

16 a 19 de Outubro de 2017 Instituto Politécnico - Universidade do Estado de Rio de Janeiro Nova Friburgo - RJ

# FERRAMENTA COMPUTACIONAL PARA A SIMULAÇÃO DE PROBLEMAS DE TRANSPORTE DO TIPO FONTE-DETECTOR APLICANDO A TÉCNICA ADJUNTA

**Jesús Pérez Curbelo**<sup>1</sup> - jcurbelo86@gmail.com **Ricardo Carvalho de Barros**<sup>1</sup> - rcbarros@pq.cnpq.br <sup>1</sup>Universidade do Estado do Rio de Janeiro, Instituto Politécnico – Nova Friburgo, RJ, Brazil

Resumo. Neste trabalho é apresentada uma ferramenta computacional para a simulação de problemas de transporte do tipo fonte—detector em geometria cartesiana na formulação de ordenadas discretas de ordem N ( $S_N$ ) visando a gerar soluções numéricas precisas e computacionalmente eficientes. Para tanto, foi aplicada a técnica adjunta neste tipo de problemas e foram usados métodos espectronodais. Para problemas em geometria unidimensional o método spectral Green's function (SGF) adjunto foi estendido a problemas multigrupo de energia, considerando espalhamento com grau arbitrário L (L < N) de anisotropia, incluindo a possibilidade de incidência de partículas pelo contorno. Para problemas considerando o transporte de partículas monoenergéticas em geometria bidimensional retangular, foi desenvolvida a aplicação do método SGF—Adjunto para numericamente resolver as equações  $S_N$  adjuntas nodais e monoenergéticas integradas transversalmente com aproximações constantes para os termos correspondentes às fugas transversais no problema físico em meios não—multiplicativos. Este método numérico nodal de malha grossa é denominado SGF—CN—Adjunto.

**Palavras chave:** Problema adjunto de transporte, Equações adjuntas de ordenadas discretas, Métodos espectronodais, Aplicativo computacional

### 1. INTRODUÇÃO

A solução da equação que é adjunta à equação que modela matematicamente o transporte de partículas neutras, tem significado físico como uma medida da importância que tem uma partícula, que migra por um ponto do domínio em determinada direção e com certa energia cinética, para uma função objetivo (por exemplo, a resposta de um detector). Para uma apropriada formulação, a função adjunta pode ser interpretada como proporcional à leitura de um determinado detector devido a uma fonte unitária de partículas neutras (Bell & Glasstone, 1970) (Lewis & Miller, 1993) (Prinja & Larsen, 2010). A resolução da equação adjunta à equação de transporte e as grandezas envolvidas têm um alto nível teórico e variadas aplicações práticas (Andrade Lima et al., 1998) (Sjoden, 2002) (Sjoden & Ghita, 2009) (Zhang et al., 2010)

(Becker & Larsen, 2011) (Bal et al., 2011) (Wagner et al., 2011) (Bellout et al., 2012) (Peplow, 2012) (Wang & Abdel–Khalik, 2013) (Pautz et al., 2017)(Bruss et al., 2017).

A interpretação como função importância faz com que a solução da equação adjunta de transporte seja muito utilizada em problemas do tipo fonte-detector (Sjoden, 2002) (Sjoden & Ghita, 2009) (Peplow, 2012). Neste tipo de procedimento aproveita-se o fato de que, se for desejado determinar a resposta de um determinado detector de nêutrons, não é necessária a realização de cálculos do fluxo neutrônico para cada fonte emissora de partículas. Apenas um cálculo da função importância é suficiente para determinar a resposta do detector para qualquer fonte, ainda permitindo a troca de posição e intensidade da mesma, desde que não mude o tipo de detector, nem a sua posição (Lewis & Miller, 1993) (Prinja & Larsen, 2010).

A precisão nas simulações é um aspecto fundamental neste tipo de problemas e geralmente são consumidos altos recursos computacionais. Visando a aumentar e consolidar a compreensão sobre a aplicação da técnica adjunta em problemas de fonte—detector em geometria cartesiana, obtendo resultados que sejam computacionalmente eficientes, neste trabalho é apresentada uma ferramenta computacional que utiliza métodos espectronodais determinísticos em problemas adjuntos de transporte na formulação de ordenas discretas  $(S_N)$ .

