

TESIS
CARRERA DE DOCTORADO EN INGENIERIA NUCLEAR

ESTIMACION DE ERRORES Y AUMENTO DE LA PRECISION
EN METODOS NODALES DE TRANSPORTE

Oscar M. Zamonsky

Oscar M. Zamonsky
DOCTORANDO

Prof. Dr. Carlos J. Gho
DIRECTOR

Enero de 2000

Tesis presentada ante el Instituto Balseiro, Universidad Nacional de Cuyo, en cumplimiento parcial de los requisitos para optar al grado de Doctor en Ingeniería Nuclear.

Doctorando: Oscar M. Zamonsky

Director de Tesis: Prof. Dr. Carlos J. Gho

RESUMEN

En este trabajo se analiza la precisión de las soluciones generadas por métodos nodales de transporte neutrónico bajo la aproximación angular de Ordenadas Discretas. Dicho análisis conduce a nuevas metodologías numéricas que elevan la precisión de dichas soluciones y a estimaciones de error *a posteriori*.

El aumento de precisión se obtiene proponiendo ecuaciones que liberan al procedimiento numérico de errores de truncamiento y postulando reconstrucciones espaciales de los flujos angulares más precisas que las utilizadas hasta el presente.

En sistemas unidimensionales se obtiene en forma rigurosa un estimador de error *a posteriori* que en cierta clase de problemas permite cuantificar la precisión de las soluciones. Mediante comparaciones con los resultados obtenidos en una dimensión, se propone también un estimador de error *a posteriori* para sistemas multidimensionales.

La descomposición de los estimadores mencionados en indicadores *locales* permite cuantificar la distribución espacial de los errores de las soluciones, haciendo que la metodología propuesta sea particularmente apta para reslizar cálculos adaptivos.

Se presentan diversos ejemplos numéricos que validan los tratamientos teóricos realizados y ejemplifican los rangos de validez de las aproximaciones propuestas.

ABSTRACT

The accuracy of the solutions produced by the Discrete Ordinates neutron transport nodal methods is analyzed. The obtained new numerical methodologies increase the accuracy of the analyzed schemes and give *a posteriori* error estimators.

The accuracy improvement is obtained with new equations that make the numerical procedure free of truncation errors and proposing spatial reconstructions of the angular fluxes that are more accurate than those used until present.

An *a posteriori* error estimator is rigorously obtained for one dimensional systems that, in certain type of problems, allows to quantify the accuracy of the solutions. From comparisons with the one dimensional results, an *a posteriori* error estimator is also obtained for multidimensional systems.

Local indicators, which quantify the spatial distribution of the errors, are obtained by the decomposition of the mentioned estimators. This makes the proposed methodology suitable to perform adaptive calculations.

Some numerical examples are presented to validate the theoretical developments and to illustrate the ranges where the proposed approximations are valid.

Este trabajo se lo dedico a Nélide, Gissel, Ariel y Andrés, los quiero mucho.

A la memoria de mi padre, mi abuela y Alvaro Musso.

Todo comenzó con los famosos (al menos para mi) y a veces malditos (también al menos para mi) métodos nodales de transporte. Aunque el camino fue más largo de lo que me hubiera gustado, todo terminó con algo que me gusta (al menos a mi).

Durante estos años muchas personas colaboraron de una u otra forma con mi trabajo. Uno de ellos fue Hermann, que como jefe de mi División aguantó cualquier cosa de mi parte con tal de que terminara mi tesis. Siempre acomodó los trabajos del Grupo hablando con la gente, y en mi caso particular ésto realmente ayudó mucho. Como consecuencia de esta buena disposición han sufrido otros, como Edmundo y Felipe, quienes muchas veces llevaron la carga de tareas que debieron ser de mi responsabilidad. Quisiera ver qué van a decir ellos de Hermann cuando terminen sus respectivas tesis.

Con Carlos comenzamos con los métodos nodales de orden fijo, algunas mejoras a la precisión, algunos cálculos adaptivos. Durante el 96 comencé a interactuar con Fabián, quien estaba terminando su tesis sobre estimación de errores en Difusión, y con quien discutí muchas de nuestras ideas. Al principio Fabián insistía en la utilidad de estimar los errores en transporte *por dirección* y yo me resistía con argumentos de ahorro de memoria y tiempos de CPU. Finalmente le hice caso, en parte, y modificamos algo nuestra línea de trabajo. A Gustavo le gustó la idea, aunque creo que más que nuestra idea le gustó la precisión que se lograba con AHOT-N, y también comenzó a colaborar. A fines del 96 concurrí a una reunión sobre métodos de transporte en París y conocí a Azmy, Yousry de acá en más, quien es autor del método AHOT-N sobre el que trata fundamentalmente este trabajo. Di un Seminario en ORNL y se entusiasmó con nuestros resultados. En el 98 cuando hice una pasantía del FOMEC tenía colaborando conmigo un grupo de trabajo que cualquiera que esté en el tema seguro va a envidiar: Carlos de Director; Yousry y Gustavo de asesores, colaboradores, o como le quieran llamar; Fabián de crítico constructivo (aunque a la distancia porque de INVAP se fue a Suiza); Edmundo de consultor ante fórmulas tediosas; Felipe dando ánimo y contagiando su entusiasmo con su tesis; Claudio Padra escuchando y opinando en los puntos críticos; Gennusso gritando. Como si ésto fuera poco, todos ellos son mis amigos.

Después de una gran frustración allá por Septiembre del 98, cuando encontramos *nuestro* análisis *a priori* de errores ya publicado hace varios años, comenzamos con los análisis *a posteriori* en 1D. Con Gustavo y Yousry, quienes han sido más que coautores en todo esto, terminamos un trabajo bastante completo sobre el tema. Seguimos con la inercia y lo ampliamos a 2D.

Mientras todo esto pasaba en la oficina, en mi casa Nélica dando ánimo, soportando y apoyándome en todo como siempre, Gissel y Ariel bancándose mis horas extras y a veces mi mal humor y Andrés que nos dio un alegrón tremendo cuando agrandó nuestra familia.

De todo lo mencionado surgió este trabajo que como dije antes a mi me gusta, espero que a los referis también y que si usted lo lee al menos no le desagrade.

Lo anterior no es ni un resumen de la tesis, ni una reseña histórica, ni un agradecimiento, es mi versión resumida de la realidad a la que le agradezco mucho haber sido así.

Ahora si les agradezco de todo corazón a cada una de las personas que he mencionado antes por haber creado esta realidad. Gracias.

Índice General

1	Introducción	3
1.1	Métodos Nodales para resolver la ecuación de transporte neutrónico.	4
1.2	Análisis de errores en métodos numéricos de transporte.	7
1.3	Organización de este trabajo	8
2	El Método AHOT-N unidimensional	10
2.1	Ecuación de transporte en una dimensión	11
2.2	El Método AHOT-N unidimensional	12
2.2.1	Preliminares	12
2.2.2	Definición del método numérico	12
2.2.3	Implementación	13
2.3	Esquema en Diferencias Pesadas	14
2.4	Algunos ejemplos numéricos	16
2.5	Conclusiones	17
3	Análisis de errores <i>a priori</i> del método AHOT-N	19
3.1	Análisis <i>a priori</i> del método AHOT-N	20
3.1.1	Ejemplos numéricos	21
3.2	Conclusiones	25
4	Mejoras al método AHOT-N	27
4.1	Reconstrucción espacial de los flujos	27
4.2	Coefficientes de peso asintóticos	29
4.3	Conclusiones	33
5	Estimación de errores <i>a posteriori</i> del método AHOT-N.	34
5.1	La ecuación del error	34

5.2	Estimación de errores <i>a posteriori</i>	36
5.3	Indicadores de error	37
5.4	Propiedades del estimador de error	38
5.4.1	Orden del estimador de error	38
5.4.2	Forma residual del estimador e indicador	38
5.5	Validaciones numéricas	38
5.6	Conclusiones	42
6	El método AHOT-N multidimensional	45
6.1	Ecuación de transporte multidimensional	46
6.2	Definición del método numérico	47
6.3	Implementación	49
6.4	Ejemplos numéricos	50
6.5	Conclusiones	51
7	Precisión de las soluciones 2D	53
7.1	Reconstrucción basada en soluciones exactas 1D	54
7.1.1	Ejemplos numéricos	58
7.1.2	Conclusiones	60
7.2	Reconstrucción basada en soluciones sobre las características	60
7.2.1	Análisis numérico de las condiciones de contorno.	62
7.2.2	Ejemplos numéricos	63
7.2.3	Conclusiones	64
7.3	Conclusiones	65
8	Estimación de errores <i>a posteriori</i> del método AHOT-N multidimensional	67
8.1	Estimador de error <i>a posteriori</i>	68
8.2	Implementación del estimador	70
8.3	Ejemplos numéricos	71
8.4	Conclusiones	73
A	Solución analítica de la ecuación de transporte unidimensional en la aproximación S_N.	76

Capítulo 1

Introducción

Uno de los problemas más complicados de resolver relacionados con aplicaciones nucleares ha sido tradicionalmente el de transporte neutrónico. En este sentido se ha dedicado mucho esfuerzo en investigar la eficiencia computacional de diversos métodos numéricos propuestos. Con el tiempo, el avance del hardware y de la arquitectura de las computadoras hizo que las fronteras computacionales no fueran un límite para la implementación de cada vez más sofisticados métodos numéricos de transporte. Una evidencia de esto es que muchos cálculos que se efectuaban con modelos unidimensionales comenzaron a realizarse en dos y tres dimensiones, lo cual es actualmente, en muchos casos, el procedimiento estándar. Otra consecuencia apreciable del avance en las computadoras es el uso que actualmente se ha comenzado a dar en programas comerciales a aproximaciones numéricas que si bien son costosas computacionalmente producen resultados de muy alta precisión. Estos hechos han motivado a la comunidad científica a continuar avanzando en el desarrollo de técnicas numéricas sofisticadas que produzcan soluciones precisas y en el control automático de los errores de las soluciones obtenidas.

La solución de un problema de transporte neutrónico estacionario está basada en la obtención del flujo angular $\Psi(E, \vec{r}, \vec{\Omega})$ como función de la energía E , la posición \vec{r} y la dirección de vuelo de los neutrones $\vec{\Omega}$. En los métodos determinísticos, la variable E es comúnmente tratada con la aproximación *multigrupo* mientras que para el tratamiento de la *posición* y *dirección* ha sido propuesta una cantidad muy grande de aproximaciones. Uno de los esquemas más utilizados para el tratamiento de la variable angular $\vec{\Omega}$ es el método de *Ordenadas Discretas*, S_N , donde dicha variable es discretizada en un número finito de direcciones $\vec{\Omega}_i$, $i = 1, \dots, M$, y la ecuación de transporte es resuelta para la variable espacial \vec{r} en cada una de las direcciones consideradas (Carlson, 1958; Carlson, 1968). Esta aproximación, donde el acople entre direcciones está dado por el término de fuente, ha prosperado más que otras para el tratamiento de la variable angular ya que su implementación puede realizarse para un orden N general, a diferencia por ejemplo de la aproximación P_N donde se necesitan distintas rutinas para cada orden N (Stamml'er, 1983).

Seleccionado entonces el tratamiento *multigrupo* para la variable energética y la aproximación S_N para la angular falta definir un tratamiento adecuado para la variable espacial. En este sentido han sido utilizados tradicionalmente el método de *Elementos Finitos*, EF , y el de *Diferencias Finitas*, DF , siendo este último el más usado en el campo de la neutrónica. Si bien los argumentos que han hecho prosperar al método de DF sobre el de EF no son demasiado claros, éstos pueden resumirse en que por una parte la formulación de DF conduce a ecuaciones cuya interpretación relacionada con el proceso físico que describen es casi inmediata y por otra que la geometría de los sistemas nucleares, al menos a nivel de núcleo, es suficientemente sencilla como para ser bien

descrita por la discretización usual del método de *DF*.

En resumen puede decirse entonces que el método *clásico* utilizado para resolver la ecuación de transporte neutrónico a nivel de núcleo consiste en un tratamiento *multigrupo* en energía asociado a la aproximación direccional de *Ordenadas Discretas* con tratamiento espacial por *Diferencias Finitas*. La precisión de las soluciones obtenidas con este esquema depende de la estructura de grupos, de la cantidad de direcciones y de la discretización espacial utilizada.

A partir de la formulación clásica para resolver problemas de transporte neutrónico se han propuesto en los últimos años diversos esquemas que tienden a mejorar la *eficiencia computacional* del proceso de resolución de la ecuación de transporte, es decir, esquemas que produzcan la misma precisión en las soluciones que los esquemas clásicos con menor requerimiento de memoria y menor tiempo de CPU. Estos desarrollos tendieron en general a los esquemas llamados *nodales*, los que se caracterizan por producir soluciones precisas con poca discretización espacial y cuyo proceso iterativo de resolución es similar al del método de Diferencias Finitas.

El desarrollo de nuevos esquemas de resolución no ha sido acompañado sin embargo por desarrollos en el área de evaluación de errores. En general la precisión de las soluciones que se obtienen con cada esquema propuesto es evaluada tomando como referencia las soluciones obtenidas con esquemas clásicos suficientemente discretizados en espacio y ángulo.

En este trabajo se proponen mejoras a un esquema nodal utilizado para resolver la ecuación de transporte neutrónico y se proponen métodos para estimar los errores producidos por el mismo.

Antes de entrar en más detalles acerca de lo tratado en este trabajo, en las dos Secciones siguientes haremos una revisión más completa del estado de los métodos nodales de transporte y del análisis de errores de sus soluciones.

1.1 Métodos Nodales para resolver la ecuación de transporte neutrónico.

En todos los métodos numéricos utilizados para resolver la ecuación de transporte, el dominio computacional \mathcal{D} es particionado en subdominios disjuntos \mathcal{C}_k , $k = 1, \dots, K$, en cuyo interior el material es homogéneo. En particular, los Métodos Nodales han sido propuestos para mejorar la precisión de las soluciones que se obtienen en celdas homogéneas de gran tamaño, también llamadas *nodos*. Todos estos métodos se caracterizan por expandir los flujos en el interior de cada celda y en sus interfases en una base local, la que en general está formada por polinomios de orden máximo predeterminado. De esta forma, la mayor complejidad que estos métodos presentan para resolver el problema compete con la menor cantidad de mallas requerida para obtener una buena precisión, y por lo tanto, en sistemas con relativamente grandes regiones homogéneas el esfuerzo computacional requerido es mucho menor que el de los esquemas clásicos, por ejemplo *DF*, para obtener soluciones del mismo grado de precisión.

El procedimiento usual en los métodos Nodales consiste en multiplicar la ecuación de transporte en cada grupo de energía y en cada dirección discreta, por un polinomio de orden λ , $\lambda = 0, \dots, \Lambda$, en cada una de las variables espaciales, e integrar las ecuaciones resultantes en cada celda \mathcal{C}_k para obtener las llamadas *ecuaciones de balance*. Esto conduce a un sistema de ecuaciones cuyas incógnitas son los momentos de la proyección sobre los polinomios utilizados del flujo angular en el interior de los nodos y de los flujos en sus superficies salientes. Para cerrar el sistema de

ecuaciones así obtenido suele seguirse el procedimiento de integración transversal, en el que se multiplica la ecuación de transporte por la proyección de la base en cada dirección espacial y se integran las ecuaciones resultantes en cada C_k . Las ecuaciones diferenciales unidimensionales así obtenidas son similares a la ecuación de transporte unidimensional donde a la fuente se le agrega un término de *fugas transversales*. La precisión de los métodos nodales depende fundamentalmente del procedimiento utilizado para resolver estas ecuaciones y del orden Λ .

El método de Diferencias Finitas puede considerarse como un método nodal de orden *cero* donde en vez de resolver las ecuaciones unidimensionales se utiliza una interpolación lineal entre el flujo medio de cada celda con los flujos salientes y entrantes a la misma.

Los métodos nodales difieren entre sí en el orden de la aproximación Λ , la forma en que se resuelven las ecuaciones unidimensionales y las aproximaciones que se realicen para representar los momentos de alto orden del flujo angular.

El primer método nodal, propuesto por Lathrop (Lathrop, 1969), utiliza un orden de aproximación $\Lambda = 2$ y las ecuaciones finales se llevan a una forma similar a las del esquema diamante de Diferencias Finitas. Posteriormente al trabajo de Lathrop fueron propuestos muchos métodos nodales de alto orden para resolver la ecuación de transporte unidimensional, entre los que se destacan los de (Vaidyanathan, 1979), (Alcouffe, 1979) y (Lawrence, 1979). Los trabajos multidimensionales fueron retomados por Wagner en 1979 (Wagner, 1979) y Lawrence y Dorning en 1980 (Lawrence, 1980) quienes reportaron un método nodal 2D utilizando una representación cuadrática de los flujos en el interior de las celdas y de orden cero para los flujos en las superficies, método *C-Q*. Walters y O'Dell en 1981, (Walters, 1981), analizaron métodos con expansión lineal en el interior y la superficie de los nodos y propusieron distintas formas de obtener los coeficientes de la interpolación entre los flujos en el interior de las celdas con los de la superficie. En dicho trabajo se muestra la mejora en la precisión de las soluciones obtenidas conservando los momentos lineales en los flujos superficiales, lo que dió origen al método *Lineal-Lineal*, *LL*, actualmente utilizado como opción en el sistema *DORT-TORT* (Rhoades, 1996). La complejidad de las ecuaciones finales obtenidas con los esquemas estudiados en el trabajo anterior fue simplificada por el mismo Walters (Walters, 1986) al proponer el método *Lineal-Nodal*, *LN*, donde se hacen hipótesis simplificativas en algunos de los momentos lineales del flujo angular. Los métodos anteriores pueden clasificarse como de *orden fijo*, ya que las ecuaciones finales de cada uno están fijadas por el orden Λ preestablecido.

Por lo general se han realizados estudios donde se compara la eficiencia computacional de diferentes métodos, es decir, dada una solución de referencia, cuáles son los requerimientos de memoria y tiempo de CPU para obtener una dada precisión. Este tipo de estudios ha mostrado las ventajas de los métodos nodales de orden fijo como el *CC*, *CQ* o *LN* respecto al esquema de Diferencias Finitas (Babruzzaman, 1984; Azmy, 1988b, Zamonsky, 1991). Por otra parte, para cada dirección angular, la precisión de las soluciones obtenidas con estos métodos puede ser aumentada solamente densificando el mallado espacial.

La primera formulación de un método de *orden general* fue hecha por Azmy, (Azmy, 1988a), en el llamado método AHOT-N, *Arbitrarily High Order Transport Method of the Nodal Type*. Las ecuaciones que se obtienen en este esquema están en función del orden Λ , por lo que la precisión de las soluciones puede modificarse no sólo a través del mallado sino también variando el orden. Las ecuaciones finales de este método fueron llevadas a la forma de diferencias pesadas, *Weighted Diamond-Difference Form*, *WDD*, con lo que el método puede ser implementado siguiendo los procedimientos usuales empleados en Diferencias Finitas.

El método AHOT-N en su forma WDD está caracterizado básicamente por las siguientes propiedades

- El orden Λ es un grado de libertad que puede utilizarse para mejorar la calidad de las soluciones, ya que las ecuaciones finales están dadas en forma general en función de este parámetro.
- El método se caracteriza por un solo coeficiente de peso espacial por dirección y ordenada discreta para todos los momentos del flujo angular. Estos coeficientes no dependen de la solución del problema por lo que pueden ser calculados una sola vez antes de comenzar el proceso iterativo.
- Las ecuaciones finales son simples y su esquema de cálculo es similar a los procedimientos usados en *DF*, lo que permite su fácil implementación en códigos clásicos ya existentes.
- Se conservan los momentos *bilineales* del flujo angular. Si bien esto es necesario para obtener la forma *WDD*, también contribuye a aumentar la precisión de las soluciones.
- El método da como resultado los momentos de la expansión del flujo angular en la base local de cada celda y los del flujo superficial en las interfases entre celdas. De esta forma el flujo dentro de cada celda puede reconstruirse puntualmente de una manera muy sencilla utilizando los momentos interiores. En general se le llamará $\tilde{\psi}$ a esta reconstrucción.

Hasta el presente el método AHOT-N ha sido propuesto como un método apto para generar benchmarks de transporte (Azmy, 1997) pero su implementación como esquema de cálculo neutrónico en códigos comerciales aún no ha sido reportada. Recientemente han sido realizados algunos análisis referentes a su paralelización (Azmy, 1993, 1997), lo cual amplía las posibilidades de su implementación para resolver problemas reales.

El método AHOT-N posee dos problemas fundamentales:

- Los coeficientes de peso espacial son rápidamente contaminados de errores de truncamiento para órdenes altos de aproximación o tamaños chicos de celda medidos en términos de caminos libres medios.
- La reconstrucción $\tilde{\psi}$ es discontinua en las interfases de las celdas, (Azmy, 1997), donde además es de menor precisión que los flujos superficiales provistos por el método.

