4, 8, 16\}$ e compararemos os tempos de execução e número de iterações.

5.2.1 Núcleo SRK

Para $N = 4$ temos os seguintes resultados na Tabela (5.4)

Parâmetro do Kernel η	**Método**	**Iterações**	**Tempo de Execução (s)**
1e-5	SI	2792	1.5171
	GMRES	1646	1.1078
	DSA	5187	6.1943
	FPSA	9	0.0501
1e-6	SI	1912	1.0807
	GMRES	1280	0.8037
	DSA	3623	4.2408
	FPSA	5	0.0299
1e-7	SI	1547	0.8729
	GMRES	955	0.5981
	DSA	3176	3.6862
	FPSA	4	0.0252

Tabela 5.4: Iterações e Tempo de execução para diferentes parâmetros do núcleo SRK com $N = 4$.

Agora, para $N = 8$ temos os seguintes resultados na Tabela (5.5)

Parâmetro do Kernel η	**Método**	**Iterações**	**Tempo de Execução (s)**
1e-5	SI	6914	8.2421
	GMRES	3753	9.3746
	DSA	3194	7.6416
	FPSA	17	0.3280
1e-6	SI	4652	5.5842
	GMRES	2797	7.0885
	DSA	4652	11.0584
	FPSA	8	0.1639
1e-7	SI	3194	3.8326
	GMRES	2006	5.0007
	DSA	6914	16.6734
	FPSA	5	0.1094

Tabela 5.5: Iterações e Tempo de execução para diferentes parâmetros do núcleo SRK com $N = 8$.

Finalmente, para $N = 16$ temos os seguintes resultados na Tabela (5.6)

Parâmetro do Kernel η	**Método**	**Iterações**	**Tempo de Execução (s)**
1e-5	SI	9263	34.1754
	GMRES	4720	56.9927
	DSA	5229	50.6984
	FPSA	38	1.0759
1e-6	SI	12365	50.7039
	GMRES	6991	84.5661
	DSA	5229	50.7266
	FPSA	15	0.4428
1e-7	SI	8155	34.0169
	GMRES	4858	37.4580
	DSA	5229	51.0530
	FPSA	8	0.2515

Tabela 5.6: Iterações e Tempo de execução para diferentes parâmetros do núcleo SRK com $N = 16$.

Vamos analisar os resultados obtidos para o núcleo de espalhamento de Rutherford com blindagem (SRK) que se trata de uma extensão do modelo clássico de espalhamento de Rutherford, incorporando os efeitos da blindagem causada pelos elétrons que orbitam o núcleo.

Para nossas simulações utilizamos $\eta \in \{10^{-5}, 10^{-6}, 10^{-7}\}$, este parâmetro desempenha um papel crítico na modelagem do núcleo SRK. À medida que η aumenta, os valores de $\sigma_{s,l}$ divergem de 0.5 que é o valor ideal para que o núcleo respeite o limite de Fokker-Planck. Este processo de aumento de η representa um efeito crescente de blindagem no núcleo SRK. Observamos que para todos os valores de N testados o método FPSA apresenta uma superioridade muito grande em relação aos demais métodos, tanto em número de iterações quanto em tempo de execução, ficando na ordem de algumas dezenas de iterações para $N = 16$ na Tabela (5.6), por

exemplo, e tempos da ordem de um segundo ou menos, enquanto os demais métodos estão na ordem de milhares de iterações e dezenas de segundos. Para os métodos não acelerados, SI e GMRES, o GMRES mostrou-se com um menor número de iterações, porém com tempos piores que o método SI, exceto para $N = 4$ na Tabela (5.4) onde os tempos foram melhores. O método de aceleração DSA mostrou-se o mais lento de todos e com maior número de iterações, sendo aquele com piores resultados dentro de todos os métodos testados, refletindo o fato de que este método acelera apenas para os dois primeiros momentos de Legendre do fluxo angular, diferentemente do método FPSA com discretização MPD que acelera até N momentos de Legendre. De modo geral, o método FPSA foi o melhor para todos os valores de N testados bem como para todas as diferentes condições de blindagem do núcleo SRK representadas pelos diferentes valores do parâmetro η. Na Figura (5.1), temos o gráfico com a solução do problema.