#### 2. MODELO ADJUNTO DE TRANSPORTE

Um problema adjunto de transporte é definido de forma que a função importância  $\psi^{\dagger}(\vec{r}, E, \widehat{\Omega})$ , que neste trabalho é definida como fluxo angular adjunto em conformidade com as referências (Lewis & Miller, 1993) e (Prinja & Larsen, 2010), seja a solução da equação adjunta de transporte

$$-\widehat{\Omega} \cdot \nabla \psi^{\dagger}(\vec{r}, E, \widehat{\Omega}) + \sigma_{T}(\vec{r}, E)\psi^{\dagger}(\vec{r}, E, \widehat{\Omega})$$

$$= \int_{0}^{\infty} dE' \int_{4\pi} d\widehat{\Omega}' \, \sigma_{S}(\vec{r}, E, \widehat{\Omega} \to E', \widehat{\Omega}')\psi^{\dagger}(\vec{r}, E', \widehat{\Omega}') + Q^{\dagger}(\vec{r}, E, \widehat{\Omega}) , \qquad (1)$$

para uma fonte adjunta  $Q^{\dagger}$  e condições de contorno apropriadas ao problema (Duderstadt & Martin, 1979) (Prinja & Larsen, 2010). Ressalte-se por oportuno, que a denominada fonte adjunta é meramente um contraponto à fonte física Q; não significa em absoluto que é o termo adjunto à Q, nem tampouco tem o sentido de fonte emissora de partículas. Neste sentido, a fonte adjunta  $Q^{\dagger}$  é perfeitamente arbitrária, pois, dependendo do que seja definido como função objetivo, atribui—se um valor adequado para  $Q^{\dagger}$ . Por exemplo, se a função objetivo é a resposta de um detector em problemas do tipo fonte—detector, como os tratados neste trabalho, identifica—se  $Q^{\dagger}$  numericamente igual à seção de choque macroscópica de absorção do detector.

Note—se que o sinal de menos no termo de migração da Equação (1) é uma indicação de que a transferência de importância é considerada ao longo de uma direção inversa à direção de migração das partículas. Ademais, o espalhamento ocorre da energia E para a energia E' em sentido contrário ao da equação de transporte para o problema físico, onde o grupo de partículas com energia E' contribui para o grupo de partículas com energia E (Sjoden, 2002).

Para ilustrar a utilidade da resolução da equação adjunta na resolução de problemas de fonte-detector, determinamos a leitura de um detector que é calculada por meio da taxa de reação. Considerando condições de contorno do tipo fluxo adjunto emergente nulo e condições

de contorno do tipo prescritas para o problema físico, é possível calcular a taxa de reação como

$$R = \langle \psi^{\dagger}, Q \rangle + \int_{\Gamma} d\Gamma \int_{0}^{\infty} dE \int_{\widehat{n} \cdot \widehat{\Omega} < 0} d\widehat{\Omega} |\widehat{n} \cdot \widehat{\Omega}| \psi^{\dagger}(\vec{r}_{0}, E, \widehat{\Omega}) f(\vec{r}_{0}, E, \widehat{\Omega}) , \vec{r}_{0} \in \Gamma ,$$
(2)

onde  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  representa a integração em todas as variáveis independentes no interior dos domínios das mesmas e  $f(\vec{r}_0, E, \widehat{\Omega})$  é o valor prescrito para o fluxo angular físico incidente no ponto  $\vec{r}_0$  do contorno  $\Gamma$ .

Então, na ausência de fontes externas, a leitura do detector será uma integral do fluxo angular adjunto na parte da superfície para a qual a distribuição prescrita de partículas incidentes é diferente de zero. Se condições de contorno reflexivas são usadas em uma parte da superfície  $\Gamma$  do contorno, a segunda parcela da expressão de R, dada na Equação (2), torna—se igual a zero, pois as condições de contorno reflexivas devem ser, obrigatoriamente, implementadas no fluxo físico e no fluxo adjunto.

### 3. DISCRETIZAÇÃO DAS VARIÁVEIS ANGULARES E ENERGÉTICA

Para desenvolver um algoritmo eficiente de solução numérica do problema adjunto de transporte, neste trabalho é discretizado cada um dos domínios das variáveis independentes. O método de ordenadas discretas  $(S_N)$  é uma técnica aproximada muito utilizada na discretização da variável angular em cálculos de transporte, onde apenas um conjunto discreto de direções angulares é considerado e uma fórmula de quadratura é utilizada para aproximar o termo integral (Lewis & Miller, 1993). Nesta seção apresentamos as formulações  $S_N$  para os modelos adjuntos unidimensional e bidimensional em geometria cartesiana. Também é apresentada a técnica multigrupo para a discretização da variável energia.