En este trabajo se hacen las siguientes contribuciones tendientes a solucionar los problemas mencionados:

- Se proponen coeficientes de peso asintóticos, libres de errores de truncamiento, que eliminan las inestabilidades de las soluciones y por lo tanto permiten resolver el problema de transporte con cualquier tamaño de celda u orden de aproximación.
- Se proponen metodologías sencillas para reconstruir los flujos en el interior de las celdas con mayor precisión que la dada por $\tilde{\psi}$. En el caso unidimensional se logra una reconstrucción continua en todo el dominio y superconvergente respecto a $\tilde{\psi}$.

1.2 Análisis de errores en métodos numéricos de transporte.

En cualquier área de la ingeniería es importante conocer los errores que se tienen luego de realizar algún cálculo, ya que éstos pueden afectar por ejemplo parámetros relacionados con la seguridad y el costo. Es usual que cualquier resultado proveniente de una técnica experimental esté asociado con un error, sin embargo, no tan usual pero no menos importante es asociarle también un error a las cantidades calculadas en cualquier etapa de diseño.

Los cálculos neutrónicos tienen en general como dato la geometría del sistema y las secciones eficaces de cada material involucrado y en ellos está implícito algún modelo simplificado de la situación real. Este proceso conduce a los llamados *errores de idealización*, (Jatuff, 1997b), los que pueden cuantificarse solamente a través del sentido común y la experiencia del usuario. Sin embargo la cuantificación de los errores asociados a cada etapa de dicho proceso es esencial para ayudar a la evaluación de los errores de idealización.

En adelante se describen los errores provenientes del cálculo, es decir del proceso de resolución aproximada de la ecuación de transporte neutrónico en la geometría y condiciones del modelo adoptado.

La cuantificación de los errores obtenidos al resolver una ecuación diferencial se realiza a través del análisis *a posteriori* de errores, en el que la solución generada por la aproximación numérica es utilizada para su evaluación a través de los llamados estimadores *a posteriori* de error. Tan importante como conocer el error obtenido en un cálculo es poder identificar las regiones donde la aproximación numérica puede ser refinada a efectos de aumentar su precisión. Esto se logra usando *indicadores locales* de error, los que proveen información *local* de los errores obtenidos. Estos *indicadores* permiten el uso de técnicas adaptivas que, en el caso del método AHOT-N, pueden mejorar la aproximación localmente tanto densificando el mallado como aumentando el orden de la aproximación donde sea necesario.

Otro tipo de análisis es el análisis *a priori* de errores. En éste se utilizan ciertas propiedades de las soluciones numéricas y de la ecuación diferencial a resolver para obtener información cualitativa de la convergencia de las soluciones. Si bien este tipo de análisis no cuantifica los errores, permite conocer propiedades tales como la velocidad con que las soluciones aproximadas tienden a las soluciones exactas y por lo tanto es de gran utilidad a la hora de elegir un método numérico para resolver un dado problema.

Si el cálculo neutrónico de transporte es considerado como un problema donde los datos de entrada son *exactos*, los errores que se obtengan estarán relacionados con la estructura de grupos y con el tratamiento angular y espacial de la ecuación diferencial. *En este trabajo se analizan los errores asociados a métodos nodales de transporte bajo la aproximación de Ordenadas Discretas desde el punto de vista de su tratamiento espacial.*

En el área de transporte neutrónico se han hecho muchos estudios *a priori* de errores referidos a métodos numéricos unidimensionales, siendo escasa la bibliografía referida al análisis de errores en el caso multidimensional.

Los análisis *a priori* están basados en general en la continuidad de las secciones eficaces y la derivabilidad de las fuentes externas dentro de las celdas, lo cual asegura la derivabilidad de las soluciones aproximadas dentro de cada celda. Estas hipótesis se verifican siempre en los problemas unidimensionales, basta notar que en cualquier discontinuidad material o de fuente externa puede

colocarse un límite de malla. Esta situación es muy diferente en problemas multidimensionales. Consideremos por ejemplo una celda rectangular sobre la que incide un flujo angular Ψ_L por su cara izquierda y Ψ_B por la inferior correspondientes a una dirección positiva en ambos cosenos directores respecto a los ejes x e y , $\mu > 0$ y $\eta > 0$ respectivamente. En la situación general, $\Psi_L \neq \Psi_B$, la derivada parcial de Ψ respecto a x es distinta a la derivada de Ψ respecto a y a lo largo de la característica $y = \frac{\eta}{\mu}x$, y más aún, en un medio puramente absorbente el flujo angular es discontinuo en esta característica. Esta propiedad de las soluciones multidimensionales dificulta no solamente el análisis de errores sino también la definición misma del error puntual. De estas consideraciones surge también que no es posible extender un análisis de errores en una dimensión a casos multidimensionales ya que son dos problemas completamente distintos.

El primer análisis *a priori* de errores aplicado a las soluciones de la ecuación de transporte unidimensional donde se considera el acoplamiento de direcciones a través de la fuente de scattering fue realizado por Larsen y Nelson (Larsen, 1982). En dicho trabajo se analizan diversos esquemas clásicos y los autores reportan para el método de *DF*, *Diamond Difference*, una convergencia global del flujo angular de $O(h^2)$ cuando h (máximo tamaño de celda en la discretización) tiende a cero. Victory y Ganguly analizaron las propiedades de convergencia del método de momentos propuesto por Vaidyanathan (Vaidyanathan, 1979), el cual desde el punto de vista de este tipo de análisis es equivalente al método AHOT-N unidimensional, donde muestran que los flujos angulares son $O(h^{\Lambda+2})$ con superconvergencia de los flujos medios y salientes que son $O(h^{2\Lambda+2})$. (Victory, 1986).

La importante mayor velocidad de convergencia de las soluciones del método AHOT-N hacia la solución exacta comparada con la de *DF*, motiva también la necesidad de estudiar más profundamente el método AHOT-N.

En este trabajo se analizan los principales resultados de convergencia obtenidos para el método AHOT-N y se propone una estimación a posteriori de errores para este método.

1.3 Organización de este trabajo

Este trabajo se desarrolla desde una a varias dimensiones y se basa fundamentalmente en aumentar la precisión de las soluciones generadas por métodos nodales de alto orden para transporte neutrónico y estimar *a posteriori* el error de dichas soluciones.

Si bien el producto final no es un código para cálculo neutrónico, en los casos en que el desarrollo conduce a nuevas ecuaciones o algoritmos de cálculo se explica en forma detallada su implementación. De esta forma, los resultados obtenidos pueden ser implementados no solamente en un nuevo programa computacional, sino también en programas ya existentes cuya metodología numérica sea similar a la tratada aquí.

En el Capítulo 2 se introduce el método AHOT-N unidimensional y se describe su implementación, analizándose a través de problemas ejemplo la precisión de algunas reconstrucciones de la solución.

En el Capítulo 3 se analiza el análisis *a priori* de errores del método AHOT-N unidimensional. Se presentan ejemplos numéricos a efectos de cuantificar el rango de validez de las hipótesis en las que se basa dicho análisis y analizar asimismo el comportamiento de los errores en situaciones que simulan la situación multidimensional donde dichas hipótesis no se verifican.

Si bien el método AHOT-N ha sido propuesto para producir soluciones muy precisas, las mismas

se contaminan de errores de truncamiento en algunas situaciones particulares. Por otra parte, las reconstrucciones de dichas soluciones en el sistema calculado empleadas hasta el presente no extraen toda la información que puede obtenerse de las mismas. En el Capítulo 4 se propone una solución al primer problema así como procedimientos sencillos para reconstruir las soluciones de forma tal de extraer la máxima precisión de las mismas. Los contenidos de este Capítulo han sido publicados en (Azmy, 1998), (Buscaglia, 1999) y (Zamonsky, 1999a, b, 2000).

En el Capítulo 5 se introduce un estimador de errores *a posteriori* para el método AHOT-N unidimensional así como indicadores locales de error. Se demuestra en forma rigurosa que el estimador propuesto acota superiormente al error real y se analiza a través de ejemplos numéricos el comportamiento de los indicadores. El contenido de este Capítulo ha sido publicado en (Zamonsky, 2000).

El método AHOT-N multidimensional es introducido en el Capítulo 6, del que parte de sus contenidos han sido publicados en (Zamonsky 1991). En el Capítulo 7 se proponen varias reconstrucciones de las soluciones generadas por el mismo, las que mejoran notoriamente la precisión de los flujos obtenidos en el sistema.

Basado en el estimador de error obtenido para el problema unidimensional y las reconstrucciones recién mencionadas, en el Capítulo 8 se introduce un estimador de error *a posteriori* para el método AHOT-N multidimensional. Si bien el mismo no es introducido de manera rigurosa, varios ejemplos numéricos ilustran su buen comportamiento respecto al error verdadero así como la capacidad de los indicadores locales para reproducir la forma espacial del error.

Capítulo 2

El Método AHOT-N unidimensional

El método AHOT-N fue propuesto por Azmy (Azmy, 1988a) para geometrías multidimensionales. Como todo método nodal de transporte, a través de integraciones transversales se obtienen ecuaciones diferenciales unidimensionales que difieren de la conocida ecuación de transporte 1D en el término de fuente. La solución de estas ecuaciones es utilizada junto a ecuaciones de balance para resolver el problema espacial en cada celda. A diferencia de otros métodos nodales, en AHOT-N las ecuaciones diferenciales unidimensionales se resuelven de forma exacta. Este procedimiento es el que contribuye en gran parte a la elevada precisión de este método numérico.

Teniendo en cuenta entonces que los métodos nodales multidimensionales resuelven una ecuación de transporte unidimensional, resulta importante, antes de analizar el método AHOT-N multidimensional, estudiar detalladamente al mismo en su forma unidimensional.

Es importante remarcar que la aproximación SN unidimensional posee solución analítica aún cuando se incluye en la fuente el término de scattering. Esto hace que no exista en general interés en analizar profundamente esquemas numéricos unidimensionales que no sean generalizables a más direcciones espaciales. Como se mencionó antes, éste no es el caso del método AHOT-N.

Habiendo discretizado el dominio en celdas homogéneas disjuntas, en el método AHOT-N unidimensional la fuente se expande en el interior de cada celda en polinomios de Legendre hasta un orden Λ predeterminado. Multiplicando la ecuación de transporte resultante por cada polinomio e integrando en cada celda, se obtienen $\Lambda + 1$ ecuaciones de balance que relacionan los momentos del flujo angular en el interior de cada celda con el flujo angular en las interfases y los momentos de la fuente. Resolviendo en forma exacta la ecuación de transporte (con la fuente truncada a orden Λ) se obtienen nuevas relaciones entre las incógnitas mencionadas que completan el sistema de ecuaciones anterior. La solución de este esquema numérico está dada por los $\Lambda + 1$ momentos del flujo angular en cada dirección discreta. Estos momentos permiten reconstruir puntualmente el flujo angular en todo punto x del sistema a través del desarrollo a orden Λ del flujo en cada dirección. Esta reconstrucción, llamada $\tilde{\psi}$, es discontinua en las interfases. Por otra parte, utilizando los momentos mencionados es posible calcular también los momentos de la expansión de la fuente (a través del scattering), y de esta forma utilizar la solución exacta obtenida por el método numérico para obtener otra reconstrucción del flujo angular, llamada ψ . De ambas reconstrucciones puede decirse que, si bien $\tilde{\psi}$ es más sencilla de evaluar que ψ , esta última no sólo es más precisa sino que es continua en todo x .

En este Capítulo se describe el método AHOT-N en su forma 1D y se analizan ciertas propiedades de las soluciones numéricas que con él se obtienen.

En la primera Sección se describe la ecuación de transporte en una dimensión empleando la notación que será utilizada en el resto del trabajo. Luego se define el método numérico, se detalla su implementación y se deduce el esquema en diferencias pesadas (WDD) utilizado para obtener las ecuaciones finales de la formulación del método AHOT-N. En la Sección 2.4 se muestran algunos ejemplos numéricos remarcando las diferentes reconstrucciones posibles de los flujos.

2.1 Ecuación de transporte en una dimensión

Consideremos la ecuación monoenergética de transporte en geometría unidimensional cartesiana

$$\mu \frac{d\Psi}{dx}(x, \mu) + \sigma(x)\Psi(x, \mu) = c(x)\sigma(x) \int_{-1}^1 k(x, \mu', \mu)\Psi(x, \mu')d\mu' + q(x, \mu), \quad (2.1)$$

con condiciones de contorno $\Psi(0, \mu) = 0$ $\mu \in (0, 1]$ y $\Psi(L, \mu) = 0$, $\mu \in (-1, 0]$. $\Psi(x, \mu)$ es el flujo angular, $\mu \in [-1, 1]$ es el coseno del ángulo entre la dirección positiva del eje x y la dirección de movimiento de los neutrones, y $x \in [0, L]$ es la variable espacial donde L es el ancho del slab. La fuente externa q , la sección eficaz total macroscópica σ y la relación de scattering $c \leq 1$ son no negativas y constantes a trozos en x . El kernel de scattering $k(x, \mu', \mu)$ es no negativo, constante a trozos en x , satisface la condición de normalización

$$\int_{-1}^1 k(x, \mu', \mu) d\mu = 1 \quad (2.2)$$

y la condición de simetría $k(x, \mu', \mu) = k(x, \mu, \mu')$.

La aproximación de ordenadas discretas a (2.1) está dada por

$$\mu_i \frac{d\psi_i^e}{dx}(x) + \sigma(x)\psi_i^e(x) = c(x)\sigma(x) \sum_{j=1}^N w_j k_{ji}(x)\psi_j^e(x) + q_i(x) \quad (2.3)$$

con condiciones de contorno $\psi_i^e(0) = 0$, $\mu_i > 0$, y $\psi_i^e(L) = 0$, $\mu_i < 0$, donde $k_{ji}(x) \equiv k(x, \mu_j, \mu_i)$. Cada dirección está definida por los cosenos directores de la cuadratura μ_i , ($\mu_i \neq 0$), $i = 1, \dots, N$, con pesos asociados w_i ; $\psi_i^e(x)$ es la aproximación de ordenadas discretas a $\Psi(x, \mu_i)$ y $q_i(x) \equiv q(x, \mu_i)$. Definiendo las siguientes matrices de dimensión $N \times N$

$$\underline{\underline{\mu}} \equiv \begin{pmatrix} \mu_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \mu_2 & 0 & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \ddots & 0 & \vdots \\ \vdots & \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \mu_N \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{S}}(x) \equiv c(x) \begin{pmatrix} w_1 k_{11}(x) & w_2 k_{21}(x) & \cdots & w_N k_{N1}(x) \\ w_1 k_{12}(x) & w_2 k_{22}(x) & \cdots & w_N k_{N2}(x) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ w_1 k_{1N}(x) & w_2 k_{2N}(x) & \cdots & w_N k_{NN}(x) \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

y los vectores

$$\underline{\underline{\psi}}^e(x) \equiv \begin{pmatrix} \psi_1^e(x) \\ \vdots \\ \psi_N^e(x) \end{pmatrix}, \quad \underline{\underline{q}}(x) \equiv \begin{pmatrix} q_1(x) \\ \vdots \\ q_N(x) \end{pmatrix}, \quad (2.5)$$

la ecuación 2.3 puede escribirse de la siguiente manera:

$$\frac{d\underline{\underline{\psi}}^e}{dx}(x) + \underline{\underline{A}}(x)\underline{\underline{\psi}}^e(x) = \underline{\underline{\mu}}^{-1}\underline{\underline{q}}(x) \equiv \underline{\underline{f}}(x) \quad (2.6)$$

donde $\underline{\underline{A}}(x) \equiv \underline{\underline{\mu}}^{-1}\sigma(x) \left(\underline{\underline{I}} - \underline{\underline{S}}(x) \right)$, siendo $\underline{\underline{I}}$ la matriz identidad de dimensión $N \times N$. En la notación matricial las condiciones de contorno se expresan como $\psi_i^e(a_i) = 0$, donde $a_i = 0$ si $\mu_i > 0$, y $a_i = L$ si $\mu_i < 0$. Aunque la Ec. (2.6) puede ser resuelta en forma exacta, es importante desarrollar aproximaciones numéricas para su resolución que puedan ser extendidas a más dimensiones, criterio válido para el método AHOT-N.

2.2 El Método AHOT-N unidimensional

En esta Sección se describe el método AHOT-N unidimensional utilizando una formulación que permite no sólo su implementación sino también su análisis de errores que desarrollaremos más adelante en este trabajo.

2.2.1 Preliminares

En esta Sección se dan algunas definiciones que serán de utilidad en los desarrollos posteriores. Seguiremos la notación utilizada en (Victory, 1986) y (Azmy, 1988a).

Sean $C^N[0, L]$ ($C_p^N[0, L]$) los espacios de N -uplas de funciones reales continuas (continuas por trozos) respectivamente en $[0, L]$, y definamos los siguientes operadores:

$$(\mathbf{S}F)_i(x) = \left(\underline{\underline{S}}F \right)_i(x), \quad i = 1, \dots, N \quad (2.7)$$

$$(\mathbf{L}F)_i(x) = \frac{1}{\mu_i} \int_{a_i}^x \exp \left\{ -\frac{1}{\mu_i} \int_{x'}^x \sigma(s) ds \right\} \sigma(x') F_i(x') dx', \quad i = 1, \dots, N \quad (2.8)$$

El operador \mathbf{L} mapea $C_p^N[0, L]$ en $C^N[0, l]$, mientras que \mathbf{S} mapea $C_p^N[0, L]$ en sí mismo. Con las definiciones anteriores, la Ec. (2.6) puede reescribirse como

$$\psi_i^e = (\mathbf{L} [\mathbf{S}\psi_i^e + q/\sigma])_i \quad (2.9)$$

Las definiciones anteriores resultan más claras notando que si $\underline{u} = \mathbf{L}\underline{f}$, entonces

$$\frac{d\underline{u}}{dx} + \underline{\underline{\mu}}^{-1}\sigma(x)\underline{u}(x) = \underline{f}(x) \quad (2.10)$$

2.2.2 Definición del método numérico

Para introducir el método AHOT-N es necesario definir un subespacio de $C_p^N[0, L]$ de dimensión finita, \tilde{V} . Sea el dominio $[0, L]$ particionado en un número finito de celdas disjuntas $\{C_k, k = 1, \dots, K\}$ y \tilde{V} el subespacio de $C_p^N[0, L]$ tal que cada componente es un polinomio de grado menor o igual que Λ en cada C_k . No se impone continuidad para los elementos de \tilde{V} en las interfases de las celdas, de hecho, Λ puede variar de una celda a otra. La dimensión de \tilde{V} es $NK(\Lambda + 1)$. El centro de la celda $C_k = [x_{k-1/2}, x_{k+1/2})$ es x_k ; su ancho es h_k y $h \equiv \max \{h_k : k = 1, \dots, K\}$

Sea \mathbf{M} el operador que mapea $C_p^N[0, L]$ en \tilde{V} definido como la proyección ortogonal en norma L^2 , a saber, para $g \in C_p^N[0, L]$,

$$\int_0^L (\underline{g}(x) - \mathbf{M}\underline{g}(x)) \cdot \tilde{v}(x) dx = 0 \quad \forall \tilde{v} \in \tilde{V}. \quad (2.11)$$

Por simplicidad, $\underline{\mathbf{M}}g$ será en algunos casos llamado \tilde{g} .

La solución numérica, o aproximada, $\underline{\psi} = (\psi_i)$, producida por el método AHOT-N está definida por

$$\psi_i = (\underline{\mathbf{L}}\underline{\mathbf{M}}[\underline{\mathbf{S}}\underline{\psi} + q/\sigma])_i. \quad (2.12)$$

Teniendo en cuenta la Ec. (2.10) y dado que $\underline{\mathbf{M}}$ conmuta con $\underline{\mathbf{S}}$, es decir $\underline{\mathbf{M}}\underline{\mathbf{S}}\underline{\psi} = \underline{\mathbf{S}}\underline{\mathbf{M}}\underline{\psi} = \underline{\mathbf{S}}\tilde{\psi}$, $\underline{\psi}$ puede ser visto como la solución de

$$\underline{\mu} \frac{d\underline{\psi}}{dx}(x) + \sigma(x)\underline{\psi}(x) = \sigma(x)\underline{\underline{\mathbf{S}}}(x)\tilde{\underline{\psi}}(x) + \tilde{q}(x) \quad (2.13)$$

En este punto ha quedado definido el método AHOT-N en una dimensión a través de la solución producida por el mismo, la cual está dada por la Ec. (2.12).

2.2.3 Implementación

Con el método numérico definido, en esta Sección se darán los detalles de su implementación.