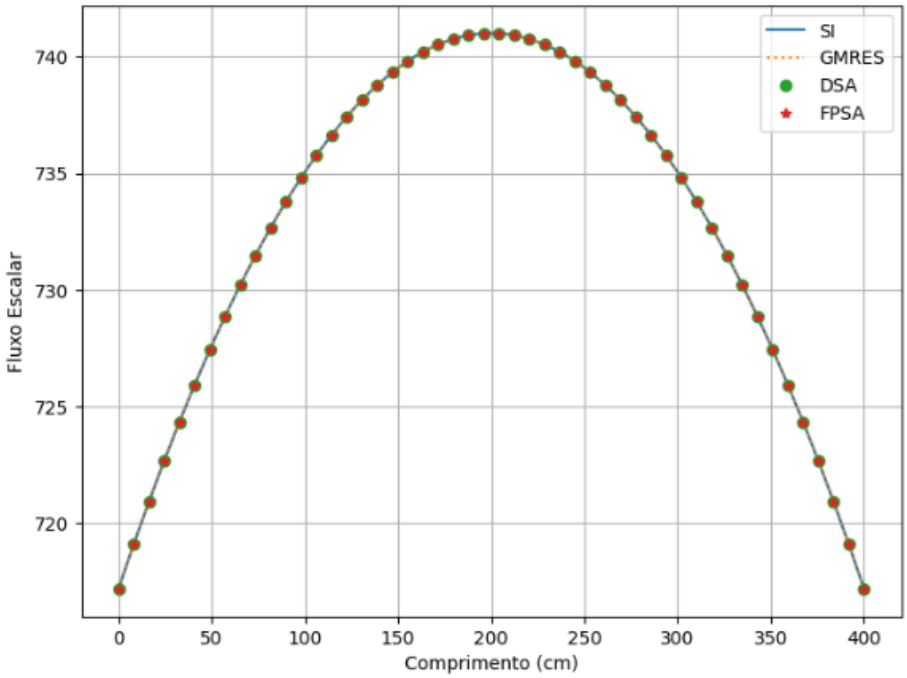

Figura 5.1: Resultados do núcleo SRK com parâmetro $\eta = 10^{-7}$ para os métodos SI, GMRES, DSA e FPSA.

5.2.2 Núcleo EK

Para $N = 4$ temos os seguintes resultados na Tabela (5.7)

Parâmetro do Kernel δ	**Método**	**Iterações**	**Tempo de Execução (s)**
1e-5	SI	1733	0.9712
	GMRES	1149	0.7233
	DSA	3605	4.2670
	FPSA	5	0.0300
1e-6	SI	1345	0.7834
	GMRES	956	0.6179
	DSA	2691	3.1344
	FPSA	3	0.0203
1e-7	SI	1209	0.7133
	GMRES	787	0.5112
	DSA	2562	3.0173
	FPSA	3	0.0206

Tabela 5.7: Iterações e Tempo de execução para diferentes parâmetros do núcleo EK com $N = 4$.

Agora, para $N = 8$ temos os seguintes resultados na Tabela (5.8)

Parâmetro do Kernel δ	**Método**	**Iterações**	**Tempo de Execução (s)**
1e-5	SI	3999	4.8483
	GMRES	2373	5.9282
	DSA	3999	9.5379
	FPSA	7	0.1464
1e-6	SI	2993	3.6218
	GMRES	1881	4.8031
	DSA	2993	7.6114
	FPSA	4	0.0930
1e-7	SI	2236	2.6797
	GMRES	1535	3.8453
	DSA	2236	5.4278
	FPSA	3	0.0735

Tabela 5.8: Iterações e Tempo de execução para diferentes parâmetros do núcleo EK com $N = 8$.

Finalmente, para $N = 16$ temos os seguintes resultados na Tabela (5.9)

Parâmetro do Kernel δ	**Método**	**Iterações**	**Tempo de Execução (s)**
1e-5	SI	10900	43.8999
	GMRES	6198	75.0211
	DSA	10900	105.8664
	FPSA	14	0.4136
1e-6	SI	6898	28.2243
	GMRES	4315	54.0644
	DSA	6898	67.1032
	FPSA	6	0.1965
1e-7	SI	5229	20.9942
	GMRES	3306	40.4968
	DSA	5229	50.7913
	FPSA	4	0.1385

Tabela 5.9: Iterações e Tempo de execução para diferentes parâmetros do núcleo EK com $N = 16$.