#### 3.1 Equações $S_N$ adjuntas em geometria unidimensional

Para problemas adjuntos de transporte de nêutrons considerando simetria azimutal e espalhamento anisotrópico em meios não multiplicativos, a Equação (1) na formulação  $S_N$ , independente do tempo e multigrupo de energia, para o domínio homogêneo  $\Upsilon: 0 \leq x \leq H_x$  aparece como

$$-\mu_{m} \frac{d}{dx} \psi_{mg}^{\dagger}(x) + \sigma_{Tg}(x) \psi_{mg}^{\dagger}(x)$$

$$= \sum_{l=0}^{L} \frac{2l+1}{2} P_{l}(\mu_{m}) \sum_{g'=1}^{G} \sigma_{Sg \to g'}^{(l)}(x) \sum_{n=1}^{N} P_{l}(\mu_{n}) \omega_{n} \psi_{ng'}^{\dagger}(x) + Q_{g}^{\dagger}(x) ,$$

$$m = 1 : N , g = 1 : G . (3)$$

onde a quadratura angular é definida pelo conjunto  $\{\mu_m, \omega_m\}$ . Os valores de  $\mu_m$  representam as direções discretas,  $\omega_m$  são os pesos e N a ordem da quadratura angular utilizada. Neste trabalho são utilizados conjuntos de quadraturas angulares de ordem par de Gauss-Legendre (Lewis & Miller, 1993), onde os valores de  $\mu_m$  são as raízes do polinômio de Legendre de grau N,  $P_N(\mu_m) = 0$ , m = 1:N. Os pesos,  $\omega_m$ , são determinados de tal forma que a quadratura integre exatamente os polinômios de Legendre  $P_l(\mu_m)$ , com l = 0:N-1. A discretização

da variável energia foi realizada utilizando a aproximação de multigrupos. Esta é uma técnica convencionalmente usada para discretizar a variável energia na solução de problemas de transporte (Lewis & Miller, 1993) (Prinja & Larsen, 2010). A estrutura das equações  $S_N$  adjuntas multigrupo é uma aproximação para a equação adjunta de transporte (1), onde a variável energia é discretizada e as integrais são aproximadas por somatórios nos grupos de energia. A aproximação de multigrupo requer que seja definido um número finito G de grupos contíguos de energia. Ressalte—se por oportuno que o termo adjunto correspondente à fonte física de espalhamento possui a l-ésima componente da seção de choque de espalhamento diferencial transposta àquela que aparece no problema físico. Em outras palavras, se no problema físico ocorre  $\sigma_{Sq'\to q}^{(l)}(x)$ , no problema adjunto ocorrerá  $\sigma_{Sq\to q'}^{(l)}(x)$ .

#### 3.2 Equações $S_N$ adjuntas em geometria bidimensional cartesiana

A Equação (1) para problemas adjuntos de transporte de nêutrons monoenergéticos na formulação  $S_N$ , em geometria bidimensional cartesiana para o domínio  $D=\{(x,y)\in\mathbb{R}^2|0\le x\le H_x; 0\le y\le H_y\}$ , com espalhamento linearmente anisotrópico em meios não-multiplicativos, aparece como

$$-\mu_{m} \frac{\partial \psi_{m}^{\dagger}(x,y)}{\partial x} - \eta_{m} \frac{\partial \psi_{m}^{\dagger}(x,y)}{\partial y} + \sigma_{T}(x,y) \psi_{m}^{\dagger}(x,y) = \frac{\sigma_{S0}(x,y)}{4} \sum_{n=1}^{M} \psi_{n}^{\dagger}(x,y) \omega_{n}$$

$$+ \frac{3\sigma_{S1}(x,y)}{4} \left[ \mu_{m} \sum_{n=1}^{M} \mu_{n} \psi_{n}^{\dagger}(x,y) \omega_{n} + \eta_{m} \sum_{n=1}^{M} \eta_{n} \psi_{n}^{\dagger}(x,y) \omega_{n} \right] + Q_{m}^{\dagger}(x,y) ,$$

$$m = 1 : M. \quad (4)$$

Por definição tem—se  $\psi_m^\dagger(x,y) \equiv \psi^\dagger(x,y,\mu_m,\eta_m)$  e M é o número total de direções discretas para o caso bidimensional, que é calculado pela expressão  $M=\frac{N(N+2)}{2}$ , sendo N a ordem da quadratura. Neste trabalho é utilizada a quadratura de simetria de nível ou quadratura  $LQ_N$  (Level Symmetric Quadrature) (Lewis & Miller, 1993). Define—se como quadratura angular o conjunto de valores  $\left\{\mu_m,\ \eta_m,\ \omega_m,\ m=1:M\right\}$ , onde  $\omega_m$  é o peso da quadratura angular para a direção m e o par ordenado  $(\mu_m,\ \eta_m)$  representa uma direção discreta.