Multiplicando la Ec (2.12) por un vector $\tilde{v} \in \tilde{V}$ e integrando por partes sobre una celda $C_k = (x_{k-1/2}, x_{k+1/2})$ se tiene:

$$\int_{C_k} \left(-\underline{\mu}\tilde{\psi} \cdot \frac{d\tilde{v}}{dx} + \sigma_k\tilde{\psi} \cdot \tilde{v} \right) dx + \underline{\mu}\underline{\psi}(x_{k+1/2}) \cdot \tilde{v}(x_{k+1/2}) - \underline{\mu}\underline{\psi}(x_{k-1/2}) \cdot \tilde{v}(x_{k-1/2}) = \int_{C_k} (\sigma_k\underline{\underline{\mathbf{S}}}\tilde{\psi} + \tilde{q}) \cdot \tilde{v} dx. \quad (2.14)$$

Como $d\tilde{v}/dx$ es un polinomio de grado menor que Λ , $\underline{\psi}$ ha sido reemplazado por $\tilde{\psi}$ en las integrales de la Ec. (2.14). Esta ecuación, conocida como *ecuación de balance*, es una de las ecuaciones fundamentales del método, y provee una relación entre $\tilde{\psi}$ y el valor de $\underline{\psi}$ en los bordes de cada celda. Los valores de $\underline{\psi}$ en la frontera izquierda (derecha) de una dada celda son los flujos entrantes *conocidos* para aquellas componentes con $\mu_i > 0$ (< 0), respectivamente. *Conocidos* significa que los flujos entrantes están dados por las condiciones de contorno o han sido calculados en el esquema de barrido espacial. Para obtener un sistema cerrado de ecuaciones, la Ec. (2.14) se complementa con una expresión que relaciona los flujos salientes con los entrantes y $\tilde{\psi}$ en la celda. Esta relación se obtiene a través de la solución exacta de la Ec. (2.13) evaluada en la frontera saliente de la celda, la cual puede ser evaluada en forma analítica ya que el miembro derecho de dicha ecuación es un polinomio.

Es importante remarcar que, aunque los flujos salientes son obtenidos en función de los entrantes y de $\underline{\psi}$ a través de la solución exacta de la Ec. (2.14), esto no significa que ellos son exactos, ya que en la Ec. (2.14) la fuente de scattering es aproximada.

A efectos de obtener las ecuaciones explícitas del método es necesario definir una base de \tilde{V} . El método AHOT-N utiliza como tal polinomios de Legendre, $p_{\lambda,k}$, es decir

$$\underline{e}^{(i,\lambda,k)} = \underline{\delta}^{(i)} p_{\lambda,k} \quad (2.15)$$

es la base de \tilde{V} , donde $\underline{\delta}^i$ es el vector de \mathbb{R}^N cuya i -ésima componente es 1 y todas las demás son nulas, y

$$\begin{aligned} p_{\lambda,k}(x) &= P_\lambda[2/h_k(x - x_k)] & \text{si } x \in C_k, \\ &= 0 & \text{otro caso} \end{aligned} \quad (2.16)$$

donde P_λ es el polinomio de Legendre no normalizado de orden λ , x_k es el centro de la celda C_k , y h_k su tamaño. De esta forma, cualquier $\underline{g} \in C_p^N[0, L]$ puede expresarse como

$$\underline{g}(x) = \sum_{\lambda=0}^{\infty} (2\lambda + 1) \underline{g}_{(\lambda,k)} p_{\lambda,k}(x), \quad x \in C_k, \quad k = 1, \dots, K, \quad (2.17)$$

donde $\underline{g}_{(\lambda,k)}$ es el momento de orden λ de la expansión de \underline{g} en polinomios de Legendre dentro de la celda C_k , el cual está dado por

$$\underline{g}_{(\lambda,k)} = \frac{1}{h_k} \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \underline{g}(x) p_{\lambda,k}(x) dx \equiv \langle p_{\lambda,k}, \underline{g} \rangle. \quad (2.18)$$

El operador de proyección \mathbf{M} toma una forma particularmente simple debido a la ortogonalidad de $p_{\lambda,k}$, ésta es

$$\tilde{\underline{g}}(x) = \mathbf{M}\underline{g}(x) = \sum_{\lambda=0}^{\Lambda} (2\lambda + 1) \underline{g}_{(\lambda,k)} p_{\lambda,k}(x), \quad x \in C_k, \quad k = 1, \dots, K. \quad (2.19)$$

Para una dada celda C_k las incógnitas son los $N \times (\Lambda + 1)$ momentos $\{\underline{\psi}_{i(\lambda,k)}\}$ y los N flujos salientes $\{\psi_i(x_{k\pm 1/2})\}$ (el signo depende del signo de μ_i). La ecuación (2.14) provee $N \times (\Lambda + 1)$ ecuaciones que se obtienen tomando $\tilde{\underline{v}} = \underline{e}^{i,\lambda,k}$, k está fijado, para $i = 1, \dots, N$ y $\lambda = 0, \dots, \Lambda$. De esta forma, la Ec. (2.14) toma la forma

$$\frac{\mu_i}{h_k} \left\{ \psi_i(x_{k+1/2}) - (-1)^\lambda \psi_i(x_{k-1/2}) - 2 \sum_{l=0}^{[(\lambda-1)/2]} (2\lambda - 4l - 1) \psi_{i(\lambda-2l-1,k)} \right\} + \sigma_k \psi_{i(\lambda,k)} = Q_{i(\lambda,k)}, \quad (2.20)$$

donde

$$Q_{i(\lambda,k)} = \left(\sigma_k \underline{S} \tilde{\underline{\psi}} + \tilde{\underline{q}} \right)_{i(\lambda,k)}. \quad (2.21)$$

Las restantes N ecuaciones se obtienen evaluando la Ec. (2.12) en la frontera saliente de la celda. Específicamente, si $\mu_i > 0$, de las Ecs. (2.8) y (2.12) se obtiene luego de algunas manipulaciones algebraicas que

$$\psi_{ik}(x) = \psi_i(x_{k-1/2}) e^{-\sigma_k(x-x_{k-1/2})/\mu_i} + \frac{\sigma_k}{\mu_i} \int_{x_{k-1/2}}^x e^{-\sigma_k(x-x')/\mu_i} (\mathbf{M}[\mathbf{S}\underline{\psi} + \underline{q}/\sigma_k])_i(x') dx', \quad i = 1, \dots, N, \quad (2.22)$$

la cual es evaluada en $x = x_{k+1/2}$.

El método numérico puede ser implementado entonces resolviendo en cada celda y para cada dirección el sistema de ecuaciones dado por las ecuaciones de balance (2.20) y las de los momentos salientes (2.22) evaluadas en $x = x_{k+1/2}$. Este procedimiento conduce a expresiones complicadas para su implementación, por lo que en 1988 fue propuesto un esquema en diferencias pesadas, (Azmy, 1988a), en el que las ecuaciones anteriores pueden resolverse siguiendo un procedimiento similar al utilizado en Diferencias Finitas. Este procedimiento se describe en la siguiente Sección.

2.3 Esquema en Diferencias Pesadas

Las incógnitas del problema, es decir, los momentos del flujo angular y de los flujos salientes, son calculados de forma iterativa, una componente por vez, como es usual en el proceso de barrido estándar utilizado en la aproximación S_N .

En el esquema en diferencias pesadas, *Weighted Diamond-Difference Form* (WDD), para resolver las Ecs. (2.20) y (2.22) se saca provecho de la base utilizada para simplificar los cálculos (Azmy, 1988a). En este esquema las ecuaciones finales quedan en función de un solo parámetro por dirección y por celda, lo que ha transformado a los métodos nodales en esquemas atractivos para su implementación en programas comerciales (Rhoades, 1996). Dada su importancia y teniendo en cuenta que en este trabajo se han realizado algunas mejoras al mismo, en esta Sección se describe en forma detallada su deducción.

Consideremos la Ec. (2.22) evaluada en $x = x_{k+1/2}$ con el término de fuente dado por (2.21) expandido en polinomios de Legendre,

$$\psi_i(x_{k+1/2}) = \psi_i(x_{k-1/2})e^{-\sigma_k h_k/\mu_i} + \frac{1}{\mu_i} \sum_{\lambda=0}^{\Lambda} (2\lambda+1)Q_{i(\lambda,k)} \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} e^{-\sigma_k(x_{k+1/2}-x')/\mu_i} p_{\lambda,k}(x') dx', \quad (2.23)$$

y sea $\xi_{i(\lambda,k)} \equiv (2\lambda+1)\hat{\xi}_{i(\lambda,k)}$, donde $\hat{\xi}_{i(\lambda,k)}$ es el coeficiente de orden λ del desarrollo de $e^{\sigma_k x/\mu_i}$ en polinomios de Legendre. Sustituyendo $\xi_{i(\lambda,k)}$ y la expresión de $Q_{i(\lambda,k)}$ dada por la Ec. (2.21) en la ecuación anterior, ésta puede escribirse de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \psi(x_{k+1/2}) \left[e^{\sigma_k h_k/2\mu_i} - \sum_{\lambda=0}^{\Lambda} \xi_{i(\lambda,k)} \right] - \psi(x_{k-1/2}) \left[e^{-\sigma_k h_k/2\mu_i} - \sum_{\lambda=0}^{\Lambda} (-1)^\lambda \xi_{i(\lambda,k)} \right] = \\ -2 \sum_{l=0}^{[(\lambda-1)/2]} (2\lambda-4l-1)\psi_{i(\lambda-2l-1,k)} + \frac{\sigma_k h_k}{\mu_i} \sum_{\lambda=0}^{\Lambda} \xi_{i(\lambda,k)} \psi_{i(\lambda,k)}. \end{aligned} \quad (2.24)$$

Es posible simplificar la ecuación anterior hasta obtener una relación entre los momentos del flujo angular y los flujos entrantes y salientes a una celda que dependa de coeficientes sencillos de calcular. Para ello definamos D y $D\alpha$ de la siguiente manera:

$$D_{ik} \equiv \frac{2\mu_i}{\sigma_k h_k} \left[\sinh(\sigma_k h_k/2\mu_i) - \sum_{\lambda=1, \text{imp}}^{\lambda} \xi_{i(\lambda,k)} \right] \quad (2.25)$$

$$D_{ik}\alpha_{ik} \equiv \frac{2\mu_i}{\sigma_k h_k} \left[\cosh(\sigma_k h_k/2\mu_i) - \sum_{\lambda=0, \text{par}}^{\lambda} \xi_{i(\lambda,k)} \right]. \quad (2.26)$$

Dividiendo la Ec. (2.24) entre $\sigma_k D_{ik}$ y reagrupando términos se obtiene

$$\left(\frac{1+\alpha_{ik}}{2} \right) \psi_i(x_{k+1/2}) + \left(\frac{1-\alpha_{ik}}{2} \right) \psi_i(x_{k-1/2}) = \sum_{\lambda=0, \text{par}}^{\Lambda} (2\lambda+1)\psi_{i(\lambda,k)} + \sum_{\lambda=1, \text{imp}}^{\Lambda} (2\lambda+1)\alpha_{ik}\psi_{i(\lambda,k)}, \quad (2.27)$$

que es una relación en diferencias pesadas entre los flujos entrantes, salientes y los momentos de $\underline{\psi}$.

De esta forma, el método numérico puede ser implementado haciendo uso de las Ecs. (2.20) y (2.27). Es importante notar que dichas ecuaciones dependen solamente de un coeficiente de peso espacial, α_{ik} , por celda y por dirección.

Existen varias posibilidades para implementar estas ecuaciones. En este trabajo se utiliza un procedimiento que conduce a un proceso de resolución similar al clásico empleado en Diferencias Finitas. Sustituyendo en la Ec. (2.20) los flujos salientes obtenidos de (2.27) se obtiene un sistema de ecuaciones para los momentos del flujo angular en función de los flujos entrantes y los momentos

de la fuente, ambos conocidos, como condiciones de contorno en cada celda los primeros, y de la iteración anterior los segundos. Estas ecuaciones, que pueden ser resueltas de forma recursiva, proveen los momentos del flujo angular necesarios para obtener los flujos salientes a través de la Ec. (2.27). Estos flujos son los entrantes de la celda siguiente, generándose de esta forma un esquema de barrido para cada dirección discreta.

2.4 Algunos ejemplos numéricos

En esta Sección se presentan dos ejemplos numéricos para ilustrar el comportamiento de las reconstrucciones del flujo angular, según se discutió en las secciones precedentes.

El método AHOT-N unidimensional ha sido implementado en un código monoenergético con fuente externa fija y scattering isotrópico. Los problemas han sido resueltos en una Silicon Graphics con una precisión aritmética de 64 bits y requiriendo una precisión local de 10^{-16} para la convergencia de las iteraciones interiores sobre todos los momentos del flujo escalar calculados.

El primer problema resuelto, que denotaremos S2HOM, consiste en un slab homogéneo de 20 cm de ancho, $\sigma = 2\text{ cm}^{-1}$, $c = 0.5$, con una fuente unitaria uniformemente distribuida en la mitad izquierda del sistema y condiciones de contorno de vacío. Este problema fue resuelto utilizando una cuadratura S_2 con $\mu_1 = 1/\sqrt{3}$, $\mu_2 = -\mu_1$ y $w_1 = w_2 = 0.5$.

El segundo problema ejemplo, llamado S4HET, está compuesto por dos slabs adyacentes de 5 cm de ancho cada uno con condiciones de contorno de vacío en los extremos. La mitad izquierda del sistema contiene una fuente unitaria uniformemente distribuida, $\sigma = 1\text{ cm}^{-1}$, $c = 0.5$ y la mitad derecha no tiene fuentes, $\sigma = 2\text{ cm}^{-1}$, $c = 0.05$. Fue resuelto usando una cuadratura Gaussiana S_4 con $\mu_1 = 0.861136311594053$, $\mu_2 = -\mu_1$, $\mu_3 = 0.339981043584856$, $\mu_4 = -\mu_3$, $w_1 = w_2 = 0.1739274226$ y $w_3 = w_4 = 0.3260725774$.

En la Fig. 2.1 se muestran los flujos angulares exactos, Ψ^e y los reconstruidos ψ y $\tilde{\psi}$ para las direcciones correspondientes a μ_1 y μ_2 del problema S2HOM resuelto con cuatro celdas y $\Lambda = 2$. En la Fig. 2.2 pueden verse los flujos angulares correspondientes a la primera dirección del problema S4HET y las diferencias entre ambos flujos reconstruidos y el flujo exacto para una discretización de cuatro celdas resuelto con $\Lambda = 2$.

En estas figuras se pueden apreciar claramente las discontinuidades de $\tilde{\psi}$ en las interfaces. Por otra parte, la reconstrucción ψ , además de ser continua en todo el dominio, está *más cerca* de la solución exacta ψ^e en todos los casos analizados, propiedad que siempre se verifica como se muestra en el siguiente Capítulo.

La evaluación de $\psi(x)$ requiere del cálculo de la integral de la Ec. (2.22), donde se ha perdido la ortogonalidad de los polinomios debido al límite superior de la misma. Si bien no resulta complicado evaluar dicha integral en forma numérica, estos procedimientos pueden introducir errores y requieren en general un análisis de precisión que agrega complejidad al problema. Debido a ésto, los resultados presentados en esta Sección para $\psi(x)$ han sido obtenidos utilizando una fórmula recursiva que se deduce en el Capítulo 4, la cual permite realizar dicha integral en forma exacta.

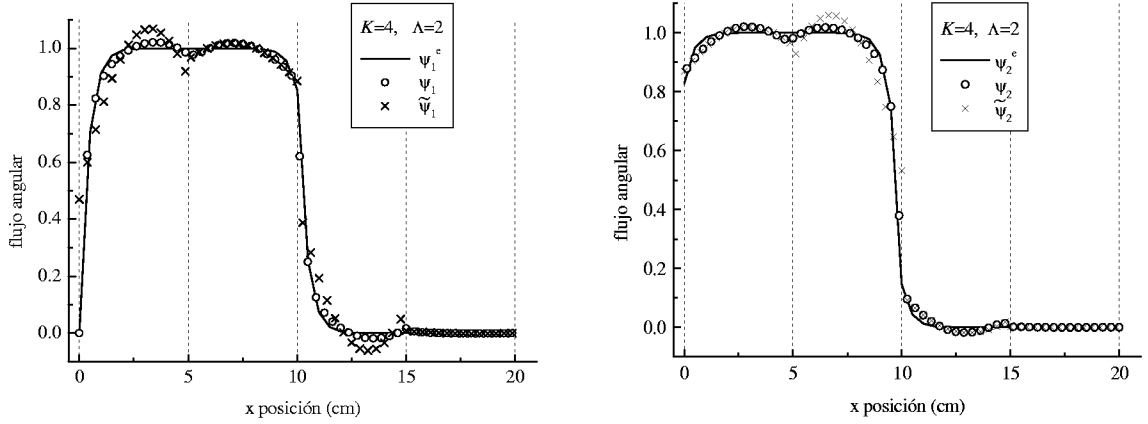


Figura 2.1: Flujos angulares para la dirección positiva, ψ_1 (izq.), y negativa, ψ_2 (der.), correspondientes al problema S2HOM para el caso $K = 4$, $\Lambda = 2$.

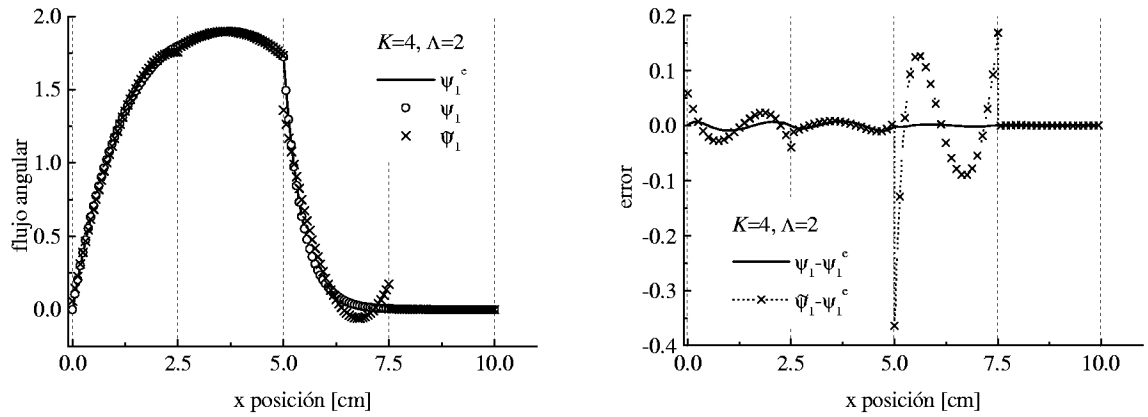


Figura 2.2: Flujos angulares para la primera dirección, ψ_1 (izq.), y diferencias entre los flujos reconstruidos y el flujo exacto (der.), correspondientes al problema S4HET para el caso $K = 4$, $\Lambda = 2$.

2.5 Conclusiones

En este Capítulo se ha introducido el método AHOT-N en su forma unidimensional. Se ha mostrado que el mismo consiste en resolver la ecuación de transporte en forma exacta para cada dirección angular discreta, con los términos de fuente (externa más scattering) expandidos en cada celda homogénea en polinomios de hasta orden Λ .

Las ecuaciones finales del método han sido llevadas a un esquema en diferencias pesadas que consiste en expresar los flujos angulares salientes de cada celda en función de los entrantes y los momentos de la fuente a través de un solo parámetro por celda y por dirección angular. Este esquema, además de simplificar las expresiones finales del método, hace que la implementación del mismo requiera en general menos memoria que otros esquemas nodales de transporte.

En este trabajo, el método AHOT-N unidimensional ha sido implementado utilizando un esquema

equivalente a Diferencias Finitas, lo que permite resolver las ecuaciones siguiendo los esquemas de barrido clásicos de fuente, y por lo tanto posibilita su implementación en forma relativamente sencilla en programas de cálculo ya existentes. Es decir, basta con programar las ecuaciones del método AHOT-N dentro del esquema de barrido ya implementado en algún código de Diferencias Finitas.

A través de dos problemas ejemplo se ilustra el comportamiento de dos posibles reconstrucciones puntuales del flujo angular utilizando las soluciones generadas por el método numérico. Una de ellas, ψ , es continua en todo el dominio y más precisa que la otra, $\tilde{\psi}$, la cual ha sido generalmente más utilizada hasta el presente debido posiblemente a que su evaluación es muy sencilla (Azmy, 1997).

En los siguientes Capítulos se analizará en detalle la precisión de las soluciones del método AHOT-N unidimensional, incluyendo algunas mejoras al mismo que permiten aumentar la precisión de sus soluciones. Finalmente se mostrará de qué manera los estudios unidimensionales facilitan el análisis del método AHOT-N multidimensional.

Capítulo 3

Análisis de errores *a priori* del método AHOT-N

Debido a que la ecuación de transporte unidimensional bajo la aproximación S_N tiene solución exacta parecen carecer de sentido los métodos numéricos para resolverla en forma aproximada. Sin embargo, existen esquemas numéricos multidimensionales donde las ecuaciones son transformadas en unidimensionales y por lo tanto pueden aplicarse conceptos de 1D para su resolución. Este es el caso de los métodos de integración transversal, en los que las ecuaciones 1D son las mismas que las originales en una dimensión excepto por el término de fuente que queda modificado por expresiones que pueden identificarse como *fugas transversales*.

No puede aplicarse el mismo concepto al análisis de errores de los esquemas unidimensionales, ya que aunque el método numérico sea extendible a más de una dimensión, el análisis de errores multidimensional suele ser un problema completamente distinto y más complejo. Como ejemplo de estas diferencias puede decirse que en casos multidimensionales las soluciones "exactas" no son en general continuas o no tienen derivadas continuas respecto a las variables espaciales como ocurre en una dimensión. A pesar de esto, el análisis de errores unidimensional permite aclarar ciertos conceptos que luego facilitan el análisis de esquemas multidimensionales.