O núcleo EK (*Exponential Kernel*) apresenta uma formulação voltada para descrever o espalhamento avançado em sistemas anisotrópicos com uma forte dependência direcional. A forma exponencial do núcleo, controlada pelo parâmetro δ, permite ajustar o grau de anisotropia do espalhamento. Valores menores de δ indicam espalhamento mais concentrado no ângulo de avanço, conforme indicado pela fórmula de normalização e os valores obtidos na Tabela (5.2). Para nossas simulações, consideraremos três valores para o núcleo EK dados pelo parâmetro $\delta \in \{10^{-5}, 10^{-6}, 10^{-7}\}$.

Em relação aos métodos não acelerados, SI e GMRES, o SI apresenta um desempenho significativamente inferior em termos de número de iterações em relação ao método GMRES para todos os valores de N testados e em relação a todos os valores do parâmetro δ, isto ocorre devido a concentração do espalhamento angular

em $\mu = 1$, causando uma desaceleração na convergência do método SI, discutido teoricamente em [1]. Já os tempos de execução para o método SI são melhores que os tempos do método GMRES, exceto para $N = 4$ na Tabela (5.7). O método DSA, embora seja uma alternativa acelerada, apresenta os piores resultados entre todos os métodos discutidos, mesmo quando consideramos valores de N pequenos, isto se deve ao fato de estarmos executando correção por difusão custosas a cada iteração do método. Já o método FPSA mostra os melhores resultados entre todos os métodos, tanto em número de iterações quanto em tempo de execução tendo até três ordens de magnitude de diferença em número de iterações e tempos de execução para o caso $N = 16$, por exemplo. Isto se deve ao fato do núcleo EK ter um forte espalhamento anisotrópico na direção frontal $\mu = 1$, o que satisfaz muito de perto o limite de Fokker-Planck. De modo geral, o método FPSA foi o melhor entre todos os métodos discutidos, tanto acelerados quanto não acelerados, apresentando diferenças que chegam a três ordens de magnitude tanto em número de iterações quanto em tempos de execução. Na Figura (5.2) temos o gráfico com a solução do problema.

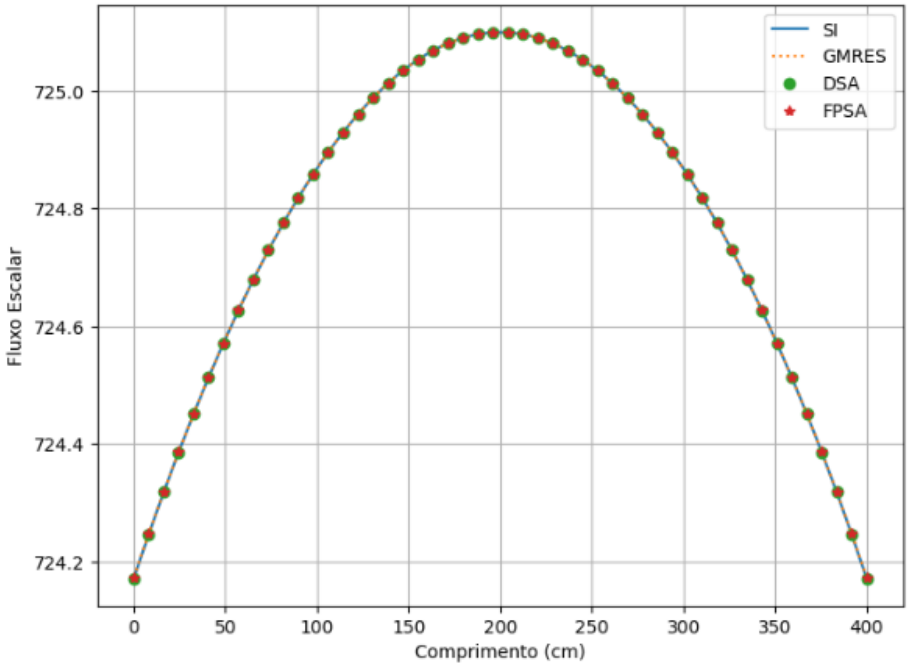

Figura 5.2: Resultados do núcleo EK com parâmetro $\delta = 10^{-7}$ para os métodos SI, GMRES, DSA e FPSA.