# 4. MÉTODOS ESPECTONODAIS PARA A RESOLUÇÃO DO PROBLEMA ADJUNTO DE TRANSPORTE

Os problemas adjuntos de transporte representados nas Equações (3) e (4), com condições de contorno apropriadas, podem ser resolvidos numericamente utilizando o convencional método de malha fina Diamond Difference (DD). O método DD tem sido amplamente utilizado em códigos de cálculo neutrónico (Lewis & Miller, 1993) e neste trabalho é utilizado como referência para comparar os resultados obtidos quando são utilizados métodos espectronodais de malha grossa, tanto para o problema em geometria unidimensional quanto para o caso bidimensional.

No trabalho de Curbelo (2017) foi apresentada a aplicação da técnica adjunta em problemas de transporte de partículas neutras do tipo fonte-detector em geometria cartesiana na formulação  $S_N$ . Para tanto, foram desenvolvidos e utilizados os métodos *spectral Green's function* (SGF) adjunto e *spectral Green's function-constant nodal* (SGF-CN) adjunto para

problemas unidimensionais e bidimensionais, respectivamente. Para gerar soluções numéricas para as equações nodais de diferença é usado o esquema iterativo partial one–node block inversion (NBI parcial) que, para o problema adjunto, utiliza as mais recentes estimativas para todos os fluxos angulares adjuntos nas direções emergentes de um dado nodo espacial para determinar os fluxos angulares adjuntos nas direções incidentes no nodo e que constituem as direções emergentes dos nodos adjacentes. O método SGF-Adjunto foi estendido a problemas  $S_N$  adjuntos unidimensionais, multigrupo de energia, considerando espalhamento com grau arbitrário de anisotropia para problemas do tipo fonte–detector, incluindo condições de contorno com incidência de partículas.

O método SGF-Adjunto não pode ser aplicado de forma direta a problemas  $S_N$  multidimensionais de tal modo a gerar soluções numéricas livres de erros de truncamento espacial; portanto, no trabalho de Curbelo (2017) foi desenvolvida a aplicação do método SGF-Adjunto para resolver numericamente as equações  $S_N$  adjuntas nodais e monoenergéticas integradas transversalmente utilizando aproximações constantes para os termos correspondentes às fugas transversais no problema físico. Em sendo assim, foi desenvolvido o método denominado SGF-CN-Adjunto para problemas  $S_N$  adjuntos monoenergéticos, considerando espalhamento linearmente anisotrópico. Neste método, a única aproximação realizada é nos termos correspondentes às fugas transversais das equações  $S_N$  adjuntas nodais e monoenergéticas integradas transversalmente, os quais são considerados constantes. Os termos relativos aos eventos de espalhamento e à fonte adjunta são tratados analiticamente.

Os métodos *SGF*–Adjunto e *SGF*–*CN*–Adjunto têm sido aplicados neste tipo de problemas de forma satisfatória e mais detalhes sobre as equações que os constituem, assim como as vantagens de sua utilização podem ser encontradas na literatura (Militão et al., 2012)(Curbelo et al., 2015)(Curbelo et al., 2017)(Curbelo & Barros, 2017b)(Curbelo, 2017).

#### 5. APLICATIVO COMPUTACIONAL

Nesta seção são descritas as principais características da ferramenta computacional apresentada neste trabalho. O aplicativo computacional foi desenvolvido na linguagem de programação C++, aproveitando o ambiente integrado de desenvolvimento (*Integrated Development Environment–IDE*) *Embarcadero*  $^{\textcircled{R}}$  C++ *Builder XE2*, disponível no Laboratório de Modelagem Multiescala e Transporte de Partículas (LABTRAN) do Instituto Politécnico (IPRJ/UERJ). Foi desenvolvida uma interface gráfica amigável ao usuário com o objetivo de facilitar a resolução numérica de diversos problemas  $S_N$  de fonte fixa.