En un principio, los análisis de errores de las aproximaciones espaciales utilizadas para resolver la ecuación de transporte unidimensional fueron aplicados al problema monodireccional donde la fuente es una función conocida (fuente externa y scattering nulo). Las Referencias (Alcouffe, 1979), (Larsen, 1980), (Gopinath, 1980), (Lee, 1980) y (Hennard, 1981) son ejemplos de este tipo de estudios. El primer análisis de convergencia y estabilidad (errores de *discretización*) para aproximaciones espaciales de problemas monoenergéticos con acoplamiento de direcciones a través de la fuente de scattering fue realizado por Larsen y Nelson, (Larsen, 1982). En dicho trabajo los autores analizan los esquemas step characteristic, diamante, linear characteristic, lineal discontinuo, cuadrático y el método de momentos lineales introducido por Vaidyanathan (Vaidyanathan, 1979). Victory y Ganguly, (Victory, 1986), realizaron un análisis de errores *a priori* muy completo de diversos métodos unidimensionales, entre ellos el método de momentos de Vaidyanathan, el que desde el punto de vista de este tipo de análisis incluye al método AHOT-N. Otros resultados teóricos complementarios del trabajo anterior pueden verse en los trabajos de Nelson (Nelson, 1987) y Keller (Keller, 1988). En ellos se demuestra que los flujos angulares $\underline{\psi}$ obtenidos como solución del método AHOT-N son $O(h^{\Lambda+2})$ cuando $h \rightarrow 0$, h es el máximo espesor de malla de la discretización espacial y Λ es el orden de aproximación del método. También se muestran resultados de superconvergencia en las interfases de las celdas y en los valores medios del flujo angular,

los que son $O(h^{2\Lambda+2})$.

En este Capítulo se reproducen los resultados del análisis *a priori* del método AHOT-N y se muestran ejemplos numéricos que permiten fundamentalmente tener una idea de cuándo h es suficientemente chico y Λ suficientemente grande como para que tengan validez práctica los resultados asintóticos obtenidos.

3.1 Análisis *a priori* del método AHOT-N

En esta Sección se muestran los principales resultados del análisis *a priori* del método AHOT-N, el cual, como ya se ha mencionado, fue reportado por primera vez por Victory y Ganguly (Victory, 1986).

Teniendo en cuenta las Ecs. (2.9) y (2.12), puede escribirse

$$\underline{\psi} - \underline{\psi}^e = \mathbf{LSM} \left(\underline{\psi} - \underline{\psi}^e \right) + \mathbf{L} (\mathbf{M} - \mathbf{I}) \left(\mathbf{S} \underline{\psi}^e + \underline{q} \right), \quad (3.1)$$

la cual es la ecuación para el error, $\underline{\psi} - \underline{\psi}^e$. Escribiendo la Ec. (3.1) de la siguiente manera:

$$\left(\underline{\psi} - \underline{\psi}^e \right) = (\mathbf{I} - \mathbf{LSM})^{-1} \mathbf{L} (\mathbf{M} - \mathbf{I}) \left(\mathbf{S} \underline{\psi}^e + \underline{q} \right), \quad (3.2)$$

surge que si se encuentra una desigualdad de *estabilidad*

$$\| (\mathbf{I} - \mathbf{LSM})^{-1} \| \leq A_e, \quad h \rightarrow 0, \quad (3.3)$$

con A_e independiente de h , y una estimación de *consistencia*

$$\| \mathbf{L} (\mathbf{M} - \mathbf{I}) \left(\mathbf{S} \underline{\psi}^e + \underline{q} \right) \| \leq A_c h^n, \quad h \rightarrow 0, \quad (3.4)$$

con A_c también independiente de h , se tendrá la estimación para $\| \psi - \psi^e \|$.

Los espacios utilizados en este análisis son $C^N[0, L]$ y $C_p^N[0, L]$, definidos en el Capítulo anterior, provistos con la norma

$$\| (f_1, f_2, \dots, f_N) \| \equiv \max_{1 \leq i \leq N} \max_{x \in [0, L]} |f_i(x)|. \quad (3.5)$$

Obtenida la acotación de *estabilidad*, (Victory, 1986), el siguiente Teorema indica el orden de *consistencia* así como el orden de los momentos del flujo angular y el del flujo angular saliente.

Teorema 3.1.1 *Sea el término de fuente $\mathbf{S} \underline{\psi}^e + \underline{q}$ expandido en cada C_k en los primeros $\Lambda + 1$ polinomios de Legendre, $\{p_{0,k}(x), \dots, p_{\Lambda,k}(x)\}$, entonces, cuando $h \rightarrow 0$,*

- a) $\| \underline{\psi} - \underline{\psi}^e \| = O(h^{\Lambda+2})$
- b) $\| \mathbf{M}_\lambda \left(\underline{\psi} - \underline{\psi}^e \right) \| = O(h^{2\Lambda+2-\lambda})$
- c) $\max \left\{ \left| \psi_i(x_{k+1/2}) - \psi_i^e(x_{k+1/2}) \right|, k = 1, \dots, k, i = 1, \dots, N \right\} = O(h^{2\Lambda+2})$

Es importante notar la *superconvergencia* en los flujos medios y salientes de cada celda, los cuales convergen con un orden de h más rápido que los flujos globales. Este resultado es extremadamente importante desde el punto de vista de la utilización de las soluciones de la ecuación de transporte en neutrónica, ya que en general los valores medios de ψ conducen a las cantidades integrales comúnmente usadas como factor de multiplicación, ritmos de reacción o densidades de potencia, y los flujos salientes contribuyen al cálculo de fugas en problemas por ejemplo de blindaje.

Es interesante notar que en el método AHOT-N no se hace ninguna aproximación sobre los operadores \mathbf{L} y \mathbf{M} lo que conduce a que el término de fugas más el de colisiones sean tratados en forma exacta. La única aproximación está dada por el truncamiento de los términos de fuente. Esto conduce a que los ritmos de convergencia obtenidos para el método AHOT-N sean muy atractivos si se los compara con los correspondientes a otros métodos numéricos empleados para el tratamiento espacial de las ecuaciones SN. Considerando por ejemplo el esquema en Diferencias Finitas, las aproximaciones *constante*, *diamante* y *lineal discontinua* son $O(h^2)$, los esquemas *lineales* $O(h^3)$ y el método cuadrático $O(h^4)$ en la convergencia global de la solución numérica a la exacta, presentando los métodos lineales superconvergencia en los flujos medios de un orden de h (Larsen, 1982).

En la siguiente Sección se presentan ejemplos numéricos donde se reproducen los resultados predichos en la teoría.

3.1.1 Ejemplos numéricos

Aunque el análisis *a priori* no permite cuantificar los errores obtenidos luego de realizado un cálculo numérico, es de utilidad a la hora de elegir una aproximación para resolver una dada ecuación.

Estando un análisis *a priori* rigurosamente deducido, no tiene sentido *validar* en forma numérica los resultados teóricos. Sin embargo es muy importante tener una idea de cuándo es válida la hipótesis de que $h \rightarrow 0$, la cual es básica a efectos de la interpretación de las conclusiones del análisis de errores *a priori*.

En esta Sección se presentan los resultados obtenidos con el método AHOT-N en un slab inmerso en vacío, de 20 cm de espesor, con sección eficaz total $\sigma_t = 2 \text{ cm}^{-1}$, $c = 0.5$ y fuente externa uniformemente distribuida de intensidad $Q = 1 \text{ n/cm}^3 - \text{seg}$ en cada dirección. Este problema, al que llamamos *S2BIG* fue resuelto utilizando una cuadratura S_2 con $\mu_1 = 1/\sqrt{3}$, $\mu_2 = -\mu_1$, $w_1 = w_2 = 0.5$, requiriendo una precisión relativa de 10^{-16} para todos los momentos del flujo escalar calculados. El código fue ejecutado en una Silicon Graphics con 64 bits aritméticos. La elevada precisión utilizada en los cálculos así como el valor de 10^{-16} requerido para la convergencia del proceso iterativo fue necesaria debido a la alta precisión de las soluciones generadas por el método AHOT-N. Relajando dichos requerimientos los errores de redondeo predominan sobre los de discretización y no es posible observar el comportamiento asintótico de las soluciones. Este efecto no sólo ha sido verificado en este trabajo sino que ha sido observado en (Victory, 1986) donde no fue posible obtener numéricamente los ritmos de convergencia predichos en algunos esquemas.

Se consideró una secuencia de 12 discretizaciones con anchos de celda iguales en cada una, $h = 20 \times 2^{-n}$, $n = 1, \dots, 12$, y órdenes de aproximación, Λ , entre 0 y 4. En la Tabla 3.1 se presentan los errores de los flujos angulares salientes, los que están dados por la norma L^∞ , Ec. (3.5). Puede verse que los ritmos de convergencia, calculados como el cociente de los errores entre dos

discretizaciones sucesivas, tienden a los valores predichos en la teoría, $CR = 2^{2\Lambda+2}$.

Los errores de los momentos de orden cero y uno del flujo angular se muestran en las tablas 3.2 y 3.3, donde también se aprecia la convergencia a los valores predichos teóricamente, $2^{2\Lambda+2}$ para ψ_0 y $2^{2\Lambda+1}$ para ψ_1 .

Debido a las dificultades que presenta la búsqueda del máximo de $\underline{\psi} - \underline{\psi}^\epsilon$ en el sistema, para ilustrar con este problema ejemplo la convergencia asintótica de $\underline{\psi}$ a $\underline{\psi}^\epsilon$ se utilizó la norma L^2 en lugar de la L^∞ con las que se presentaron los resultados teóricos. Ambas normas son equivalentes, por lo que es esperable que los resultados numéricos coincidan con los teóricos. Dada la solución numérica $\underline{\psi}(x)$ y la exacta $\underline{\psi}^\epsilon(x)$, se tiene que

$$\|\underline{\psi} - \underline{\psi}^\epsilon\|_{L^2} = \sqrt{\int_0^L |\underline{\psi} - \underline{\psi}^\epsilon|^2 dx}, \quad (3.6)$$

donde $|\underline{v}|^2 = \underline{v} \cdot \underline{v} = \sum_{i=1}^N v_i^2$. En la Tabla 3.4 se presentan los resultados de $\|\underline{\psi} - \underline{\psi}^\epsilon\|$ en función de la discretización del sistema para varios valores de Λ . La integral de la Ec. (3.6) ha sido evaluada utilizando la Regla de Simpson con 1000 puntos de integración. Puede verse que los resultados están en concordancia con la teoría, en este caso $CR = 2^{2\Lambda+2}$. Las discrepancias que se observan para mallas muy densas y órdenes de aproximación mayores que 3 pueden atribuirse a errores numéricos en la integración por Simpson.

Tabla 3.1: Error *global* y ritmo de convergencia de los flujos salientes para el problema *S2BIG*.

2^n	$\Lambda = 0$		$\Lambda = 1$		$\Lambda = 2$		$\Lambda = 3$		$\Lambda = 4$	
	E_n^{gl}	CR^{gl}	E_n^{gl}	CR^{gl}	E_n^{gl}	CR^{gl}	E_n^{gl}	CR^{gl}	E_n^{gl}	CR^{gl}
2	1.57E-01		1.22E-01		7.98E-02		4.47E-02		2.14E-02	
4	1.44E-01	1.1	8.63E-02	1.4	3.75E-02	2.1	1.21E-02	3.7	2.95E-03	7.3
8	1.20E-01	1.2	4.26E-02	2.0	8.62E-03	4.4	1.09E-03	11.1	9.22E-05	32.1
16	7.90E-02	1.5	1.10E-02	3.9	7.04E-04	12.2	2.54E-05	42.8	5.88E-07	156.7
32	3.49E-02	2.3	1.36E-03	8.1	2.26E-05	31.1	2.09E-07	121.4	1.23E-09	477.1
64	1.09E-02	3.2	1.06E-04	12.7	4.45E-07	50.8	1.03E-09	202.4	1.53E-12	806.6
128	2.90E-03	3.8	7.08E-06	15.0	7.41E-09	60.1	4.30E-12	240.3	1.59E-15	960.4
256	7.36E-04	3.9	4.50E-07	15.7	1.18E-10	63.0	1.71E-14	251.9	1.58E-18	1007.4
512	1.85E-04	4.0	2.82E-08	15.9	1.84E-12	63.7	6.70E-17	255.0	1.55E-21	1019.8
1024	4.63E-05	4.0	1.76E-09	16.0	2.89E-14	63.9	2.62E-19	255.7	1.51E-24	1022.9
2048	1.16E-05	4.0	1.10E-10	16.0	4.51E-16	64.0	1.02E-21	255.9	1.48E-27	1024.9
4096	2.89E-06	4.0	6.90E-12	16.0	7.05E-18	64.0	4.00E-24	256.0	2.20E-30	671.7

Es interesante notar que con el análisis *a priori* se obtienen comportamientos asintóticos de convergencia *global*, es decir máximos en el sistema o cantidades integrales. Si se tiene en cuenta que por ejemplo, el error en los flujos salientes de las mallas tiene una contribución debida al truncamiento de la fuente a orden Λ más otra causada por el error en el flujo entrante, la evaluación *global* de errores considera ambas contribuciones y por lo tanto no predice errores en cada punto particular del sistema. Por otra parte, si se define el error *local* como el error debido solamente a contribuciones locales, es decir, en el caso de los flujos salientes, debido solamente al truncamiento de la fuente, estos errores deberían tener un orden más en h que los *globales*. En el ejemplo tratado, esta afirmación se verificó numéricamente evaluando el error en los flujos salientes de la celda de la izquierda (derecha) del sistema para $\mu > 0$ ($\mu < 0$ resp.), ya que en estos casos el flujo entrante es reproducido en forma exacta por el método numérico.

Tabla 3.2: Error *global* y ritmo de convergencia de los momentos de orden cero para el problema *S2BIG*.

2^n	$\Lambda = 0$		$\Lambda = 1$		$\Lambda = 2$		$\Lambda = 3$		$\Lambda = 4$	
	E_n^{gl}	CR^{gl}	E_n^{gl}	CR^{gl}	E_n^{gl}	CR^{gl}	E_n^{gl}	CR^{gl}	E_n^{gl}	CR^{gl}
2	7.22E-03	0.0	4.62E-03	0.0	4.11E-03	0.0	1.44E-03	0.0	1.22E-03	0.0
4	1.18E-02	0.6	8.14E-03	0.6	2.93E-03	1.4	1.16E-03	1.2	2.27E-04	5.4
8	1.83E-02	0.6	8.34E-03	1.0	1.29E-03	2.3	2.16E-04	5.4	1.37E-05	16.6
16	2.12E-02	0.9	4.45E-03	1.9	2.03E-04	6.4	1.09E-05	19.8	1.76E-07	77.5
32	1.47E-02	1.4	1.09E-03	4.1	1.02E-05	20.0	1.71E-07	64.1	5.61E-10	314.1
64	8.52E-03	1.7	1.38E-04	7.9	3.58E-07	28.4	1.34E-09	127.0	1.23E-12	455.9
128	3.29E-03	2.6	1.22E-05	11.2	8.48E-09	42.2	7.46E-12	180.1	1.82E-15	675.5
256	1.02E-03	3.2	9.14E-07	13.4	1.63E-10	51.9	3.47E-14	214.6	2.20E-18	830.0
512	2.84E-04	3.6	6.24E-08	14.6	2.84E-12	57.6	1.48E-16	234.3	2.38E-21	921.6
1024	7.49E-05	3.8	4.08E-09	15.3	4.67E-14	60.7	6.05E-19	244.9	2.45E-24	971.4
2048	1.92E-05	3.9	2.61E-10	15.6	7.50E-16	62.3	2.42E-21	250.4	2.46E-27	997.2
4096	4.87E-06	3.9	1.65E-11	15.8	1.19E-17	63.2	9.55E-24	253.2	2.09E-30	1176.4

Tabla 3.3: Error *global* y ritmo de convergencia de los momentos de orden uno para el problema *S2BIG*.

2^n	$\Lambda = 1$		$\Lambda = 2$		$\Lambda = 3$		$\Lambda = 4$	
	E_n^{gl}	CR^{gl}	E_n^{gl}	CR^{gl}	E_n^{gl}	CR^{gl}	E_n^{gl}	CR^{gl}
2	6.25E-03	0.0	3.15E-03	0.0	2.52E-03	0.0	7.42E-04	0.0
4	7.93E-03	0.8	4.10E-03	0.8	1.08E-03	2.3	3.29E-04	2.3
8	8.48E-03	0.9	2.21E-03	1.9	2.11E-04	5.1	2.40E-05	13.7
16	5.29E-03	1.6	4.61E-04	4.8	1.21E-05	17.5	3.87E-07	62.0
32	1.72E-03	3.1	3.99E-05	11.6	2.64E-07	45.8	2.17E-09	178.1
64	3.41E-04	5.0	2.01E-06	19.9	3.31E-09	79.6	6.89E-12	315.5
128	5.29E-05	6.5	7.81E-08	25.7	3.21E-11	103.1	1.68E-14	410.8
256	7.31E-06	7.2	2.70E-09	28.9	2.78E-13	115.6	3.63E-17	461.8
512	9.60E-07	7.6	8.88E-11	30.4	2.28E-15	121.8	7.46E-20	487.1
1024	1.23E-07	7.8	2.84E-12	31.2	1.83E-17	124.9	1.49E-22	499.6
2048	1.56E-08	7.9	8.99E-14	31.6	1.44E-19	126.5	2.95E-25	505.8
4096	1.96E-09	8.0	2.83E-15	31.8	1.14E-21	127.2	5.50E-28	536.2

En sistemas unidimensionales las hipótesis del Teorema 3.1.1 siempre se pueden verificar ya que cualquier discontinuidad de σ o q se puede hacer coincidir con un límite de celda. Sin embargo resulta interesante observar el comportamiento asintótico de las soluciones cuando por ejemplo \bar{q} es discontinuo en el interior de una celda, ya que las conclusiones que se obtengan de este ejemplo pueden ayudar al análisis de errores multidimensional donde tanto la fuente como el flujo angular pueden ser discontinuos (o de derivadas discontinuas) en los puntos de las características. Para analizar este caso se resolvió el problema *S2HOM* definido en la Sección 2.4 utilizando una discretización tal que la malla central contiene en su centro a la discontinuidad de la fuente. En el problema así resuelto, al que llamamos *DISC*, la fuente externa es representada en cada C_k a través de sus proyecciones sobre los polinomios de Legendre, es decir, para un orden de

Tabla 3.4: Error *global* y ritmo de convergencia del flujo en norma L^2 correspondientes al problema *S2BIG*.

2^n	$\Lambda = 0$		$\Lambda = 1$		$\Lambda = 2$		$\Lambda = 3$		$\Lambda = 4$	
	E_n^{gl}	CR^{gl}	E_n^{gl}	CR^{gl}	E_n^{gl}	CR^{gl}	E_n^{gl}	CR^{gl}	E_n^{gl}	CR^{gl}
2	1.25E-01		1.15E-01		9.63E-02		7.32E-02		5.04E-02	
4	1.19E-01	1.0	9.51E-02	1.2	6.26E-02	1.5	3.40E-02	2.2	1.57E-02	3.2
8	1.04E-01	1.1	5.97E-02	1.6	2.39E-02	2.6	7.28E-03	4.7	1.82E-03	8.6
16	6.99E-02	1.5	2.17E-02	2.8	4.23E-03	5.6	6.37E-04	11.4	7.98E-05	22.8
32	3.02E-02	2.3	4.41E-03	4.9	4.04E-04	10.5	3.00E-05	21.2	1.87E-06	42.6
64	9.25E-03	3.3	6.45E-04	6.8	2.88E-05	14.0	1.06E-06	28.2	3.32E-08	56.5
128	2.45E-03	3.8	8.41E-05	7.7	1.86E-06	15.5	3.44E-08	30.9	5.36E-10	61.9
256	6.22E-04	3.9	1.06E-05	7.9	1.17E-07	15.9	1.08E-09	31.7	8.94E-12	60.0
512	1.56E-04	4.0	1.33E-06	8.0	7.36E-09	16.0	3.40E-11	31.8	2.93E-12	3.0
1024	3.91E-05	4.0	1.67E-07	8.0	4.60E-10	16.0	3.12E-12	10.9	2.93E-12	1.0
2048	9.78E-06	4.0	2.08E-08	8.0	2.89E-11	15.9	2.93E-12	1.1		
4096	2.44E-06	4.0	2.60E-09	8.0	3.44E-12	8.4	2.93E-12	1.0		

aproximación igual a Λ está dada por:

$$q(x) = \begin{cases} 1 & \text{si } x \in C_k, k = 1, \dots, [K/2] \\ \frac{2}{h_k} \sum_{\lambda=0}^{\Lambda} (2\lambda + 1) p_{\lambda,k}(x) \int_{x_{k-1/2}}^{x_k} p_{\lambda,k}(x') dx' & k = [K/2] + 1, \\ 0 & k > [K/2] + 1 \end{cases} \quad (3.7)$$

donde $[n]$ es la parte entera de n y K es el número de mallas del sistema (impar).