5.2.3 Núcleo HGK

Para $N = 4$ temos os seguintes resultados na Tabela (5.10)

Parâmetro do Kernel g	**Método**	**Iterações**	**Tempo de Execução (s)**
0.90	SI	75304	43.1185
	GMRES	5776	3.6376
	DSA	66494	201.3017
	FPSA	8847	43.6240
0.95	SI	41877	23.4761
	GMRES	5282	3.2941
	DSA	36989	111.6189
	FPSA	2660	13.2252
0.99	SI	13687	7.6621
	GMRES	4774	2.9843
	DSA	12055	36.2598
	FPSA	201	0.9963

Tabela 5.10: Iterações e Tempo de execução para diferentes parâmetros do núcleo HGK com $N = 4$.

Agora, para $N = 8$ temos os seguintes resultados na Tabela (5.11)

Parâmetro do Kernel g	**Método**	**Iterações**	**Tempo de Execução (s)**
0.90	SI	75390	90.6735
	GMRES	4396	11.0375
	DSA	72434	371.5474
	FPSA	22549	416.5037
0.95	SI	41974	52.1460
	GMRES	4596	11.6318
	DSA	40347	205.8368
	FPSA	7447	137.0792
0.99	SI	13836	16.7701
	GMRES	3556	8.9424
	DSA	13397	68.4588
	FPSA	604	11.0304

Tabela 5.11: Iterações e Tempo de execução para diferentes parâmetros do núcleo HGK com $N = 8$.

Finalmente, para $N = 16$ temos os seguintes resultados na Tabela (5.12)

Parâmetro do Kernel g	**Método**	**Iterações**	**Tempo de Execução (s)**
0.90	SI	75404	379.9395
	GMRES	6000	39.3911
	DSA	74581	1339.4682
	FPSA	45642	2572.1940
0.95	SI	41989	211.1077
	GMRES	3923	25.8431
	DSA	41538	740.6849
	FPSA	18274	1029.2945
0.99	SI	13859	69.7517
	GMRES	3262	21.9307
	DSA	13749	245.5161
	FPSA	1907	107.4429

Tabela 5.12: Iterações e Tempo de execução para diferentes parâmetros do núcleo HGK com $N = 16$.

O núcleo HGK é amplamente utilizado para modelagem de transporte radiativo devido a sua versatilidade na modelagem de meios anisotrópicos. Quando o parâmetro $g \to 0$ temos um núcleo anisotrópico que pode variar até um núcleo altamente anisotrópico quando $g \to 1$. Para nossas simulações, consideramos três valores para o parâmetro g, sendo eles $g \in \{0.9.0.95, 0.99\}$.

Para o núcleo HGK encontramos um cenário diferente daqueles que foram encontrados nos núcleos SRK e EK, uma vez que o núcleo HGK não satisfaz o limite de Fokker-Planck [26]. O método SI apresentou número de iterações e tempos de execução elevados dentre os métodos não acelerados, já o GMRES apresentou os melhores tempos e menores números de iterações para todos os valores de N e todos os valores do parâmetro g, exceto no caso $N = 4$ e $g = 0.99$ na Tabela (5.10), quando comparando com todos os métodos, tanto acelerados quanto não

acelerados, isto se deve ao fato do GMRES ser eficiente para resolução de problemas com alta anisotropia. Já o método DSA apresentou número de iterações competitivos com o método SI, porém com tempos maiores de execução devido ao cálculo de correção de difusão custoso que é executado a cada iteração. Mesmo assim, o método DSA apresentou tempos de execução melhores que o método FPSA para $N = 16$ e parâmetros do núcleo $g = 0.9$ e $g = 0.95$ na Tabela (5.12). O método FPSA teve número de iterações e tempos de execução competitivos para $N = 4$, tendo inclusive um tempo de execução melhor que o GMRES para $g = 0.99$ na Tabela (5.10). Porém, rapidamente, para os demais valores de N sua performance é degradada, tendo os piores resultados para $N = 16$ na Tabela (5.12). De maneira geral, o método FPSA não é um método adequado para acelerar problemas onde o núcleo de espalhamento não possui um limite de Fokker-Planck válido, como é o caso do núcleo HGK, onde é possível notar que o método FPSA tem uma performance ruim tanto em número de iterações quanto em tempo de execução, principalmente quando tomamos valores altos de N. Na Figura (5.3) temos o gráfico com a solução do problema.