#### 5.1 Entrada de dados

Conforme se observa na parte superior da Figura 1, na barra de menu são selecionadas as características do problema a ser resolvido e é possível carregar um arquivo de texto (\*.txt) com os dados do problema. Deve ser indicado se o problema é do tipo físico ou adjunto e deve ser selecionada a dimensão do problema, existindo a possibilidade de resolver problemas unidimensionais e bidimensionais. Também é possível escolher o tipo de espalhamento a ser considerado. No caso de problemas unidimensionais, também podem ser resolvidos problemas multigrupo de energia. É possível utilizar o método de malha fina *DD* ou o método de malha grossa *SGF* (*SGF*–*CN* para problemas bidimensionais).

A interface conta com três janelas principais de entrada de dados (Figura 1). Na janela *Início* aparecem dois setores para a inserção dos dados de entrada. O setor à direita permanece

inativo até serem completados os dados do setor à esquerda e todos aqueles subsequentes nas janelas  $Regi\~oes$  e Zonas. No setor à esquerda s $\~o$ o fornecidos os par $\~o$ metros geométricos do problema, i.e, número de regi $\~o$ es, zonas materiais e as condi $\~o$ es de contorno. Para problemas unidimensionais é preciso fornecer o número de regi $\~o$ es em que está dividido o domínio, o número de zonas materiais e as condi $\~o$ es de contorno à esquerda e à direita (ver Figura 1). O código permite resolver problemas usando condi $\~o$ es de contorno do tipo prescrita ou reflexiva. Quando condi $\~o$ es de contorno prescritas s $\~o$ o selecionadas, aparece um campo à direita para fornecer o valor do fluxo angular isotr'opico incidente. Para a modelagem de problemas  $S_N$  bidimensionais em geometria retangular, é necess'orio fornecer o número de regi $\~o$ es, tanto na dire $\~o$ o horizontal (x) quanto na dire $\~o$ o vertical (y). Também s $\~o$ o escolhidas as condi $\~o$ o se quatro contornos dos problemas bidimensionais.

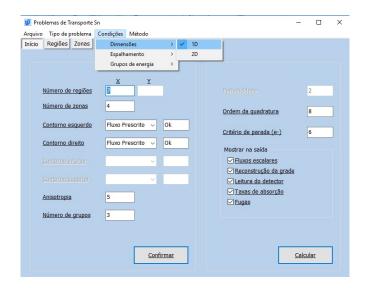


Figura 1- Janela principal da interface gráfica do aplicativo computacional.

Quando todos os campos do setor à esquerda são preenchidos, o botão Confirmar permite guardar os valores fornecidos e avançar até a próxima janela de dados. Estando os dados corretos, uma segunda janela de entrada de dados é ativada para o fornecimento dos dados por cada região. Para problemas unidimensionais são fornecidos, para cada região, o comprimento, o valor da fonte interior, o número de nodos em que está dividida cada região e o mapeamento da zona material que corresponde a cada região. Observe—se que para problemas  $S_N$  tipo fonte—detector, que são considerados neste trabalho, a fonte adjunta é sempre identificada como a seção de choque macroscópica de absorção do material do qual é constituído o detector.

No caso de problemas bidimensionais, é preciso fornecer o comprimento e o número de divisões espaciais para cada região nas direções x e y. Se os dados são confirmados corretamente, uma nova janela é disponibilizada para declarar tanto o mapeamento das zonas materiais quanto a distribuição de fontes físicas ou adjuntas, conforme o caso. O botão *Confirmar* guarda os valores fornecidos e permite o avanço para uma terceira janela de dados, denominada *Zonas*.

Na janela *Zonas* são informados os parâmetros físicos para cada zona material. Em ambos os casos, problema unidimensional ou bidimensional, os dados necessários são as seções de choque macroscópicas totais e de espalhamento. Havendo confirmação satisfatória dos dados, retorna—se à janela principal, sendo que o setor à direita é então ativado para fornecimento dos dados complementares e das opções das formas de saída dos resultados.

Para problemas unidimensionais multigrupo de energia são disponibilizadas janelas emer-

gentes das janelas *Regiões* e *Zonas*, que permitem inserir os valores das fontes físicas ou adjuntas para cada grupo de energia, assim como os valores das seções de choque macroscópicas totais e de espalhamento.

No setor à direita da janela *Início* é fornecida a periodicidade em que se deseja obter a saída dos resultados em problemas unidimensionais, i.e., a cada quantos pontos da grade serão visualizados os valores dos fluxos escalares. A grandeza periodicidade é apenas utilizada, neste trabalho, em problemas unidimensionais, onde existe interesse no perfil do fluxo escalar no interior do domínio. Ademais, é preciso fornecer a ordem da quadratura angular e o número de convergência. Também existe um submenu onde é selecionado o tipo de saída que o usuário prefere, dependendo do tipo de problema que esteja sendo resolvido. Pode–se optar por visualizar os fluxos escalares e a leitura de detectores. Quando o problema é resolvido usando o método *SGF* é possível optar por realizar uma reconstrução espacial no interior de cada região para obter a saída gráfica. Para problema do tipo físico é possível, também, optar por obter a taxa de absorção em cada região do domínio e as fugas. A Figura 1 ilustra as cinco opções implementadas para a saída dos resultados.