Los errores obtenidos en este problema para ψ en norma L^2 y para los flujos salientes en norma L^∞ , así como sus ritmos de convergencia se muestran en la Fig. 3.1. Puede verse que las propiedades de convergencia prácticamente no dependen del orden de aproximación usado, ya que aún con una discretización fina del sistema tanto el error como el ritmo de convergencia son muy parecidos entre $\Lambda = 1$ y 5. En particular se observa que el error de ψ en norma L^2 tiende a $O(h^{3/2})$ y el de los flujos salientes a $O(h^4)$.

En la Fig. 3.2 puede compararse la convergencia de ψ a su valor exacto obtenida en ambos problemas, *DISC* y *S2HOM*. Es notorio que las soluciones al mismo problema resuelto con la discretización correspondiente a *S2HOM*, donde no hay discontinuidades de la fuente en ningún C_k , muestra que se verifica lo predicho en el Teorema 3.1.1, sus propiedades de convergencia asintótica son iguales a las obtenidas en el problema *S2BIG*.

Puede concluirse que en el caso de discontinuidades de la fuente en el interior de las celdas, la precisión puede mejorarse densificando el mallado en lugar de aumentando el orden de la aproximación.

En problemas multidimensionales la discontinuidad de la fuente externa se ve suavizada por el término de scattering, sin embargo la discontinuidad del flujo angular a través de la característica definida por la dirección discreta considerada es inevitable. Posiblemente la observación anterior ayude a la interpretación de los fenómenos que aparecen en esos casos.

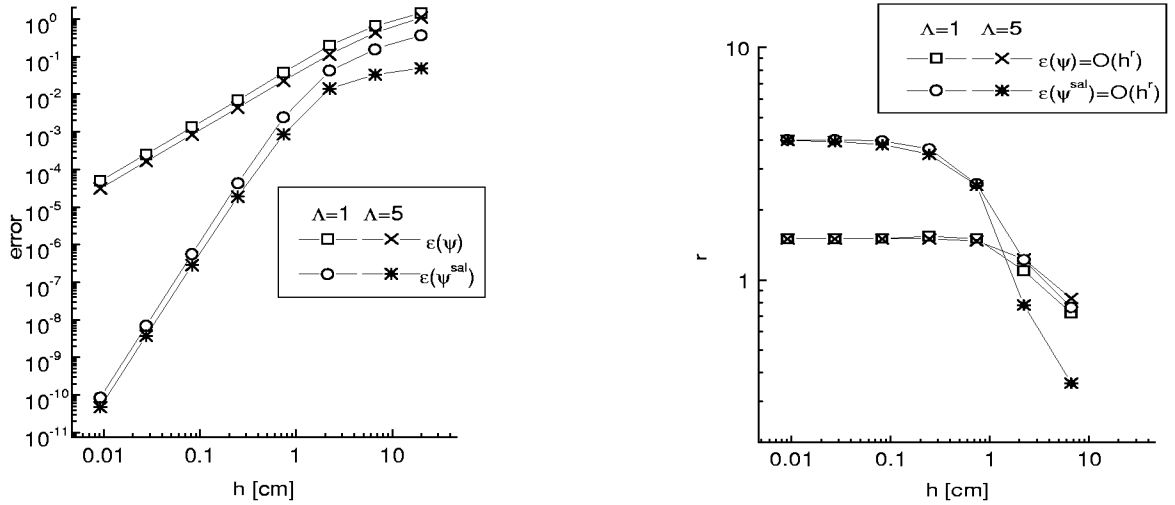


Figura 3.1: Errores *globales* y ritmos de convergencia en el problema *DISC*.

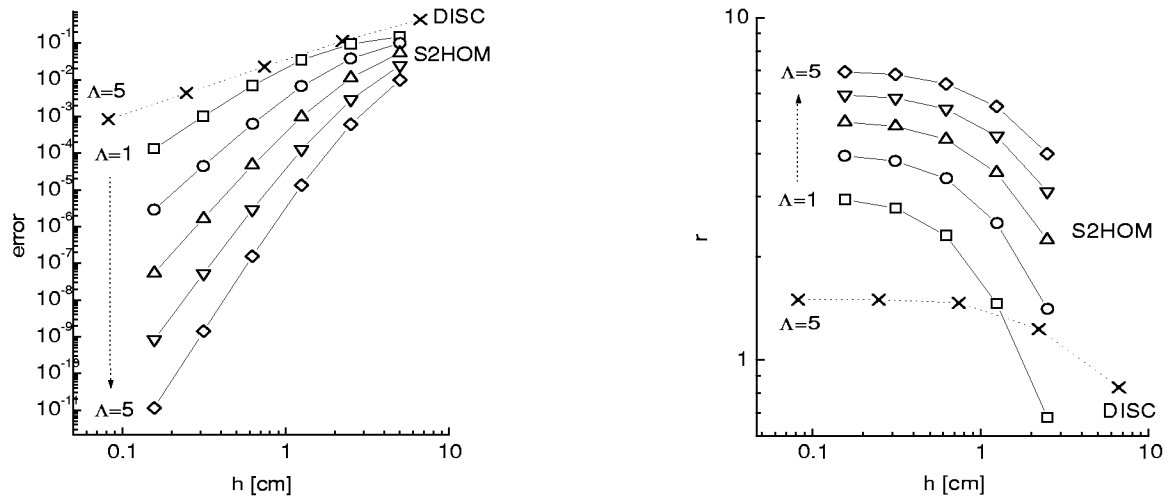


Figura 3.2: Errores *globales* y ritmos de convergencia en los problemas *DISC* y *S2HOM*.

3.2 Conclusiones

En este Capítulo se han presentado los principales resultados del análisis de errores *a priori* del método AHOT-N unidimensional, los que pueden resumirse en los siguientes órdenes de convergencia:

Siendo $\underline{\psi}$ la solución numérica generada por AHOT-N con orden Λ y $\underline{\psi}^e$ la solución exacta al problema resuelto, se tiene que, cuando $h \rightarrow 0$:

1. $\underline{\psi}$ converge a $\underline{\psi}^e$ con $O(h^{\Lambda+2})$.
2. Los momentos de orden $\lambda \in \{0, \dots, \Lambda\}$ de la expansión en polinomios de Legendre de $\underline{\psi}$ convergen a los de $\underline{\psi}^e$ con $O(h^{2\Lambda+2-\lambda})$.
3. Los flujos $\underline{\psi}$ evaluados en las interfases convergen a sus valores exactos con orden $2\Lambda + 2$.

Una propiedad atractiva de las soluciones de AHOT-N es la superconvergencia de los flujos medios y los evaluados en las interfases, los que convergen asintóticamente a sus valores exactos con Λ órdenes de h más rápido que los correspondientes ritmos de convergencia puntuales de $\underline{\psi}$ a $\underline{\psi}^e$. En cálculos neutrónicos esta propiedad es muy importante ya que en general los flujos medios y las fugas son las cantidades de mayor interés.

Por otra parte, el alto orden de convergencia puntual de la solución numérica, $O(h^{\Lambda+2})$, hace al método AHOT-N muy atractivo para generar soluciones que pueden ser utilizadas como referencia para evaluar la precisión de nuevos esquemas numéricos propuestos.

Los resultados de convergencia han sido ilustrados con dos problemas ejemplo. Es importante notar que han sido utilizados 64 bits de precisión aritmética en los cálculos y que el test de convergencia del proceso iterativo ha sido realizado sobre todos los momentos calculados del flujo escalar, con una precisión local de 10^{-16} . Estos altos requerimientos han sido necesarios para poder observar el orden de convergencia asintótico de las distintas cantidades evaluadas. En cálculos prácticos ambos requerimientos pueden relajarse dependiendo de la precisión deseada.

Como se ha mencionado en el Capítulo anterior, las ecuaciones espaciales en la aproximación SN unidimensional tienen solución analítica (exacta), por lo que los métodos numéricos propuestos para su resolución que no sean extendibles a varias dimensiones carecen de sentido, (De Barros, 1990). Como se mostrará más adelante en este trabajo, el método AHOT-N multidimensional conduce a ecuaciones diferenciales unidimensionales similares a las presentadas en este Capítulo, hecho que ha motivado el análisis de la precisión de sus soluciones. Sin embargo, las soluciones multidimensionales son, a diferencia de las unidimensionales, discontinuas a lo largo de las características o al menos de derivadas discontinuas. A efectos de aproximarse a estos casos no regulares se ha resuelto un problema ejemplo donde la fuente externa, \underline{q} , es discontinua en el centro de la celda central del sistema. En este caso se observa que la convergencia de las soluciones numéricas a las exactas no depende del orden Λ . Si bien este problema no representa en forma exacta la situación bidimensional, permite intuir que en este caso las soluciones no serán tan precisas como las unidimensionales.

Capítulo 4

Mejoras al método AHOT-N

Las soluciones que genera el método AHOT-N son los flujos salientes $\psi_i(x_{k\pm 1/2})$, el signo depende del signo de μ_i , y los momentos del flujo angular $\psi_{i(\lambda,k)}$, para $i = 1, \dots, N$, $\lambda = 0, \dots, \Lambda$ y $k = 1, \dots, K$.

En muchos cálculos neutrónicos las magnitudes más utilizadas provienen de valores medios, en particular el flujo escalar y angular medios, siendo éstos directamente provistos como solución del método AHOT-N a través de los momentos de orden cero, $\psi_{i(0,k)}$.

El método AHOT-N permite también la reconstrucción de la dependencia espacial de los flujos dentro de celdas homogéneas a partir de las cantidades que calcula. Esta reconstrucción puede hacerse a través de $\tilde{\psi}$ o de ψ como fue indicado en capítulos anteriores. La reconstrucción dada por $\tilde{\psi}$ es muy sencilla de evaluar ya que involucra solamente una sumatoria, mientras que la evaluación de ψ requiere del cálculo de una integral para cada punto x del dominio.

Teniendo en cuenta que ψ además de ser más preciso que $\tilde{\psi}$ es continuo en todo el dominio, surge la necesidad de su evaluación. *En este Capítulo se propone una fórmula iterativa sencilla para calcular ψ en forma exacta.*

El esquema en diferencias pesadas, *WDD*, introducido en la Sección 2.3 sufre de grandes errores de truncamiento cuando $\sigma_k h_k / \mu_i$ tiende a cero o cuando Λ es grande, los que alteran las soluciones en estos casos. *En la Sec 4.2 se propone una solución a este problema a través de coeficientes de peso espaciales asintóticos.* De esta forma, dichos coeficientes no sufren errores de truncamiento y las soluciones del método numérico pueden obtenerse sin limitaciones en el tamaño de celdas o el orden de la aproximación.

De esta forma, las dos mejoras propuestas en este Capítulo al método AHOT-N contribuyen a mejorar la precisión de las soluciones por él generadas.

4.1 Reconstrucción espacial de los flujos

La reconstrucción de la dependencia espacial del flujo angular correspondiente a una dirección μ_i en una celda C_K puede hacerse, en principio, de dos maneras distintas. Una de ellas, la de más fácil implementación, consiste en reconstruir $\tilde{\psi}_{ik}(x)$ utilizando la expresión (2.19) con ψ en el lugar de g . La otra forma consiste en evaluar $\psi_i(x)$ usando la expresión dada por la Ec. (2.22), procedimiento que resulta más complicado ya que requiere la evaluación de una integral para cada

valor de x .

Por otra parte, ψ no solamente es más precisa que $\tilde{\psi}$, sino que además es continua en todo el dominio. La primera afirmación será demostrada más adelante en este trabajo, aunque puede intuirse de lo visto hasta el momento teniendo en cuenta que $\tilde{\psi} = \mathbf{M}\psi$, mientras que la continuidad de ψ surge inmediatamente de la Ec. (2.22) y las discontinuidades de $\tilde{\psi}$ en las interfaces de las celdas se deben a que $\tilde{\psi} \in \tilde{V}$.

Dada entonces la necesidad de evaluar $\psi(x)$, y teniendo en cuenta que la evaluación numérica de la integral de la Ec. (2.22) es en general computacionalmente costosa, en esta Sección se propone una expresión recursiva para calcular dicha integral en forma exacta.

Definiendo

$$\tilde{Q}_i(x) \equiv \sigma(x) (\mathbf{M}[\mathbf{S}\psi + q/\sigma])_i(x), \quad (4.1)$$

la Ec. (2.22) para $\mu_i > 0$ puede ser escrita como

$$\psi_{ik}(x) = \psi_i(x_{k-1/2})e^{-\sigma_k(x-x_{k-1/2})/\mu_i} + \frac{1}{\mu_i} \int_{x_{k-1/2}}^x e^{-\sigma_k(x-x')/\mu_i} \tilde{Q}_i(x') dx', \quad x \in C_k. \quad (4.2)$$

Expandiendo \tilde{Q} en polinomios de Legendre se tiene que

$$\psi_{ik}(x) = \psi_i(x_{k-1/2})e^{-\sigma_k(x-x_{k-1/2})/\mu_i} + \frac{1}{\mu_i} \sum_{\lambda=0}^{\Lambda} (2\lambda+1) Q_{i(\lambda,k)} I_{i(\lambda,k)}(x), \quad x \in C_k, \quad (4.3)$$

donde

$$I_{i(\lambda,k)} \equiv \int_{x_{k-1/2}}^x e^{-\sigma_k(x-x')/\mu_i} p_{\lambda,k}(x') dx'. \quad (4.4)$$

Haciendo el cambio de variables $y = 2(x' - x_k)/h_k$ e integrando por partes se obtiene

$$I_{i(\lambda,k)}(x) = \frac{\mu_i}{\sigma_k} \left(p_{\lambda,k}(x) - (-1)^\lambda e^{-\sigma_k(x-x_{k-1/2})/\mu_i} - e^{-\sigma_k(x-x_k)/\mu_i} \int_{-1}^{2(x-x_k)/h_k} e^{\sigma_k h_k y/2\mu_i} \frac{dp_\lambda}{dy} dy \right). \quad (4.5)$$

Usando la siguiente expresión para las derivadas de p_λ

$$\frac{dp_\lambda}{dx} = \sum_{l=0,1^*}^{\lambda-1} (2l+1)p_l(x), \quad (4.6)$$

la Ec. (4.5) se expresa

$$I_{i(\lambda,k)}(x) = \frac{\mu_i}{\sigma_k} \left(p_{\lambda,k}(x) - (-1)^\lambda e^{-\sigma_k(x-x_{k-1/2})/\mu_i} - \frac{2}{h_k} \sum_{l=0,1^*}^{\lambda-1} (2l+1) I_{i(l,k)} \right). \quad (4.7)$$

donde $l = 0, 1^*$ indica que $l = 0$ si λ es impar, $l = 1$ si λ es par, y que el incremento del índice de la sumatoria es igual a dos.

Esta es una expresión recursiva que permite la evaluación de $I_{i(\lambda,k)}$, $\lambda = 0, \dots, \Lambda$, la cual sustituida en la Ec. (4.3) da el valor de $\psi_i(x)$ para $\mu_i > 0$. La expresión para $\mu_i < 0$ se obtiene en forma análoga.

4.2 Coeficientes de peso asintóticos

La forma WDD del método AHOT-N está basada en los coeficientes de peso espaciales, los que están definidos por las Ecs. (2.25) y (2.26). Eliminando los subíndices ik correspondientes a la dirección y malla respectivamente y remarcando la dependencia con el orden a través del subíndice Λ , estos coeficientes se expresan de la siguiente manera:

$$\alpha_{\Lambda}(t) = \frac{\cosh(t) - \sum_{\lambda=0, par}^{\Lambda} \xi_{\lambda}(t)}{\sinh(t) - \sum_{\lambda=1, imp}^{\Lambda} \xi_{\lambda}(t)} \quad (4.8)$$

donde se ha definido $t \equiv \sigma h/2\mu$, y ξ está dado por

$$\xi_{\lambda} = \frac{2\lambda + 1}{2} \int_{-1}^{+1} e^{tx} P_{\lambda}(x) dx. \quad (4.9)$$

El numerador de la Ec. (4.8) es igual al resto de orden $\Lambda + 1$ del desarrollo en polinomios de Legendre del $\cosh(t)$, mientras que el denominador es el resto del mismo orden del desarrollo del $\sinh(t)$. Teniendo en cuenta que cuando t tiende a cero o cuando Λ es *grande* ambos restos serán números chicos, puede concluirse que en estos casos el cálculo de los coeficientes de peso espaciales puede contaminarse de errores de redondeo.

Este efecto puede apreciarse en la Fig. 4.1 donde se muestran los valores de α correspondientes a $\Lambda = 5$, obtenidos con la Ec. (4.8) y los obtenidos con la expresión asintótica para $t \rightarrow 0$,

$$\alpha_{\Lambda}(t) = \begin{cases} \frac{t}{2\Lambda+3}, & \Lambda \text{ par} \\ \frac{2\Lambda+3}{t}, & \Lambda \text{ impar} \end{cases}, \quad (4.10)$$

la cual será demostrada en el Teorema 4.2.1.

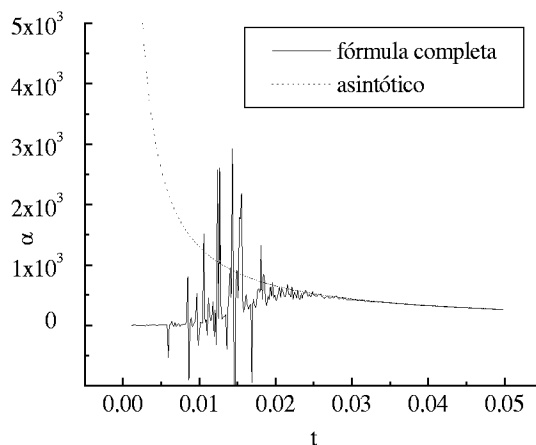


Figura 4.1: α obtenido con expresión completa vs. valor asintótico para $\Lambda = 5$.

Para ver la sensibilidad de las soluciones respecto a las variaciones de α consideremos un ejemplo ilustrativo sencillo consistente en un sistema de una sola malla de material puramente absorbente y sección eficaz total igual a 10 cm^{-1} rodeada de vacío, caracterizado por $t = 5 \times 10^{-5}$. El error

relativo del momento de orden cero y del flujo saliente obtenidos con las ecuaciones del método numérico respecto de la solución exacta correspondiente a $\Lambda = 1$ en función de α se muestra en la Fig. 4.2. Puede observarse que cuando $\alpha = -1.66668 \times 10^{-5}$ la solución numérica diverge. El valor asintótico de α en este caso es 1×10^5 , pero como puede verse en la Fig. 4.1, debido a errores de truncamiento cualquier valor de α puede obtenerse utilizando la fórmula completa.

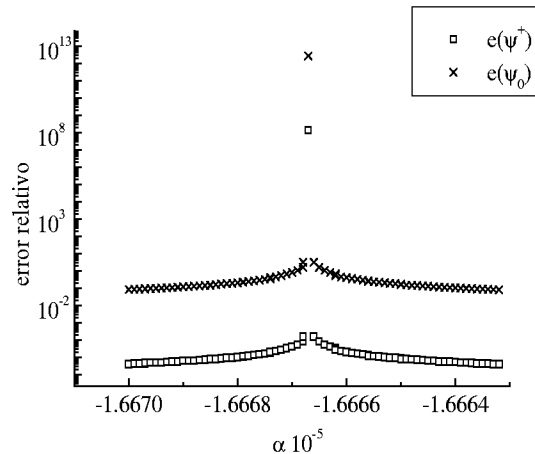


Figura 4.2: Errores relativos del momento de orden cero y del flujo angular saliente en función de α correspondientes a $\Lambda = 1$.

Para la elección del valor de t_0 a partir del cual es necesario el uso de los coeficientes de peso asintóticos dados por la Ec. (4.10) en lugar de los dados por (4.8) deben tenerse en cuenta los siguientes factores:

- t_0 depende de la computadora y la precisión aritmética utilizada para su cálculo. Por lo tanto su determinación debe hacerse en cada implementación del método.
- Las imprecisiones numéricas de $\alpha(t)$ que se obtienen con la Ec. (4.8) se hacen evidentes a través de oscilaciones de este coeficiente a medida que t se hace más chico. Entonces t_0 debe ser mayor que los valores de t donde dichas perturbaciones aparecen.
- A medida que t crece, los coeficientes asintóticos difieren cada vez más de los obtenidos usando (4.8). Es decir que t_0 debe ser menor que los valores de t donde esta diferencia comienza a ser apreciable.

De los dos últimos items surge que hay un rango de valores de t donde puede elegirse t_0 .

Siguiendo el proceso anterior en una Silicon Graphics con una precisión aritmética de 64 bits, los valores de t_0 encontrados se muestran en la Tabla 4.1. Estos valores han sido los utilizados en todos los cálculos realizados en este trabajo.

Teorema 4.2.1 *Coefficientes de peso asintóticos.*

$$\lim_{t \rightarrow 0} \alpha_\Lambda(t) = \begin{cases} \frac{t}{2\Lambda+3}, & \Lambda \text{ par} \\ \frac{2\Lambda+3}{t}, & \Lambda \text{ impar} \end{cases} \quad (4.11)$$

Tabla 4.1: Coeficientes de peso .