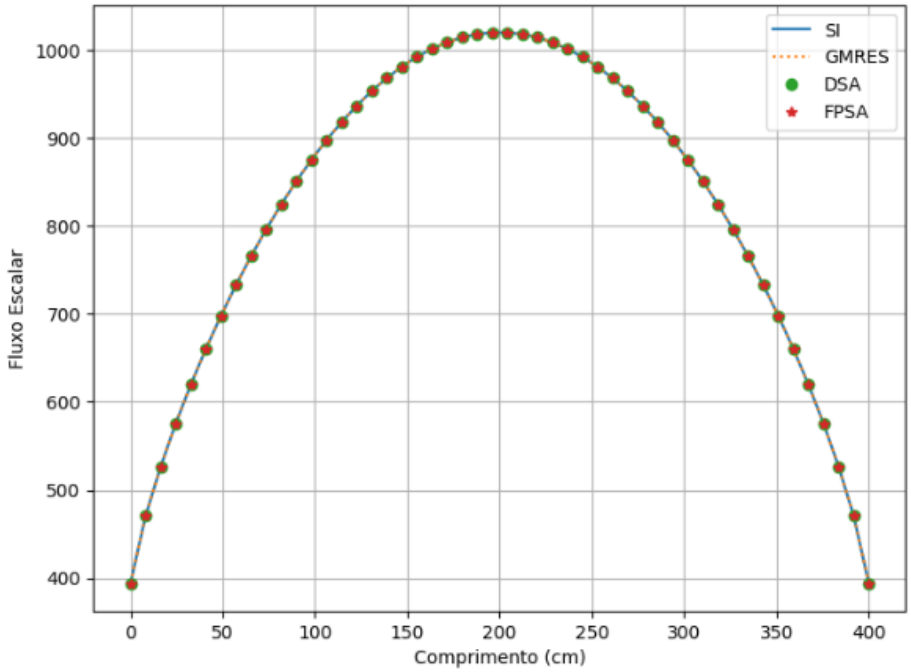

Figura 5.3: Resultados do núcleo HGK com parâmetro $g = 0.99$ para os métodos SI, GMRES, DSA e FPSA.

6 CONCLUSÃO E TRABALHOS FUTUROS

Neste capítulo, faremos um breve resumo de todos os tópicos discutidos neste trabalho. Incluiremos as conclusões que obtivemos sobre o uso do método FPSA como um método adequado para acelerar o método SI sobre certas condições do núcleo de espalhamento, através dos resultados obtidos com as simulações realizadas utilizando três diferentes núcleos de espalhamento, dois deles satisfazendo a condição de pico avançando e um deles não satisfazendo está condição.

Discutiremos também os caminhos futuros a partir daquilo que foi discutido neste trabalho, caminhos estes que podem levar a trabalhos futuros no uso da técnica de aceleração sintética.

6.1 Conclusão

Neste trabalho começamos introduzindo a equação do transporte de partículas, tratamos das variáveis da equação e logo após introduzimos as definições necessárias que representam o problema físico, para então, começarmos a montar os termos que vão compor a equação, representando as partículas que vazam de um volume diferencial dV, aquelas que entram neste volume através de espalhamento, aquelas que são absorvidas e aquelas que são produzidas por uma fonte interna ou externa. Com isso, através da lei de conservação de massa, definimos a equação completa com todas as suas variáveis independentes. Discutimos sobre hipóteses adicionais feitas sobre a equação e chegamos à equação do transporte de partículas mono energética, em estado estacionário e geometria de placa, que foi a equação usada neste trabalho.