#### 5.2 Resultados

O botão *Calcular* (ver Figura 1) permite utilizar todos os dados fornecidos e realizar os cálculos que foram solicitados. Dependendo do tipo de problema que esteja sendo resolvido, a dimensão e o método, a saída dos resultados é disponibilizada de forma diferente.

Em problemas unidimensionais, apenas quando é usado o método SGF e é requerida a reconstrução da grade espacial, é disponibilizada uma janela para fornecer os passos a utilizar na saída dos fluxos escalares em tabela e em forma de gráfico. Aqui é escolhido o passo espacial para dividir cada região na reconstrução espacial. Também é possível escolher se serão disponibilizados os resultados para o problema de autovalores e as matrizes auxiliares utilizadas no esquema iterativo NBI parcial. Este serviço tem o objetivo de oferecer a outros usuários a possibilidade de desenvolver esta metodologia, certificando—se que estão no caminho correto. O botão Confirmar permite seguir para o próximo menu.

Uma vez atingido o critério de parada do esquema iterativo, é disponibilizada uma janela contendo a saída dos fluxos escalares tabelados e em forma de gráfico, como ilustra a Figura 2. A tabela lista os fluxos escalares por posição, o número total de iterações realizadas até atingir o critério de parada e o tempo de execução em segundos. Em problemas  $S_N$  do tipo físico são mostrados os resultados da taxa de absorção para cada região, desde que a opção tenha sido solicitada antes do cálculo.

É conveniente observar que a natureza do método SGF permite definir a localização de um detector em qualquer posição do domínio, devido à possibilidade de reconstrução espacial. Por outro lado, no método DD, os detectores devem estar localizados em regiões previamente definidas com fronteiras coincidentes com os contornos dos nodos da grade de discretização. Em ambos os casos, os métodos SGF e DD, quando são resolvidos problemas  $S_N$  do tipo adjunto, a leitura do detector é obtida definindo—se a região onde se encontram localizadas as fontes de partículas neutras e os valores das mesmas, considerando também as condições de contorno para o fluxo físico, que são definidas na janela de resultados, como ilustra a Figura 3. O botão  $Salvar\ Resultados\$ permite guardar os resultados mostrados nas tabelas em arquivos de dados \*.txt.

Em problemas  $S_N$  bidimensionais do tipo físico, quando se pretende conhecer o fluxo escalar médio e a taxa de absorção em determinadas regiões do domínio, é disponibilizada uma

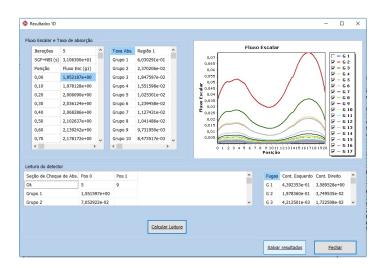


Figura 2- Saída de fluxos escalares em problemas unidimensionais.

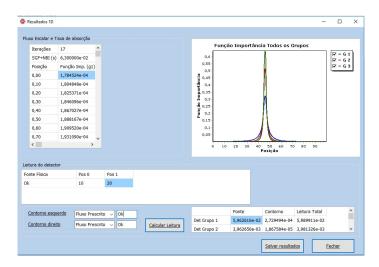


Figura 3- Cálculo da leitura do detector no problema adjunto unidimensional multigrupo.

seção para definir o número de regiões de interesse e a localização das mesmas em função da geometria do problema, definida anteriormente. Ademais, são mostrados os resultados para as fugas nos contornos estruturais do domínio. Os resultados são exibidos em tabelas como se pode observar na Figura 4. Em problemas  $S_N$  bidimensionais do tipo adjunto, a saída dos resultados é dada como a leitura dos detectores definidos anteriormente, devida a fontes físicas, que são declaradas como ilustra a Figura 5, e às condições de contorno para o fluxo físico incidente.

Em problemas bidimensionais também é possível visualizar os resultados graficamente. Aqui é utilizado um executável que utiliza *Gnuplot* 5.0.5 em sua versão para *Windows*. A pasta, chamada de "*Gnuplot* 5.0", contendo as bibliotecas e recursos do *Gnuplot* 5.0.5, deve estar localizada no mesmo endereço do arquivo executável.