Λ	$\alpha_{a,s}$	Λ	$\alpha_{a,s}$
0	1.00E-04	7	2.5E-01
1	1.25E-03	8	5.00E-01
2	8.00E-03	9	6.75E-01
3	2.00E-02	10	8.00E-01
4	5.00E-02	11	1.15E+00
5	9.00E-02	12	1.40E+00
6	1.50E-01	13	1.78E+00

Dem: Consideremos el coeficiente α_Λ dado por las Ecs. (4.8) y (4.9). Integrando por partes la Ec. (4.9) se tiene que

$$\xi_\lambda(t) = \begin{cases} \frac{2\lambda+1}{t} \left[\sinh(t) - \sum_{l=1, \text{imp}}^\lambda \xi_l(t) \right] & \text{si } \lambda \text{ es par} \\ \frac{2\lambda+1}{t} \left[\cosh(t) - \sum_{l=0, \text{par}}^\lambda \xi_l(t) \right] & \text{si } \lambda \text{ es impar} \end{cases}, \quad (4.12)$$

de donde la Ec. (4.8) puede reescribirse como

$$\alpha_\Lambda(t) = \begin{cases} \left(\frac{2\Lambda+1}{2\Lambda+3} \right) \left(\frac{\xi_{\Lambda+1}}{\xi_\Lambda} \right) & \text{si } \Lambda \text{ es par} \\ \left(\frac{2\Lambda+3}{2\Lambda+1} \right) \left(\frac{\xi_\Lambda}{\xi_{\Lambda+1}} \right) & \text{si } \Lambda \text{ es impar} \end{cases}. \quad (4.13)$$

Sea el desarrollo en serie de Taylor alrededor de $t = 0$ hasta primer orden de los pesos espaciales,

$$\alpha_\Lambda(t) \simeq \alpha_\Lambda(0) + t\alpha'_\Lambda(0), \quad (4.14)$$

y calculemos $\alpha_\lambda(0)$ y $\alpha'_\lambda(0)$.

Derivando la Ec. (4.9) respecto a t y empleando la siguiente identidad para los polinomios de Legendre,

$$(2\lambda+1)xP_\lambda(x) = (\lambda+1)P_{\lambda+1}(x) + \lambda P_{\lambda-1}(x), \quad (4.15)$$

se obtiene

$$\xi'_\lambda(t) = \left(\frac{\lambda+1}{2\lambda+3} \right) \xi_{\lambda+1} + \left(\frac{\lambda}{2\lambda-1} \right) \xi_{\lambda-1}, \quad (4.16)$$

donde la derivada es respecto a t .

Consideremos primero el caso de Λ par. Sustituyendo $t = 0$ en la Ec. (4.9) y usando la ortogonalidad de los polinomios de Legendre se tiene que

$$\xi_\lambda(0) = \delta_{\lambda,0} \quad (4.17)$$

donde $\delta_{\lambda,0}$ es la delta de Kronecker. De la misma forma, derivando la ecuación (4.9) respecto a t , evaluando la nueva expresión en $t = 0$ y usando nuevamente la ortogonalidad de los polinomios de Legendre,

$$\xi'_\lambda(0) = \delta_{\lambda,1}. \quad (4.18)$$

De la Ec. (4.13) se tiene entonces que

$$\alpha_0(0) = \frac{\xi_1(0)}{3\xi_0(0)} = 0. \quad (4.19)$$

Para $\Lambda > 0$, $\alpha_\Lambda(0)$ es indeterminado y su valor puede calcularse a través del límite,

$$\alpha_\Lambda(0) = \left(\frac{2\Lambda+1}{2\Lambda+3}\right) \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\xi_{\Lambda+1}(t)}{\xi_\Lambda(t)} = \left(\frac{2\Lambda+1}{2\Lambda+3}\right) \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\left(\frac{\Lambda+2}{2\Lambda+5}\right) \xi_{\Lambda+2}(t) + \left(\frac{\Lambda+1}{2\Lambda+1}\right) \xi_\Lambda(t)}{\left(\frac{\Lambda+1}{2\Lambda+3}\right) \xi_{\Lambda+1}(t) + \left(\frac{\Lambda}{2\Lambda-1}\right) \xi_{\Lambda-1}(t)}. \quad (4.20)$$

Para $\Lambda = 1$ es claro que $\alpha_1(0) = 0$, ver Eq. (4.17); en general la aplicación sucesiva de la regla de L'Hopital para levantar la indeterminación de la ecuación anterior hará que el denominador contenga primero a $\xi_0(t)$, por lo que, en general,

$$\alpha_\Lambda(0) = 0, \quad \Lambda \text{ par.} \quad (4.21)$$

Para obtener $\alpha'_\Lambda(0)$ comencemos derivando la Ec. (4.13),

$$\alpha'_\Lambda(t) = \left(\frac{2\Lambda+1}{2\Lambda+3}\right) \frac{\xi_\Lambda(t) \xi'_{\Lambda+1}(t) - \xi_{\Lambda+1}(t) \xi'_\Lambda(t)}{(\xi_\Lambda(t))^2}, \quad (4.22)$$

la que puede reescribirse, usando la Ec. (4.16) como

$$\alpha'_\Lambda(t) = \left(\frac{2\Lambda+1}{2\Lambda+3}\right) \left\{ \left(\frac{2\Lambda+3}{2\Lambda+5}\right) \frac{\xi_{\Lambda+2}}{\xi_\Lambda} + \left(\frac{\Lambda+1}{2\Lambda+1}\right) - \left(\frac{\Lambda+1}{2\Lambda+3}\right) \left(\frac{\xi_{\Lambda+1}}{\xi_\Lambda}\right)^2 - \left(\frac{\Lambda}{2\Lambda-1}\right) \left(\frac{\xi_{\Lambda+1}}{\xi_\Lambda}\right) \left(\frac{\xi_{\Lambda-1}}{\xi_\Lambda}\right) \right\} \quad (4.23)$$

Tomando el límite cuando $t \rightarrow 0$ y usando el mismo argumento que en la derivación de (4.21), el primer y el tercer término del segundo miembro de la ecuación anterior se anulan. Teniendo en cuenta la Ec. (4.13), el último término de la Ec. (4.23) puede escribirse en función de los pesos espaciales, por lo que ésta puede expresarse de la siguiente manera:

$$\alpha'_\Lambda(0) = \left(\frac{\Lambda+1}{2\Lambda+3}\right) - \left(\frac{\Lambda}{2\Lambda+1}\right) \alpha_\Lambda(0) \alpha_{\Lambda-1}(0), \quad \Lambda \text{ par.} \quad (4.24)$$

De esta forma la Ec. (4.14) se expresa como

$$\alpha_\Lambda(t) = t \left\{ \left(\frac{\Lambda+1}{2\Lambda+3}\right) - \left(\frac{\Lambda}{2\Lambda+1}\right) \alpha_\Lambda(t) \alpha_{\Lambda-1}(t) \right\}, \quad \Lambda \text{ par.} \quad (4.25)$$

Consideremos ahora el caso Λ impar. Sea

$$\bar{\alpha}_\Lambda(t) \equiv t \alpha_\Lambda(t), \quad \Lambda \text{ impar.} \quad (4.26)$$

Con procedimientos similares a los utilizados en el caso de Λ par se obtiene que

$$\bar{\alpha}_\Lambda(0) = \left(\frac{2\Lambda+3}{\Lambda+1}\right) + \left(\frac{2\Lambda+3}{2\Lambda+1}\right) \left(\frac{\Lambda}{\Lambda+1}\right) \frac{t}{\alpha_{\Lambda-1}}, \quad \Lambda \text{ impar,} \quad (4.27)$$

de la cual surge que

$$\alpha_\Lambda(t) = \frac{1}{t} \left(\frac{2\Lambda+3}{\Lambda+1}\right) \left[1 + \left(\frac{\Lambda}{2\Lambda+1}\right) \frac{t}{\alpha_{\Lambda-1}(t)} \right], \quad \Lambda \text{ impar} \quad (4.28)$$

Las Ecs. (4.25) y (4.28) forman un sistema de ecuaciones para los pesos espaciales para métodos de orden par e impar. Resolviendo (4.25) para $\alpha_\Lambda(t)$ se tiene la siguiente relación recursiva para Λ par

$$\alpha_\Lambda(t) = \frac{\left(\frac{\Lambda+1}{2\Lambda+3}\right) t}{2 + \left(\frac{\Lambda-1}{2\Lambda-1}\right) \frac{t}{\alpha_{\Lambda-2}(t)}}, \quad \Lambda \text{ par.} \quad (4.29)$$

Utilicemos ahora inducción completa para obtener una expresión genaral para el límite de los pesos espaciales con orden par. Supongamos que cuando t tiende a cero

$$\alpha_{\Lambda}(t) = \left(\frac{1}{2\Lambda + 3} \right) t, \quad \Lambda \text{ par.} \quad (4.30)$$

Observemos que para $\Lambda = 0$ se tiene que $\alpha'_0(0) = 1/3$, lo cual está de acuerdo con la Ec. (4.22). Sustituyendo (4.30) en la Ec. (4.29) se tiene

$$\alpha_{\Lambda+2}(t) = \left(\frac{1}{2\Lambda + 7} \right) t, \quad (4.31)$$

por lo que la Ec. (4.30) es válida para todo Λ par.

Sustituyendo ahora esta última ecuación en (4.28) se obtiene

$$\alpha_{\Lambda}(t) = \frac{2\Lambda + 3}{t}, \quad \Lambda \text{ impar.} \quad (4.32)$$

Finalmente, las Ecs. (4.30) y (4.32) representan el límite de los pesos espaciales del método AHOT-N cuando t tiende a cero.

4.3 Conclusiones

En este Capítulo se han realizado mejoras al método AHOT-N unidimensional que contribuyen a aumentar la precisión de sus soluciones. Las mismas consisten en:

1. Una expresión recursiva sencilla que permite reconstruir puntualmente los flujos generados por el método AHOT-N con mayor precisión que $\tilde{\psi}$.

Dicha expresión está dada por las Ecs. (4.7) y (4.3), las que epleadas en (2.22) permiten obtener ψ en todo el dominio. Esta expresión permite la evaluación de la integral de (2.22) sin necesidad de realizar una integración numérica.

La reconstrucción a posteriori de ψ es importante ya que no sólo es más precisa que $\tilde{\psi}$, $O(h^{\Lambda+2})$ y $O(h^{\Lambda+1})$ respectivamente, sino que además es continua en todo el dominio mientras que $\tilde{\psi}$ es discontinua en las interfases.

2. Una fórmula para evaluar los coeficientes de peso espaciales que permite elevar el orden de la aproximación polinómica o achicar el tamaño de las celdas en forma arbitraria sin introducir errores de truncamiento.

La expresión que surge del método numérico para evaluar los coeficientes de peso espaciales, Ec. (4.8), es indeterminada cuando el camino óptico tiende a cero o Λ es grande. Esta indeterminación produce errores de truncamiento que afectan a dichos coeficientes y por lo tanto a la solución numérica.

En este Capítulo se ha propuesto una expresión asintótica para los coeficientes α , válida cuando $t \rightarrow 0$ o Λ es grande, que permite obtener los mismos sin errores de truncamiento.

Capítulo 5

Estimación de errores *a posteriori* del método AHOT-N.

La estimación de errores *a priori* es útil a la hora de optar entre diferentes métodos para resolver un dado problema. Sin embargo en la práctica es necesario estimar la precisión de las soluciones obtenidas luego de ser resuelto un dado problema, para lo cual la estimación de errores *a posteriori* es necesaria. Más aún, una pregunta natural es cómo *refinar* la aproximación para lograr la máxima precisión posible con mínimo costo computacional. La respuesta puede obtenerse a través de estimación *local a posteriori* de errores, la cual se realiza con los usualmente llamados *indicadores locales* de error.

La literatura referida a estimación *a posteriori* de errores es abundante, por ejemplo (Noor, 1987), (Verfurth, 1996), sin embargo las aplicaciones en neutrónica son escasas y aplicadas solamente a la ecuación de difusión, (Jatuff 1995, 1997a, 1997b).

En este Capítulo se introduce un estimador de error a posteriori junto con algunos indicadores locales para cálculos unidimensionales de transporte realizados con el método AHOT-N.

Es interesante recordar que el método AHOT-N permite dos operaciones para mejorar la aproximación: Reducir el tamaño de la celda, h , o aumentar el orden del método, Λ . Esta flexibilidad hace a este método particularmente apto para ser usado con técnicas adaptivas, en las que las operaciones mencionadas pueden realizarse localmente según lo sugerido por los indicadores locales.

5.1 La ecuación del error

A efectos de realizar una estimación *a posteriori* de errores escribiremos la ecuación del error de una forma diferente a la usada para el análisis *a priori*. Reescribamos la Ec. (2.13) de la siguiente forma:

$$\frac{d\underline{\psi}}{dx}(x) + \underline{\mu}^{-1}\sigma(x) [\underline{I} - \underline{S}(x)] \underline{\psi}(x) = \underline{\mu}^{-1}\sigma(x)\underline{S}(x) (\underline{\tilde{\psi}} - \underline{\psi})(x) + \underline{\mu}^{-1}\underline{\tilde{q}}(x). \quad (5.1)$$

Restando a la Ec. (5.1) la (2.6) y definiendo $\underline{\epsilon}(x) \equiv \underline{\psi}(x) - \underline{\psi}^e(x)$, se tiene que

$$\frac{d\underline{\epsilon}}{dx}(x) + \underline{\mu}^{-1}\sigma(x) [\underline{I} - \underline{S}(x)] \underline{\epsilon}(x) = \underline{\mu}^{-1}\sigma(x)\underline{S}(x) (\underline{\tilde{\psi}} - \underline{\psi})(x) + \underline{\mu}^{-1}(\underline{\tilde{q}} - \underline{q})(x), \quad (5.2)$$

la cual es la ecuación del error. Es importante notar que el segundo miembro de la ecuación anterior no contiene la solución $\underline{\psi}^e$ como ocurría en el caso del análisis *a priori*, pero sí contiene los vectores $\tilde{\underline{\psi}}$ y $\underline{\psi}$, los que pueden ser evaluados utilizando la solución numérica. Las componentes de la Ec. (5.2) están acopladas a través del término de fuente, sin embargo su solución puede expresarse en función de $\underline{\epsilon}$ en $x_{k-1/2}$ usando la solución general de ecuaciones diferenciales ordinarias con coeficientes constantes, es decir,

$$\underline{\epsilon}(x) = \exp\left[-\underline{A}_k(x - x_{k-1/2})\right] \underline{\epsilon}(x_{k-1/2}) + \int_{x_{k-1/2}}^x \exp\left[-\underline{A}_k(x - x')\right] \underline{g}_k(x') dx', \quad x \in C_k, \quad (5.3)$$

donde se ha definido $\underline{g}_k(x') \equiv \underline{\mu}^{-1} \left[\sigma_k \underline{S}_k (\tilde{\underline{\psi}} - \underline{\psi})(x') + (\tilde{\underline{q}} - \underline{q})(x') \right]$. El primer término del segundo miembro de la Ec. (5.3) aún contiene a $\underline{\psi}^e$, el cual no se conoce a la hora de evaluar dicha ecuación, pero como se demostró en el análisis *a priori*, su orden es $O(h^{2\Lambda+2})$, donde $h \equiv \max\{h_k, 1 \leq k \leq K\} \rightarrow 0$, mientras que el segundo término contiene solamente cantidades calculables y es $O(h^{\Lambda+2})$ como se muestra en el siguiente Lema.

Lema 5.1.1 Sea $\tilde{\underline{f}} = \mathbf{M}\underline{f}$ con \underline{f} infinitamente diferenciable por trozos. Entonces, si $h \rightarrow 0$,

$$I \equiv \int_{x_{k-1/2}}^x \exp\left(x' \underline{A}_k\right) (\tilde{\underline{f}} - \underline{f})(x') dx' = O(h^{\Lambda+2}). \quad (5.4)$$

Dem: Dado que $\tilde{\underline{f}} = \mathbf{M}\underline{f}$, puede escribirse que

$$(\tilde{\underline{f}} - \underline{f})(x) = \sum_{\lambda=\Lambda+1}^{\infty} (2\lambda + 1) \underline{f}_{(\lambda,k)} p_{\lambda,k}(x), \quad k = 1, \dots, K, \quad (5.5)$$

y por lo tanto

$$I = \sum_{\lambda=\Lambda+1}^{\infty} (2\lambda + 1) \underline{f}_{(\lambda,k)} \int_{x_{k-1/2}}^x \exp\left(x' \underline{A}_k\right) p_{\lambda,k}(x') dx'. \quad (5.6)$$

Expandiendo la exponencial en serie de Taylor alrededor de x_k , el término de menor orden está dado por el primer término de esta expansión, por lo tanto

$$\int_{x_{k-1/2}}^x \exp\left(x' \underline{A}_k\right) p_{\lambda,k}(x') dx' = \exp\left(x_k \underline{A}_k\right) \left(\frac{h_k}{2}\right) \int_{-1}^{2(x-x_k)/h_k} P_{\lambda}(t) dt + t.o.s. \quad (5.7)$$

Usando la siguiente relación para las derivadas de los P_{λ}

$$P'_{\lambda+1} - xP'_{\lambda}(x) = (\lambda + 1)P_{\lambda}(x), \quad (5.8)$$

se tiene que

$$\int_{x_{k-1/2}}^x \exp\left(x' \underline{A}_k\right) p_{\lambda,k}(x') dx' = \begin{cases} \exp\left(x' \underline{A}_k\right) \frac{h_k}{2\lambda} \left[p_{\lambda+1,k}(x) - \frac{2}{h_k}(x - x_k)p_{\lambda,k}(x) \right] + t.o.s, & \lambda > 0 \\ \exp\left(x' \underline{A}_k\right) \frac{h_k}{2\lambda} \left[\frac{2}{h_k}(x - x_k) + 1 \right] + t.o.s., & \lambda = 0 \end{cases}, \quad (5.9)$$

la cual es $O(h)$. Teniendo en cuenta que $\underline{f}_{(\lambda,k)}$ es $O(h^{\lambda})$ queda demostrado el Lema.

5.2 Estimación de errores *a posteriori*

Para que un estimador *a posteriori* sea útil se requiere que cumpla algunas propiedades. Una de ellas es que tenga el mismo orden asintótico de convergencia con respecto a h que el error exacto que estima. Además, el costo computacional de su evaluación debe ser mínimo comparado con el de la obtención de la solución numérica. Finalmente, es preferible que sobreestime el error en vez de subestimarlos de forma tal de evitar darle al usuario una indicación falsa de la precisión obtenida.

Normalmente un estimador de error *a posteriori* es usado para aumentar la precisión en algunas regiones del sistema, por ejemplo refinando la discretización espacial, y es utilizado en esquemas adaptivos. Esto introduce otra propiedad deseable para los estimadores de error *a posteriori* y es que el estimador *global* pueda descomponerse en indicadores *locales* de error.

En esta Sección se trabajará con la Ec. (5.3) para obtener una estimación de $\underline{\psi} - \underline{\psi}^\epsilon$ que satisfaga las propiedades mencionadas anteriormente.

Sea la norma L^2 del error

$$\|\underline{\psi} - \underline{\psi}^\epsilon\|_{L^2} = \sqrt{\int_0^L |\underline{\psi} - \underline{\psi}^\epsilon|^2 dx}, \quad (5.10)$$

donde se ha usado la notación $|\underline{\epsilon}|^2 = \underline{\epsilon} \cdot \underline{\epsilon} = \sum_{i=1}^N \epsilon_i^2$.

Introduciendo la Ec. (5.3) en la (5.10) y escribiendo la integral desde 0 a L como la suma de integrales sobre cada intervalo C_k se tiene que

$$\|\underline{\epsilon}\|_{L^2} = \sqrt{\sum_k \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \left| \int_{x_{k-1/2}}^x \exp[(x' - x)\underline{A}_k] \underline{\mu}^{-1} [\sigma_k \underline{S}_k (\tilde{\underline{\psi}} - \underline{\psi})(x') + (\tilde{\underline{q}} - \underline{q})(x')] dx' \right|^2 dx} + t.o.s., \quad (5.11)$$

donde *t.o.s.* se refiere a los términos de orden superior que se han despreciado al eliminar el primer término del segundo miembro de la Ec. (5.3) por ser de mayor orden que el segundo, según lo visto en la Sección anterior.

El segundo miembro de la Ec (5.11) estima la norma L^2 del error y puede ser usada como un estimador de error *a posteriori* ya que todas las cantidades que aparecen en ella son *conocidas* (recordar que la solución numérica se asume *conocida* en el momento de la estimación de errores *a posteriori*). Sin embargo la evaluación de dicha ecuación no es sencilla, por lo que a continuación se simplificará la misma hasta obtener una expresión más apta para los cálculos prácticos.