Após isto, tratamos de como resolver a equação do transporte nas condições descritas acima. Começamos por introduzir algumas aproximações que seriam

úteis, sendo elas: A aproximação por difusão, onde aplicamos uma quadratura ao termo de espalhamento da equação e retemos apenas os dois primeiros momentos de Legendre do fluxo angular. A aproximação pela equação de Fokker-Planck, que trata de uma hipótese adicional sobre o problema onde consideramos que o espalhamento das partículas só é significativo para $\mu \to 1$, levando a uma aproximação para o termo de espalhamento que envolve uma equação diferencial ao invés de uma integral. A aproximação por ordenadas discretas (S_N) que trata de tomarmos uma quadratura adequada para o termo de espalhamento e uma discretização da variável angular como sendo as raízes de polinômio de Legendre de ordem N, P_N. Tendo estas aproximações, discutimos os métodos lineares para resolver a equação do transporte, começando pelo método SI, que é um método iterativo muito tradicional na literatura, porém este método apresenta algumas dificuldades computacionais para certas condições do problema em questão. Como solução para o problema do método SI, apresentamos a técnica de aceleração sintética (SA), que adiciona um passo corretor a cada iteração do método SI, esta correção surge de resolvermos uma nova equação diferencial que aproxima a equação do transporte original, porém com uma ordem menor. Demos o exemplo de usar a equação da difusão como uma aproximação e também apresentamos a equação de Fokker-Planck como uma alternativa de aproximação.

Tendo discutido as aproximações e os métodos lineares para resolver a equação do transporte, descrevemos como a discretização da equação foi feita: A discretização espacial foi feita através do método de elementos finitos descontínuos sobre as equações S_N, que trata de dividir o domínio espacial em várias células, onde encontramos os valores da função em ambos os extremos das células, e para os pontos dentro das células usamos uma função afim para aproximar a solução. Para a discretização angular, usamos o método *moments preserving discretization* (MPD), que preserva até N momentos de Legendre do fluxo angular. Juntamos ambas as discretizações, espacial e angular, em uma formulação matricial unificada, descrevemos a formulação de cada uma das matrizes necessárias para formar o sistema

linear que será resolvido. Além disso, apresentamos uma representação algorítmica dos métodos iterativos SI e FPSA, onde usamos a formulação matricial discutida anteriormente para resolver a equação do transporte.

Por último, apresentamos o uso das ferramentas desenvolvidas até o momento para resolver um problema concreto em geometria de placa homogênea com fonte constante. Nosso objetivo neste capítulo foi comparar o método de aceleração FPSA com métodos não acelerados como SI e GMRES e também com o método acelerado DSA. Para isto, consideramos três diferentes núcleos de espalhamento para o problema, sendo eles: *Screened Rutherford Kernel* (SRK), *Exponencial Kernel* (EK) e *Henyey-Greenstein Kernel* (HGK). Nossas simulações incluíam testar estes núcleos com três diferentes ordens para a aproximação S_N, sendo elas $N \in \{4, 8, 16\}$. Durante as simulações, encontramos que o método FPSA é uma excelente alternativa para acelerar os casos onde o núcleo de espalhamento possui as condições de pico avançado para todas as ordens do S_N, como nos casos do núcleo SRK e EK, onde o método FPSA apresentou uma redução de até três ordens de magnitude tanto em número de iterações quanto em tempo de execução em relação aos demais métodos testados. Já para o núcleo HGK, que não satisfaz as condições de pico avançado, o método FPSA não se sobressaiu aos demais métodos tanto em número de iterações quanto em tempos de execução, tendo tido o melhor resultado em tempo de execução apenas para o caso onde o parâmetro do núcleo era $g = 0.99$ e $N = 4$, não apresentando então uma vantagem consistente para tratar núcleos que não tenham a natureza de pico avançado.