#### 6. CONCLUSÕES

Neste trabalho foi desenvolvida uma aplicação da técnica adjunta em problemas de transporte de partículas neutras do tipo fonte-detector em geometria cartesiana na formulação  $S_N$ .

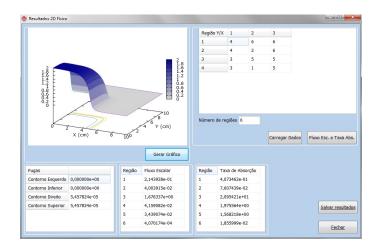


Figura 4- Resultados em problemas bidimensionais do tipo físico.

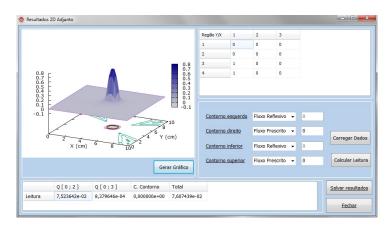


Figura 5- Leitura de detectores em problemas bidimensionais do tipo adjunto.

Para tanto, foram desenvolvidos e utilizados os métodos *SGF*–Adjunto e *SGF*–*CN*–Adjunto para problemas unidimensionais e bidimensionais, respectivamente.

Para gerar soluções numéricas para as equações nodais de diferença é usado o esquema iterativo *NBI* parcial que, para o problema adjunto, utiliza as mais recentes estimativas para todos os fluxos angulares adjuntos nas direções emergentes de um dado nodo espacial para determinar os fluxos angulares adjuntos nas direções incidentes no nodo e no sentido oposto à varredura de transporte.

Foi desenvolvido um aplicativo computacional que possibilita processar e comparar diferentes métodos, tanto no que diz respeito à precisão de soluções numéricas geradas por eles, como ao tempo de processamento, objetivando ganho computacional.

#### Agradecimentos

Os autores agradecem o apoio financeiro fornecido pela Fundação Carlos Chagas Filho de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio de Janeiro (FAPERJ) e pelo Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq). Jesús Pérez Curbelo recebeu financiamento por parte de CAPES Pró–estratégia e Faperj.