En la Ec. (5.11) x y x' pertenecen a C_k , por lo que $|x' - x| \leq h_k$. Expandiendo la exponencial en serie de Taylor alrededor de x_k , el término de menor orden de la integral entre barras de la Ec. (5.11) corresponde a aproximar $\exp[(x' - x)\underline{A}_k]$ por la matriz identidad. Esta aproximación, junto con la desigualdad $\left(\int_{x_{k-1/2}}^x f\right)^2 \leq |x - x_{k-1/2}| \left|\int_{x_{k-1/2}}^x f^2\right|$ conduce a la primera de las siguientes desigualdades:

$$\begin{aligned} \|\underline{\epsilon}\|_{L^2}^2 &\leq \sum_k \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} |x - x_{k-1/2}| \left| \int_{x_{k-1/2}}^x \left\{ \underline{\mu}^{-1} [\sigma_k \underline{S}_k (\tilde{\underline{\psi}} - \underline{\psi})(x') + (\tilde{\underline{q}} - \underline{q})(x')] \right\}^2 dx' \right| dx + t.o.s. \\ &\leq \sum_{C_k} \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} |x - x_{k-1/2}| \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \left\{ \underline{\mu}^{-1} [\sigma_k \underline{S}_k (\tilde{\underline{\psi}} - \underline{\psi})(x') + (\tilde{\underline{q}} - \underline{q})(x')] \right\}^2 dx' dx + t.o.s. = \\ &= \sum_k \frac{h_k^2}{2} \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \left\{ \underline{\mu}^{-1} [\sigma_k \underline{S}_k (\tilde{\underline{\psi}} - \underline{\psi})(x') + (\tilde{\underline{q}} - \underline{q})(x')] \right\}^2 dx' + t.o.s. \equiv \eta + t.o.s. \end{aligned} \quad (5.12)$$

El segundo miembro de la primera desigualdad contiene la integral entre $x_{k-1/2}$ y x de una función positiva, por lo que ésta se puede acotar por la integral sobre un intervalo más grande de la misma función, lo que genera la segunda de las desigualdades de la Ec. (5.12).

La Ec. (5.12) provee una cota superior para el error medido en norma L^2 . El último miembro de dicha ecuación depende solamente de cantidades conocidas, por lo que puede ser utilizado para estimar el error *global* de la solución obtenida con el método AHOT-N unidimensional.

5.3 Indicadores de error

La Ec. (5.12) estima el error *global* en el dominio computacional. Como ya hemos mencionado, es importante descomponer el estimador global en cantidades *locales*, llamadas *indicadores* de error. Estos sirven para indicar dónde la aproximación debe ser mejorada para mejorar la precisión global con el mínimo costo. Sea η_{ik} el indicador de error para la componente i en la celda C_k . Puede verse que la Ec. (5.12) puede reescribirse como

$$\|\epsilon\|_{L^2}^2 \leq \sum_{i=1}^N \sum_{k=1}^K \eta_{ik}^2 + t.o.s., \quad (5.13)$$

donde

$$\eta_{ik}^2 \equiv \frac{h_k^2}{2} \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \left\{ \underline{\mu}^{-1} \left[\sigma_k \underline{S}_k \left(\tilde{\underline{\psi}} - \underline{\psi} \right) (x') + \left(\tilde{\underline{q}} - \underline{q} \right) (x') \right] \right\}_i^2 dx', \quad (5.14)$$

por lo que, esencialmente, el indicador es la diferencia en las fuentes de scattering en la dirección i y en la celda C_k entre $\tilde{\underline{\psi}}$ y $\underline{\psi}$ más $\tilde{\underline{q}} - \underline{q}$. Esto es natural en el sentido de que el operador \mathbf{M} que define a la aproximación numérica actúa sólo sobre la fuente (comparar Ecs. (2.9) y (2.12)).

Puede verse que si la fuente externa está exactamente representada por $\tilde{\underline{q}}$ el indicador de error en una celda puramente absorbente es nulo. Esto *no* debe ser interpretado como que la celda tiene *cero* error, lo cual es *falso*. La interpretación correcta es que aumentando la precisión en dicha celda, ya sea discretizándola o aumentando el orden del método en ella, su precisión *no* mejorará. Este ejemplo muestra que los indicadores de error más que "seguir" el comportamiento del error "detectan" dónde el método debe ser mejorado.

Si $\tilde{\underline{q}} = \underline{q}$ y el scattering es isotrópico, la Ec. (5.14) se simplifica a

$$\eta_{ik}^2 = \frac{h_k^2 \sigma_k^2 c_k^2}{2 \mu_i^2} \int_{C_k} (\tilde{\phi} - \phi)^2 (x') dx', \quad (5.15)$$

donde $\tilde{\phi}$ y ϕ son los flujos escalares asociados a $\tilde{\underline{\psi}}$ y $\underline{\psi}$ respectivamente, los que en la aproximación S_N están dados por

$$\tilde{\phi} = \sum_{i=1}^N w_i \tilde{\psi}_i, \quad \phi = \sum_{i=1}^N w_i \psi_i. \quad (5.16)$$

De mayor interés aún son los indicadores *por celda*, ya que permiten identificar las celdas donde la solución numérica tiene mayor error. Este se define como

$$\eta_k^2 \equiv \sum_{i=1}^N \eta_{ik}^2, \quad (5.17)$$

el que para el caso de scattering isotrópico se reduce a

$$\eta_k = \frac{\sigma_k c_k h_k}{\sqrt{2}} \sqrt{\int_{c_k} (\tilde{\phi} - \phi)^2(x') dx'} \sqrt{\sum_{i=1}^N \frac{1}{\mu_i^2}}. \quad (5.18)$$

5.4 Propiedades del estimador de error

En esta Sección se mostrarán algunas propiedades que verifica el estimador de error dado por la Ec. (5.12). En particular se demostrará que dicho estimador conserva el orden del error cuando $h \rightarrow 0$ y además que el mismo estimador se obtiene a través del residuo de la Ec. (2.13).

5.4.1 Orden del estimador de error

Como se demostró en el Capítulo anterior, $\|\underline{\epsilon}\|_{L^\infty} = O(h^{\Lambda+2})$. Debido a la equivalencia de las normas L^∞ y L^2 , (Adams, 1975), se tiene que $\|\underline{\epsilon}\|_{L^2}$ también es $O(h^{\Lambda+2})$. Debido a que $(\tilde{\psi}_i - \psi_i)$ y $(\tilde{q}_i - q_i)$ son ambos $O(h^{\Lambda+1})$, se tiene que el estimador dado por la raíz cuadrada del último miembro de la Ec. (5.12) es $O(h^{\Lambda+2})$, el mismo orden que el error.

5.4.2 Forma residual del estimador e indicador

El estimador de error presentado está basado en la diferencia entre $\underline{\psi}$ y $\tilde{\underline{\psi}}$, dos aproximaciones calculadas por el método AHOT-N que tienen diferente precisión, como se ha discutido anteriormente. En la terminología de elementos finitos este estimador pertenece a la clase de estimadores *jerárquicos*, (Verfurth, 1996). Sin embargo, el estimador propuesto es también un estimador basado en el *residuo*, es decir, se puede obtener a través del residuo de la ecuación diferencial. Para ver esta afirmación, notemos que de la Ec. (2.13) se tiene que

$$\sigma \underline{S}(\tilde{\underline{\psi}} - \underline{\psi}) + \tilde{\underline{q}} - \underline{q} = \underline{\mu} \frac{d\underline{\psi}}{dx} + \sigma \underline{\psi} - \sigma \underline{S} \underline{\psi} - \underline{q} \equiv \underline{\mathcal{R}}(\underline{\psi}) \quad (5.19)$$

donde $\underline{\mathcal{R}}(\underline{\psi})$ es el residuo que se obtiene cuando se sustituye $\underline{\psi}$ en la ecuación exacta (2.6). Como $\underline{\psi}$ no es exacto ($\underline{\psi} \neq \underline{\psi}^e$), $\underline{\mathcal{R}}(\underline{\psi})$ no es igual a cero. Reemplazando la Ec. (5.19) en la (5.14) puede verse que el indicador de error es

$$\eta_{ik}^2 = \frac{h_k^2}{2} \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \left| \underline{\mu}^{-1} \underline{\mathcal{R}} \right|^2 dx, \quad (5.20)$$

donde la norma L^2 del residuo se ha hecho evidente. Sin embargo, desde el punto de vista computacional, la fórmula (5.12) resulta más conveniente.

5.5 Validaciones numéricas

La estimación *a posteriori* de errores ha sido implementada en el código AHOTN1D. A continuación se muestran algunas validaciones realizadas en los problemas *S2HOM* y *S4HET* definidos anteriormente.

En la Tabla 5.1 se muestra el error global $\epsilon \equiv \sqrt{\sum_k \epsilon_k^2}$ y el estimador $\eta = \sqrt{\sum_k \sum_i \eta_{ik}^2}$ con sus respectivos ritmos de convergencia (CR), los cuales son calculados como el cociente entre los valores correspondientes a dos sucesivas discretizaciones para cada Λ . Puede verse que ambos ritmos de convergencia tienden al valor predicho por la teoría, es decir a $2^{\Lambda+2}$ cuando $h \rightarrow 0$.

Tabla 5.1: Error global y estimador para el problema S4HET.

K	Λ	ϵ	$CR(\epsilon)$	η	$CR(\eta)$	Λ	ϵ	$CR(\epsilon)$	η	$CR(\eta)$
2	0	3.957E-01		3.668E+00		1	3.965E-01		3.654E+00	
4	0	3.960E-01	1.00	1.831E+00	2.00	1	1.467E-01	2.70	9.026E-01	4.05
8	0	1.932E-01	2.05	7.157E-01	2.56	1	3.902E-02	3.76	2.025E-01	4.46
16	0	6.696E-02	2.89	2.247E-01	3.18	1	7.076E-03	5.51	3.398E-02	5.96
32	0	1.876E-02	3.57	6.105E-02	3.68	1	1.025E-03	6.90	4.774E-03	7.12
64	0	4.843E-03	3.87	1.563E-02	3.91	1	1.347E-04	7.61	6.201E-04	7.70
128	0	1.221E-03	3.97	3.933E-03	3.97	1	1.708E-05	7.89	7.834E-05	7.92
4	2	8.034E-02		9.785E-01		3	7.981E-02		9.585E-01	
4	2	3.925E-02	2.05	3.169E-01	3.09	3	1.047E-02	7.62	1.072E-01	8.94
8	2	6.095E-03	6.44	4.447E-02	7.13	3	9.914E-04	10.56	9.708E-03	11.05
16	2	6.245E-04	9.76	4.386E-03	10.14	3	6.845E-05	14.48	6.336E-04	15.32
32	2	5.055E-05	12.36	3.453E-04	12.70	3	3.237E-06	21.15	2.887E-05	21.95
64	2	3.486E-06	14.50	2.351E-05	14.69	3	1.169E-07	27.69	1.030E-06	28.03
128	2	2.242E-07	15.55	1.506E-06	15.61	3	3.803E-09	30.73	3.341E-08	30.83
2	4	1.212E-02		2.091E-01		5	1.149E-02		1.866E-01	
4	4	2.598E-03	4.66	3.409E-02	6.14	5	7.223E-04	15.91	1.191E-02	15.66
8	4	1.913E-04	13.58	2.356E-03	14.47	5	4.177E-05	17.29	6.013E-04	19.81
16	4	8.692E-06	22.01	9.825E-05	23.98	5	1.063E-06	39.28	1.412E-05	42.60
32	4	2.202E-07	39.46	2.411E-06	40.76	5	1.375E-08	77.32	1.782E-07	79.23
64	4	4.040E-09	54.52	4.383E-08	55.00	5	1.267E-10	108.54	1.631E-09	109.24
128	4	6.598E-11	61.23	7.142E-10	61.37	5	1.036E-12	122.33	1.331E-11	122.53
2	6	1.972E-03		5.120E-02		7	1.459E-03		3.465E-02	
4	6	2.316E-04	8.51	4.471E-03	11.45	7	7.835E-05	18.63	1.670E-03	20.75
8	6	8.823E-06	26.25	1.437E-04	31.12	7	1.705E-06	45.95	3.096E-05	53.93
16	6	1.173E-07	75.24	1.787E-06	80.39	7	1.160E-08	146.98	1.997E-07	155.04
32	6	7.646E-10	153.37	1.144E-08	156.25	7	3.802E-11	305.16	6.450E-10	309.62
64	6	3.529E-12	216.67	5.255E-11	217.71	7	8.786E-14	432.68	1.485E-12	434.40
128	6	1.456E-14	242.36	2.146E-13	244.84	7	1.951E-15	45.04	3.034E-15	489.38

Algunos de los valores dados en la Tabla 5.1 se grafican en la Figura 5.1 (der.), mientras que el ritmo de convergencia del error global y del estimador correspondientes al problema S2HOM se muestran en la misma figura (izq.). Por otra parte, en la Figura 5.2 se muestra el error global y el estimador como función del tamaño de celda obtenidos con $\Lambda = 0, 3$ y 5 para ambos problemas. Aquí puede apreciarse cómo el estimador "sigue" la dependencia en h del error.

En la Figura 5.3 se muestra el comportamiento *celda por celda* del error e indicador local para el problema S2HOM resuelto con 32 intervalos y para Λ entre 0 y 5.

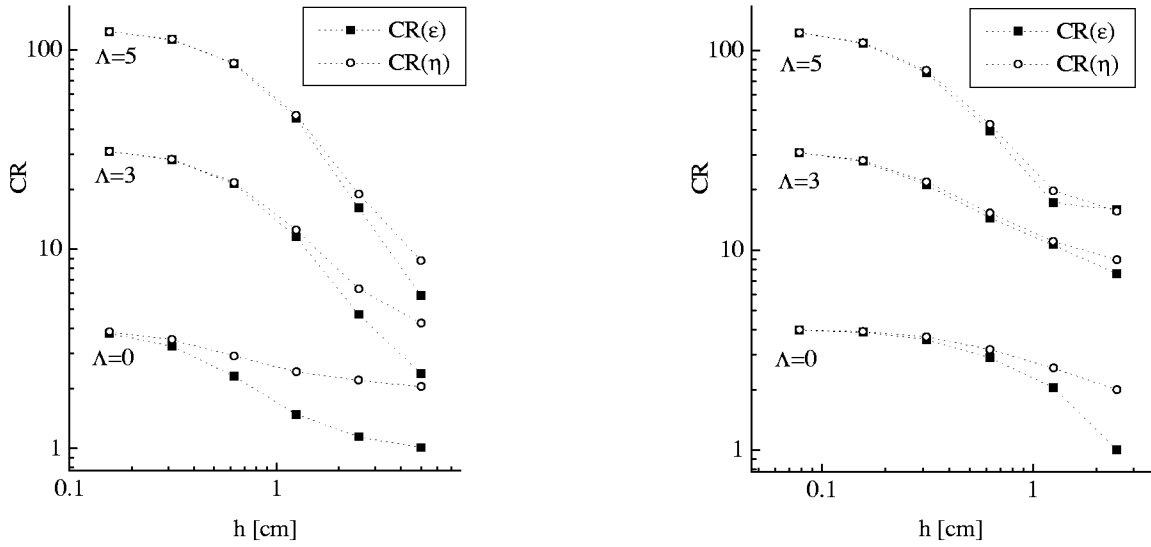


Figura 5.1: Ritmos de convergencia del error global y estimador para los problemas S2HOM (izq.) y S4HET (der.).

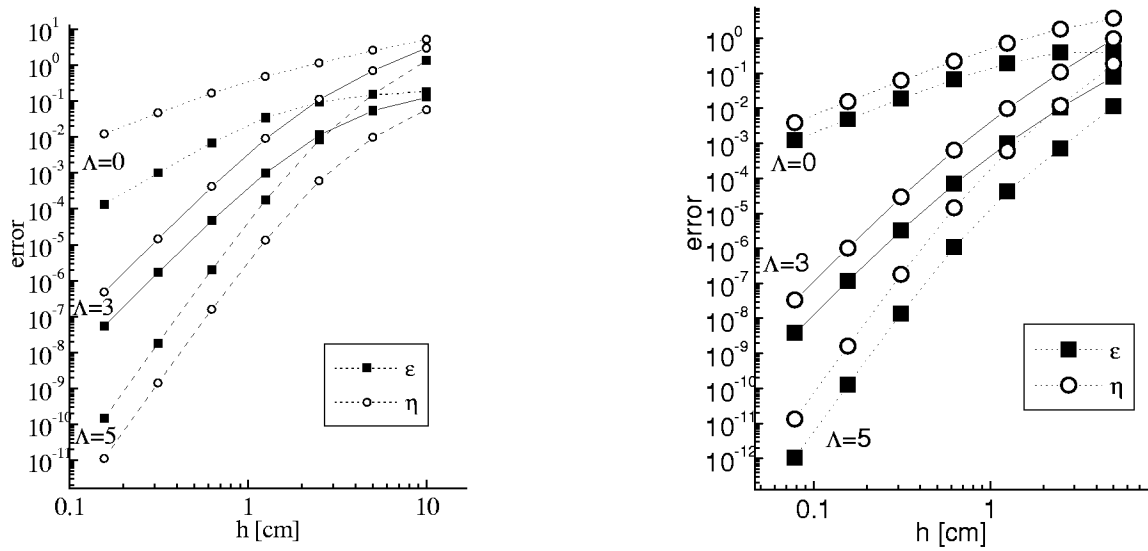


Figura 5.2: Error global y estimador correspondiente a los casos $\Lambda = 0, 3$, y 5 en función del tamaño de celda para los casos S2HOM (izq.) y S4HET (der.).

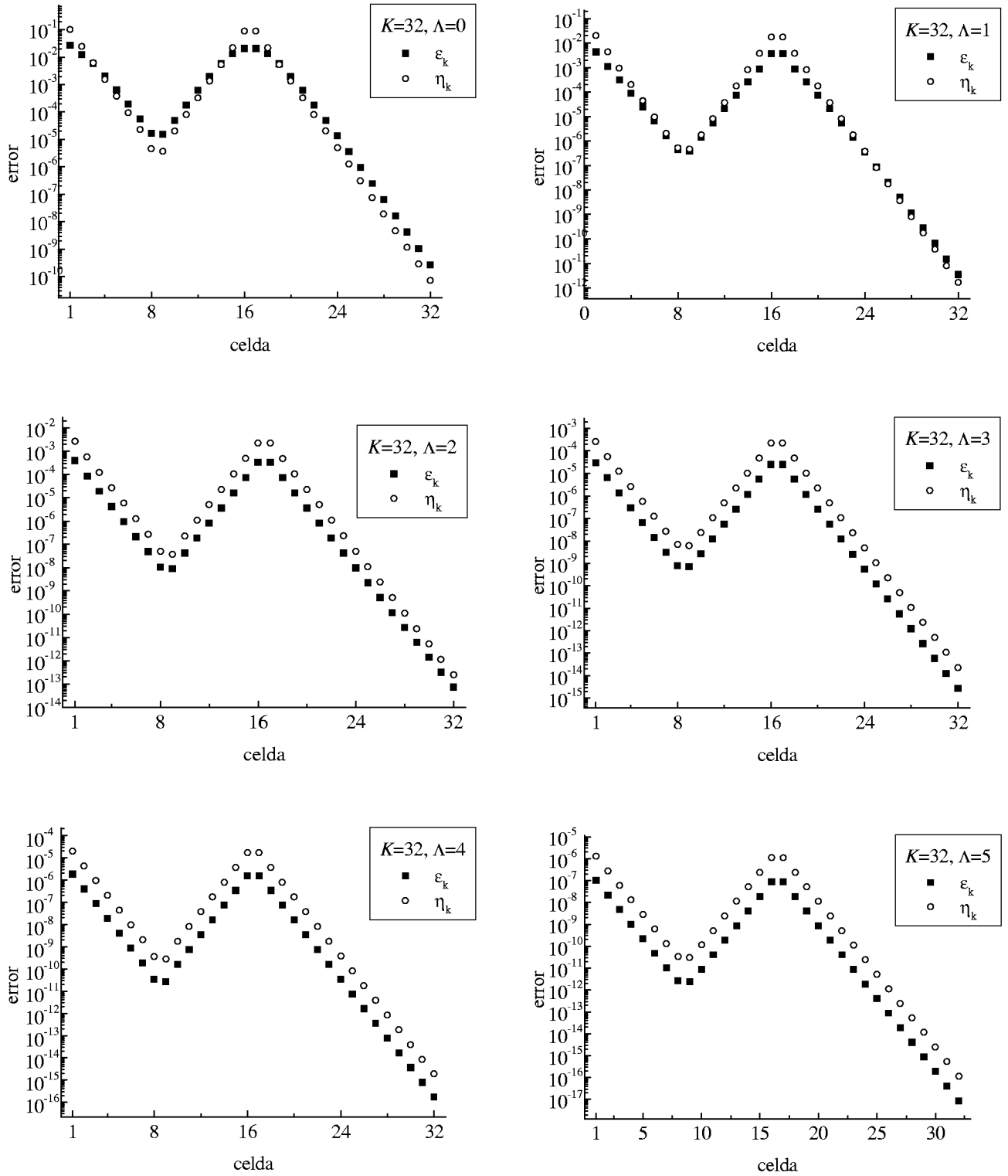


Figura 5.3: Comportamiento *celda por celda* del error local e indicador para el caso $K = 32$, $\Lambda = 0$ a 5, correspondientes al problema S2HOM.

En la figura 5.3 puede verse que el indicador local sigue muy bien al error local, lo cual es una propiedad deseable del indicador η_k para ser usado en esquemas adaptivos. Las discrepancias que se observan para $\Lambda = 0$ y 1 pueden ser atribuidas a los términos de orden superior despreciados al obtener el estimador. El mismo comportamiento se observa en el problema S4HET. En la Fig. 5.4 se muestra la distribución de ϵ_k y η_k correspondientes a este problema para dos discretizaciones espaciales y órdenes de aproximación.