6.2 Trabalhos Futuros

Neste trabalho, mostramos resultados promissores para o uso do método FPSA como uma alternativa para acelerar problemas de transporte de partículas nas condições de pico avançado, porém as simulações tratadas neste trabalho se limitam

a um caso de geometria de placa homogênea. No futuro, podemos incorporar a dependência em múltiplos grupos de energia, problemas em mais dimensões espaciais e também problemas com anisotropia espacial. Ainda, aplicar o método a um caso físico realista seria uma boa maneira de testar como esta aceleração se traduz para casos reais aplicados à física, engenharia, etc. A implementação de um método de resolução eficiente dedicado a resolver a equação de Fokker-Planck em si, tornaria o método muito atraente, principalmente se considerarmos problemas em dimensões maiores. Por fim, podemos considerar uma extensão da equação de Fokker-Planck chamada *Generalized Fokker-Planck* (GFP) [30], que estende a equação de Fokker-Planck para casos onde a seção de choque de espalhamento não possui um pico avançado o suficiente para que a equação de Fokker-Planck seja válida. Poderíamos usar a aproximação GFP na aceleração sintética para cobrir casos onde o método FPSA tem seu desempenho degradado devido à condição de pico avançado não ser satisfeita.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

[1] M. L. Adams and E. W. Larsen, *Fast Iterative Methods for Discrete Ordinates Particle Transport Problems*, Progress in Nuclear Energy 40.1, pp. 3–159, (2002).

[2] R.E. Alcouffe, *Diffusion Synthetic Acceleration Methods for the Diamond-Differenced Discrete-Ordinates Equations*, Nuclear Science and Engineering, (1977).

[3] R.E. Alcouffe, *A Stable Diffusion Synthetic Acceleration Method for Neutron Transport Iterations*, Transactions of the American Nuclear Society, (1976).

[4] A. Badruzzaman, *Nodal methods in transport theory*, Advances in Nuclear Science and Technology 21, (1990).

[5] G. Bell and S. Glasstone, *Nuclear Reactor Theory*, Krieger Publishing Company, (1979).

[6] L. Boltzmann, *Weitere Studien über das Wärmegleichgewicht unter Gasmolekülen*, Kinetische Theorie II, (1970).

[7] S. Cercignani, *The Boltzmann Equation and Its Application*, Springer, (1988).

[8] L. R. Cornejo and D. Y. Anistratov, *Nonlinear Diffusion Acceleration Method with Multigrid in Energy for k-Eigenvalue Neutron Transport Problems*, Nuclear Science and Engineering, (2016).

[9] D. A. Dixon, A. K. Prinja, B. C. Franke, *Computationally efficient moment-preserving Monte Carlo electron transport method with implementation in Geant4* , Nuclear Instr. and Methods in Phys. Res. Sec. B: Beam Interac. with Materials and Atoms (2015).

[10] J.J. Duderstadt and W.R. Martin, *Transport Theory*, New York, Wiley-Interscience, (1979).

[11] L. C. Evans, *Partial Differential Equations*, American Mathematical Society, (2010).

[12] E. M. Gelbard, *Simplified Spherical Harmonics Equations and Their Use in Shielding Problems* Technical Report WAPD-T-1182, Bettis Atomic Power Laboratory, (1961).

[13] E. M. Gelbard, *Applications of Simplified Spherical Harmonics Equations in Spherical Geometry* Technical Report WAPD-TM-294, Bettis Atomic Power Laboratory, (1962).

[14] Hansen, J.E., Travis, L.D., *Light scattering in planetary atmospheres* Space Sci. Rev. (1974).

[15] D. Heifetz, D. Post, M. Petravic, J. Weisheit, and G. Bateman, *A Monte-Carlo model of neutral-particle transport in diverted plasmas* Journal of Computational Physics 46.2 (1982).

[16] Henyey, L. C. and Greenstein, J. L., *Diffuse radiation in the Galaxy* The Astrophysical Journal (1941).

[17] B. R. Herman, B. Forget, and K. Smith, *Progress toward Monte Carlo–thermal hydraulic coupling using low-order nonlinear diffusion acceleration methods* Annals of Nuclear Energy 84 (2015).

[18] J.J. Kuczek, J.K. Patel and R. Vasques, *Modified Fokker-Planck Acceleration for Forward-Peaked Transport Problems in Slab Geometry*, Journal of Computational and Theoretical Transport, (2021).

[19] H. J. Kopp, *Synthetic Method Solution of the Transport Equation*, Nuclear Science and Engineering 17, (1963).

[20] E.W. Larsen, *Unconditionally Stable Diffusion-Synthetic Acceleration Methods for the Slab Geometry Discrete Ordinates Equations. Part I: Theory*, Nuclear Science and Engineering 82.1, (1982).