#### REFERÊNCIAS

- Andrade Lima, F. R., Gandini, A., Blanco, A., Lira, C. A. B. O., Maciel, E. S. G., Alvim, A. C. M., Silva, F.C., Melo, P. F. F., França, W. F. L., Baliño, J. L., Larreteguy, A. E. e Lorenzo, A. (1998), Recent advances in perturbative methods applied to nuclear engineering problems. Progress in Nuclear Energy, 1–2 Reviews from the X ENFIR/III ENAN Brazilian Joint Nuclear Conference, 23–97.
- Bal, G., Davis, A. B. e Langmore, I. (2011), A hybrid (Monte Carlo/deterministic) approach for multi–dimensional radiation transport. Journal of Computational Physics, 230, 7723–7735.
- Becker, T. L. e Larsen, E. W. (2011), "A general transform for variance reduction in Monte Carlo simulations", *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2011)*, Rio de Janeiro, RJ, Brazil, Latin American Section (LAS) / American Nuclear Society (ANS), ISBN: 978–85–63688–00–2.
- Bell, G. I. & Glasstone, S. (1970), "*Nuclear Reactor Theory*", Van Nostrand Reinhold, New York, USA. Bellout, M. C., Echeverría, D., Durlofsky, L. J., Foss, B. e Kleppe, J. (2012), Joint optimization of oil well placement and controls. Computational Geosciences, 16, 1061–1079.
- Bruss, D. E., Morel, J. E., Ragusa, J. C. (2017), "Adjoint–Based Uncertainty Quantification for Radiation Transport Calculations with Uncertain Cross-Section Data", M&C 2017 International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering, Jeju, Korea.
- Curbelo, J.P. (2017), "Aplicação da técnica adjunta em problemas de transporte do tipo fonte-detector na formulação de ordenadas discretas usando um método espectronodal", Tese de Doutorado, IPRJ/UERJ, Nova Friburgo.
- Curbelo, J.P., García, C. R., Alves Filho, H. e Barros, R.C. (2015), "Recent advances in the spectral Green's function method for monoenergetic slab–geometry fixed–source adjoint transport problems in  $S_N$  formulation", *International Nuclear Atlantic Conference–INAC 2015*, São Paulo, SP, Brazil, ISBN: 978–85–99141–06–9. Curbelo, J. P., da Silva, O. P., García, C. R. e Barros, R. C. (2017), "Shifting Strategy in the Spec-
- Curbelo, J. P., da Silva, O. P., García, C. R. e Barros, R. C. (2017), "Shifting Strategy in the Spectral Analysis for the Spectral Green's Function Nodal Method for Slab–Geometry Adjoint Transport Problems in the Discrete Ordinates Formulation", in *Integral methods in science and engineering*, Vol 2, Chap 20, Constanda, C et al (ed.), Birkhäuser Base.
- Curbelo, J.P. e Barros, R.C. (2017), "Application of the adjoint spectral Green's function—constant nodal method for one—speed X, Y—geometry discrete ordinates source—detector problems", M&C 2017 International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering, Jeju, Korea.
- Duderstadt, J. J. e Martin, W. R. (1979), "Transport Theory", Wiley-Interscience, New York, USA. Lewis, E. E. e Miller, W. F. (1993), "Computational methods of neutron transport", American Nuclear
- Society, Illinois, USA.
  Militão, D. S., Alves Filho, H. e Barros, R. C. (2012). A numerical method for monoenergetic si
- Militão, D. S., Alves Filho, H. e Barros, R. C. (2012), A numerical method for monoenergetic slab—geometry fixed—source adjoint transport problems in the discrete ordinates formulation with no spatial truncation error. International Journal of Nuclear Energy Science and Technology, 7, 151–165.
- Pautz, S. D., Franke, B. C., Adams, B. M., Swiler, L. P. e Blansett, E. L. (2017), "Adjoint–Based Sensitivities for Optimization of Satellite Electron/Proton Shields", M&C 2017 International Conference on Mathematics & Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering, Jeju, Korea.
- Peplow, D. E. (2012), Comparison of hybrid methods for global variance reduction in shielding calculations. Transactions of the American Nuclear Society, 107, 512–515.
- Prinja, A. K. e Larsen, E. W. (2010), "General Principles of Neutron Transport", in *Handbook of Nuclear Engineering*, Cacuci, D. G. (ed.), Springer Science+Business Media, New York, USA.
- Sjoden, G. E. (2002), Deterministic adjoint transport applications for He–3 neutron detector design. Annals of Nuclear Energy, 29, 1055–1071.
- Sjoden, G. E. e Ghita, G. M. (2009), "Transport methods used for homeland security and non-proliferation detection applications: an overview", *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2009)*, Saratoga Springs, New York, USA, American Nuclear Society, ISBN: 978–0–89448–069–0.
- Wagner, J. C., Peplow, D. E., Mosher, S. W. e Evans, T. M. (2011), Review of hybrid (deterministic/Monte Carlo) radiation transport methods, codes, and applications at Oak Ridge National Laboratory. Progress in Nuclear Science and Technology, 104, 808–814.
- Wang, C. e Abdel–Khalik, H. S. (2013), Exact–to–precision generalized perturbation theory for eigenvalue problems. Nuclear Engineering and Design, 256, 130–140.
- Zhang, K., Li, G., Reynolds, A.C., Yao, J. e Zhang, L. (2010), Optimal well placement using an adjoint gradient. Journal of Petroleum Science and Engineering, 73, 220–226.

# COMPUTATIONAL TOOL FOR SIMULATING SOURCE-DETECTOR TRANSPORT PROBLEMS APPLYING THE ADJOINT TECHNIQUE

Abstract. We present in this work a computational tool for simulating source—detector discrete ordinates  $(S_N)$  transport problems in order to generate numerical solutions which are accurate and computationally efficient. For this purpose, the adjoint technique was applied and spectral nodal methods were developed. For slab—geometry adjoint  $S_N$  problems, the adjoint spectral Green's function method (Adjoint—SGF) was extended to multigroup problems considering arbitrary L'th—order of scattering anisotropy, provided L < N, and non—zero prescribed boundary conditions for the forward  $S_N$  transport problem. For one—speed X,Y—geometry discrete ordinates  $(S_N)$  adjoint transport problems considering linearly anisotropic scattering in non—multiplying media, the Adjoint—SGF method was applied to solve the adjoint "one—dimensional" transverse—integrated  $S_N$  nodal equations with constant approximation for the terms corresponding to the transverse leakages in the forward problem. This coarse—mesh method is referred to as the Adjoint—SGF—CN method.

**Keywords:** Adjoint transport problem, Discrete ordinates adjoint equations, Spectral nodal methods, Source–detector problems, Computational tool