[21] E. E. Lewis, W. F. Miller, *Computational Methods of Neutron Transport*, American Nuclear Society, (1993).

[22] W. R. Martin, *The Application of the Finite Element Method to the Neutron Transport Equation*, PhD thesis, The University of Michigan, (1976)

[23] B. J. Matkowsky, *On the Diffusion Approximation to Transport Theory*, (1970).

[24] M. F. Modest, *Radiative Heat Transfer*, Mc Graw-Hill, (1993).

[25] J. E. Morel, T. A. Wareing, and K. Smith, *A Linear-Discontinuous Spatial Differencing Scheme for SN Radiative Transfer Calculations*, Journal of Computational Physics, pp. 445 –462, (1996).

[26] J. K. Patel, *Fokker-Planck-Based Acceleration for SN Equations with Highly Forward-Peaked Scattering in Slab Geometry.*, PhD thesis. Albuquerque, NM: The University of New Mexico, (2016).

[27] J. K. Patel, J. S. Warsa, A. K. Prinja, *Accelerating the solution of the SN equations with highly anisotropic scattering using the Fokker-Planck approximation.*, Annals of Nuclear Energy (2020).

[28] G. C. Pomraning, *An Asymptotic Model for the Spreading of a Collimated Beam*, Nuclear Science and Engineering, (1992).

[29] POMRANING, G.C., *THE FOKKER-PLANCK OPERATOR AS AN ASYMPTOTIC LIMIT*, Mathematical Models and Methods in Applied Sciences, (1992).

[30] Prinja, A. K. and Pomraning, G. C. and VanDenburg, J. W., *A generalized fokker planck model model for transport of collimated beams*, Nuclear Science and Engineering, (2001).

[31] A. K. Prinja and G. C. Pomraning, *A generalized fokker planck model model for transport of collimated beams*, Nuclear Science and Engineering, (2001).

[32] Prinja, Anil K., *On the solution of a nonlocal transport equation by the Weiner-Hopf method*, Annals of Nuclear Energy, (1996).

[33] M. L. Raymond, *Nuclear Energy: An Introduction to the Concepts, Systems, And Applications of NUclear Processes*, Elsevier, (2020).

[34] Rutherford, E., *The scattering of alpha and beta particles by matter and the structure of the atom*, The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science, (1911).

[35] Saad, Youcef and Schultz, Martin H, *GMRES: A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems*, SIAM J. Sci. Stat. Comput, pp. 856-869, (1986).

[36] E. Stegun and M. Abramowitz, *Handbook of Mathematical Functions, With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, Nuclear Science and Engineering 17, (1963).

[37] K. Smith, J. E. Morel, T. A. Wareing,, *Linear discontinuous spatial differencing scheme for SN radiative transfer calculations*, Journal of Computational Physics, (1996)

[38] K. S. Smith, *Nodal method storage reduction by nonlinear iteration*, Transactions of the American Nuclear Society, (1983).

[39] B. Turcksin, J. C. Ragusa, and J. E. Morel, *Angular Multigrid Preconditioner for Krylov-Based Solution Techniques Applied to the Sn Equations with*

Highly Forward- Peaked Scattering, Transport Theory and Statistical Physics 41, (2012).

[40] Valougeorgis, Dimitris and Williams, Michael and Larsen, Edward W., *Stability Analysis of Synthetic Acceleration Methods with Anisotropic Scattering*, Nuclear Science and Engineering, (1988).

[41] Y. Wang, *Nonlinear diffusion acceleration for the multigroup transport equation discretized with SN and continuous FEM with rattlesnake*, (2013).

[42] J. S. Warsa and A. K. Prinja, *A moment preserving SN discretization for one-dimensional fokker planck equation*, Transactions of the American Nuclear Society, (2012).

[43] Y. Zhang, J. C. Ragusa and J. E. Morel, *Iterative performance of various formulations of the SPN equations*, Journal of Computational Physics, (2013).

[44] Zhu, Ang and Jarrett, Michael and Xu, Yunlin and Kochunas, Brendan and Larsen, Edward and Downar, Thomas, *An optimally diffusive Coarse Mesh Finite Difference method to accelerate neutron transport calculations*, Annals of Nuclear Energy, (2016).