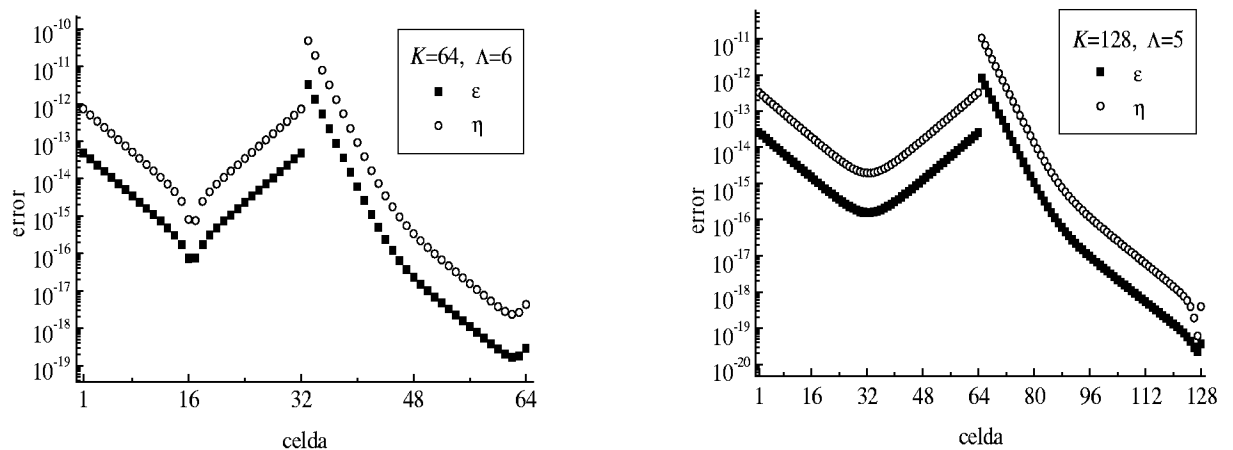


Figura 5.4: Comportamiento *celda por celda* del error local e indicador para los casos $K = 64$ y $K = 128$, $\Lambda = 4$ y 5 respectivamente, correspondientes al problema S4HET.

Todas las deducciones hechas en este Capítulo asumen que $h \rightarrow 0$. Sin embargo, una alternativa interesante en el método AHOT-N es mejorar la precisión de las soluciones aumentando el orden Λ de la aproximación. La pregunta es entonces si η_k también sigue la dependencia de ϵ_k en función de Λ . Esto ha sido investigado numéricamente y los resultados se muestran en la Figura 5.5 para las celdas 1, 16, 20 y 32 correspondientes al problema *S2HOM* resuelto con 32 celdas. El máximo error en este caso está en las celdas 1 y 16, y como puede verse en la Figura 5.5 η sigue muy bien a ϵ en dichas celdas. En las celdas 20 y 32 los errores son menores, y para pequeños valores de Λ el comportamiento del estimador es menos satisfactorio. Se puede ver por ejemplo, que en la celda 32 para $\Lambda = 0$ y 1 el error estimado es menor que el error. Nuevamente, este hecho puede ser debido a los términos de orden superior despreciados en la deducción del estimador, los que parecen ser significativos a bajo orden pero se hacen despreciables cuando $\Lambda \geq 2$.

La Figura 5.6 muestra el error local y el indicador para el problema S4HET resuelto con 16 mallas, en función de Λ , para las celdas 1 y 9, donde se observa el máximo error. Conceptualmente, estos resultados son similares en los dos problemas resueltos.

5.6 Conclusiones

En este Capítulo se ha realizado un riguroso análisis de errores *a posteriori* aplicado al método AHOT-N unidimensional. Ha sido introducido un estimador de error así como indicadores locales de error *a posteriori*, los que consisten básicamente en la diferencia entre las fuentes de scattering generadas por la solución numérica del método AHOT-N, $\underline{\psi}$, y sus proyecciones dentro de cada celda en un espacio de polinomios por trozos, $\tilde{\underline{\psi}}$.

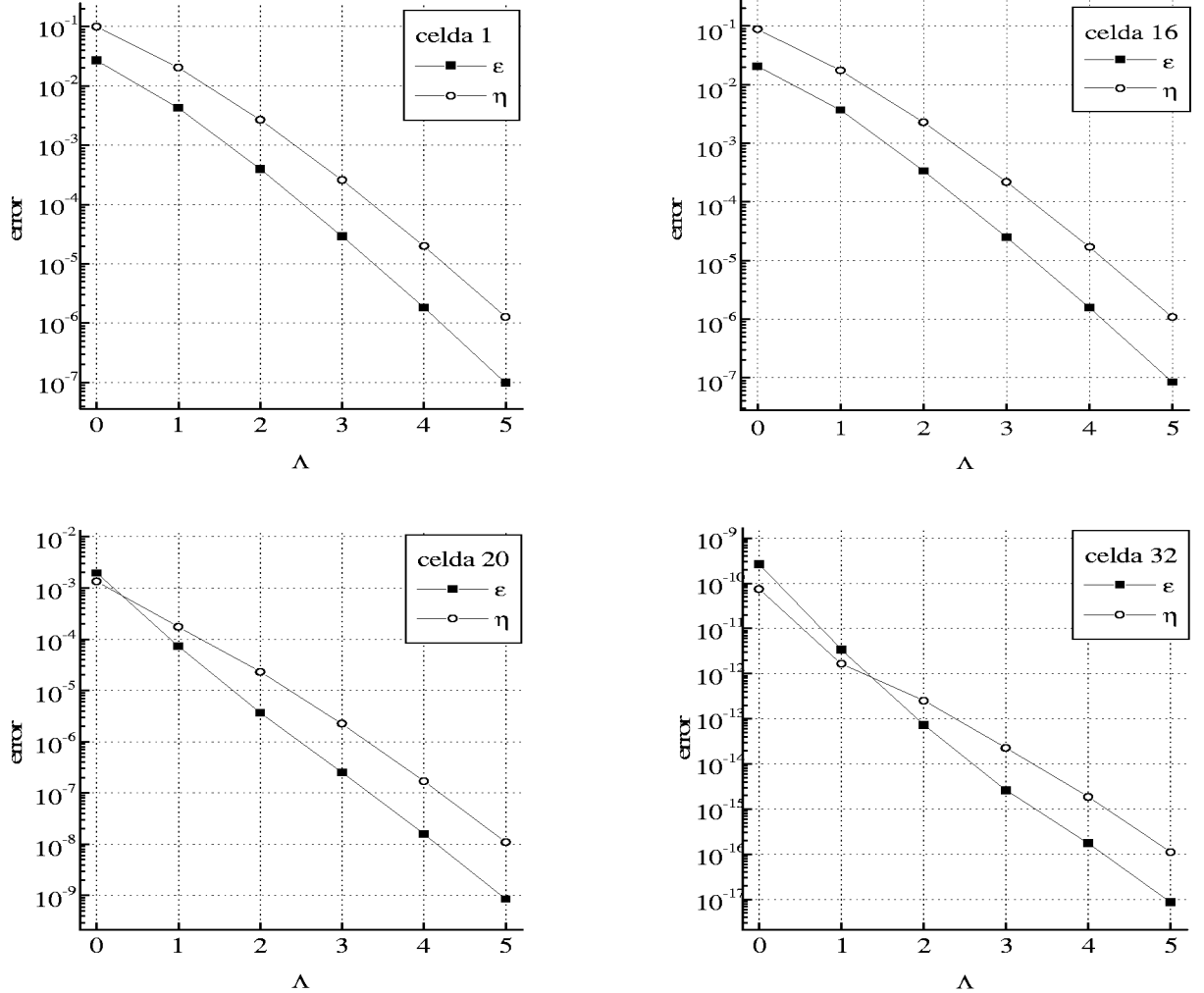


Figura 5.5: Error local e indicador para el problema S2HOM resuelto con 32 celdas en función del orden Λ .

Ha sido demostrado que el estimador es una cota superior del error, y que su orden asintótico cuando $h \rightarrow 0$ coincide con el del error.

Es importante notar nuevamente que el método AHOT-N evalúa $\underline{\psi}$ solamente en las interfases de las celdas, por lo que su cálculo en puntos interiores, el cual es necesario para obtener el estimador, representa un costo adicional. Éste, sin embargo es despreciable frente al requerido para obtener las soluciones de las ecuaciones del método AHOT-N, más si se tiene en cuenta la expresión recursiva presentada antes.

La línea teórica utilizada en las demostraciones es bastante estándar, se ha partido de la llamada *ecuación del error*. Sin embargo, algunas particularidades del método AHOT-N han hecho necesaria la deducción completa ya que varios resultados previos de estimación de errores *a posteriori* no son aplicables aquí.

Una aplicación interesante del análisis de errores *a posteriori* presentado en este Capítulo consiste en adaptar la aproximación aumentando el orden de los polinomios en aquellas celdas donde el indicador de error local es mayor. Para lograr ésto se necesita más desarrollo teórico ya que las deducciones realizadas asumen que las celdas son *suficientemente pequeñas* y por lo tanto los

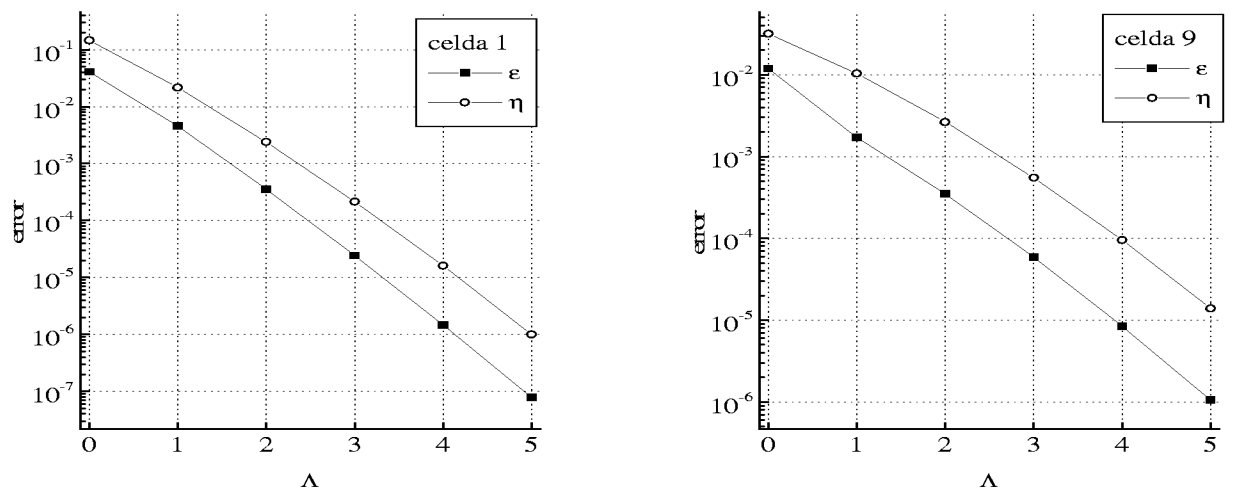


Figura 5.6: Error local e indicador para el problema S4HET resuelto con 16 celdas en función del orden Λ .

resultados son aplicables sólo cuando $h \rightarrow 0$. Sin embargo, los resultados numéricos presentados en este Capítulo son muy alentadores en este sentido.

Capítulo 6

El método AHOT-N multidimensional

Los métodos nodales aplicados a la aproximación SN han sido introducidos para obtener soluciones precisas en celdas espaciales de gran tamaño, (Wagner, 1979; Lawrence, 1979, 1980; Walters, 1981). Para la misma discretización del sistema, estos métodos requieren mayor esfuerzo computacional que los esquemas clásicos en Diferencias Finitas, sin embargo, dada la mejor precisión que se obtiene en sus soluciones en mallas grandes resultan en general menos costosos computacionalmente.

La mejor precisión de los métodos nodales respecto a los métodos clásicos se basa en que los primeros resuelven de forma más precisa los términos de fugas y además utilizan expansiones de alto orden (en lugar de constantes) para los flujos angulares en el interior y las superficies de cada celda.

Entre los esfuerzos realizados para disminuir el costo computacional de los métodos nodales cabe citar el método Lineal-Nodal, LN, (Walters, 1986), donde se reduce la complejidad de las ecuaciones finales a través de ciertas simplificaciones en las expresiones de los momentos lineales del flujo angular. Este es el primer método nodal que ha sido implementado en códigos comerciales de transporte (Rhoades, 1996).

El primer método nodal en que el flujo puede ser expandido hasta un orden cualquiera fue introducido en (Azmy, 1988a). En este método, AHOT-N, las relaciones entre los momentos de la expansión del flujo en el interior de las celdas con los correspondientes en las superficies han sido llevadas a la forma en diferencias pesadas que depende de un sólo coeficiente de peso espacial por dirección. La posibilidad de predeterminedar el orden de las expansiones así como la relativa simplicidad de las ecuaciones finales ha hecho que este método sea particularmente alentador para ser implementado en códigos de cálculo neutrónico.

En él, los flujos dentro de celdas homogéneas se expanden en polinomios de Legendre en cada dirección espacial hasta un orden Λ predeterminedado. Utilizando la ortogonalidad de los polinomios de Legendre se obtienen ecuaciones de balance, las que relacionan los momentos de la expansión del flujo en el interior de cada celda con los momentos transversales del flujo en las superficies. Este sistema de ecuaciones tiene más incógnitas que ecuaciones, y las ecuaciones faltantes se obtienen a través del procedimiento de integración transversal que genera ecuaciones diferenciales unidimensionales para la proyección de los flujos sobre las interfases de cada celda.

Las aproximaciones utilizadas para resolver estas ecuaciones diferenciales han dado lugar a distintos esquemas numéricos (Azmy, 1988b). En el método AHOT-N dichas ecuaciones se resuelven

en forma exacta obteniéndose expresiones de *interpolación* entre los momentos transversales del flujo en las superficies y los momentos del mismo en el interior de las celdas.

Este método ha mostrado ser particularmente apto para sistemas formados por regiones homogéneas de gran tamaño, ya que en estos casos se obtienen resultados precisos con menor esfuerzo computacional que los requeridos por esquemas clásicos o de bajo orden.

En este Capítulo se introduce el método AHOT-N multidimensional y se muestran algunos resultados obtenidos con el mismo en dos problemas benchmark.

6.1 Ecuación de transporte multidimensional

Sea la ecuación de transporte neutrónico con scattering isotrópico y fuente externa $q(\vec{r})$

$$\vec{\Omega} \cdot \nabla \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) + \sigma(\vec{r}) \Psi(\vec{r}, \vec{\Omega}) = \frac{1}{4\pi} [\sigma_s(\vec{r}) \Phi(\vec{r}) + q(\vec{r})], \quad (6.1)$$

con condiciones de contorno $\Psi(\vec{r}_s, \vec{\Omega}) = \Psi_s(\vec{\Omega})$ en la frontera exterior del sistema, \vec{r}_s , para $\vec{\Omega} \cdot \vec{n} < 0$, siendo \vec{n} la normal saliente en \vec{r}_s . La sección eficaz total y de scattering son $\sigma(\vec{r})$ y $\sigma_s(\vec{r})$ respectivamente, $\Psi(\vec{r}, \vec{\Omega})$ es el flujo angular y $\Phi(\vec{r})$ el flujo escalar.

En la aproximación SN la ecuación 6.1 es resuelta para cada dirección discreta $\vec{\Omega}_n$ de acuerdo a la cuadratura $\{(\vec{\Omega}_n, w_n), n = 1 \cdots M(N)\}$, en la que $M(N)$ es la cantidad de direcciones y w_n los pesos para integración aproximada sobre la variable angular. Por ejemplo

$$\Phi = \int_{4\pi} \Psi(\vec{\Omega}) d\vec{\Omega} \approx \sum_{n=1}^{M(N)} w_n \Psi_n. \quad (6.2)$$

Definiendo entonces

$$\Psi_n \equiv \frac{1}{4\pi} \Psi(\vec{\Omega}_n),$$

y utilizando una cuadratura tal que

$$\sum_{n=1}^{M(N)} w_n = 1,$$

se tiene que la ecuación a ser resuelta por el método SN es

$$\vec{\Omega}_n \cdot \nabla \Psi_n(\vec{r}) + \sigma(\vec{r}) \Psi_n(\vec{r}) = \sigma_s(\vec{r}) \Phi(\vec{r}) + q(\vec{r}), \quad n = 1, \cdots, M(N), \quad (6.3)$$

con condiciones de contorno $\Psi_n(\vec{r}_s) = \Psi_{ns}$ para toda dirección Ω_n entrante al sistema.

En el sistema de barrido de fuente, el flujo escalar utilizado en la iteración actual es obtenido de los flujos angulares de la iteración anterior, con lo que el segundo miembro de la última ecuación pasa a ser un dato conocido a la hora de evaluar ψ_n en una celda dada.

Los métodos numéricos empleados para resolver la Ec. (6.3) difieren entre sí por el tratamiento de la variable espacial. En la próxima Sección se introduce el método AHOT-N.

6.2 Definición del método numérico

En esta sección se resume el método AHOT-N y su implementación en diferencias pesadas como ha sido originalmente propuesto en (Azmy, 1988a). Para simplificar la notación, el mismo será representado en dos dimensiones ya que su extensión a tres dimensiones es inmediata. Aunque la deducción detallada del método se encuentra en (Azmy, 1988a), en esta Sección se remarcarán los procedimientos que ayuden a comprender los estudios que se realizan más adelante en este trabajo.

Consideremos la Ec. 6.3,

$$\vec{\Omega}_n \cdot \nabla \psi_n(\vec{r}) + \sigma(\vec{r})\psi_n(\vec{r}) = Q(\vec{r}), \quad n = 1, \dots, M(N), \quad (6.4)$$

donde se ha definido $Q(\vec{r}) \equiv \sigma_s(\vec{r})\phi(\vec{r}) + q(\vec{r})$, ψ es la aproximación de ordenadas discretas a Ψ y ϕ es el flujo escalar correspondiente a ψ .

Sea el dominio $[0, L_x] \times [0, L_y]$ particionado en un número finito de celdas disjuntas $\{C_k, k = 1, \dots, K\}$ dentro de las cuales las secciones eficaces son constantes. El centro de la celda $C_k = [x_{k-1/2}, x_{k+1/2})$ es (x_k, y_k) y sus dimensiones son h_{kx} y h_{ky} (por simplicidad, en general se las llamará h_x y h_y).

Sean los operadores de proyección nodal y transverso \mathbf{M}_{ij} y $\mathbf{M}_{j_x[i_y]}$ respectivamente, definidos como

$$\mathbf{M}_{ij} \equiv \frac{1}{h_x h_y} \int_{y_{k-1/2}}^{y_{k+1/2}} p_{j,k}(y) \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} p_{i,k}(x) dx dy, \quad (6.5)$$

$$\mathbf{M}_{j_x} \equiv \frac{1}{h_y} \int_{y_{k-1/2}}^{y_{k+1/2}} p_{j,k}(y) dy, \quad \mathbf{M}_{i_y} \equiv \frac{1}{h_x} \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} p_{i,k}(x) dx \quad (6.6)$$

$$i, j = 0, \dots, \lambda$$

donde los polinomios de Legendre $p_{\lambda,k}$ están definidos según la Ec. 2.16.

Aplicando estos operadores al flujo angular se definen los momentos nodales y transversales del flujo angular de la siguiente manera:

$$\psi_{ij} \equiv \mathbf{M}_{ij}\psi(x, y) \quad (6.7)$$

$$\psi_{j_x}(x) \equiv \mathbf{M}_{j_x}\psi(x, y), \quad \psi_{i_y}(y) \equiv \mathbf{M}_{i_y}\psi(x, y). \quad (6.8)$$

Teniendo en cuenta la ortogonalidad de los $p_{i,k}$ en cada C_k se puede definir $\tilde{\psi}$ como el desarrollo truncado a orden Λ de ψ de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} \tilde{\psi}(x, y) &\equiv \sum_{i,j=0}^{\Lambda} (2i+1)(2j+1)\psi_{ij}p_{ik}(x)p_{jk}(y) = \\ &= \sum_{j=0}^{\Lambda} (2j+1)\psi_{j_x}(x)p_{j,k}(y) = \sum_{i=0}^{\Lambda} (2i+1)\psi_{i_y}(y)p_{i,k}(x). \end{aligned} \quad (6.9)$$

Aplicando el operador \mathbf{M}_{ij} a la Ec. 6.4 se obtienen las llamadas *ecuaciones de balance nodales*, las que para μ y η mayores que cero resultan:

$$\frac{\mu}{h_x} \left\{ \psi_{j_x}^*(x_{k+1/2}) - (-1)^i \psi_{j_x}^*(x_{k-1/2}) - 2 \sum_{m=0}^{[\frac{i-1}{2}]} (2i - 4m - 1) \psi_{i-2m-1,j} \right\} + \quad (6.10)$$

$$\frac{\eta}{h_y} \left\{ \psi_{i_y}^*(y_{k+1/2}) - (-1)^j \psi_{i_y}^*(y_{k-1/2}) - 2 \sum_{m=0}^{\lfloor \frac{i-1}{2} \rfloor} (2j - 4m - 1) \psi_{i, j-2m-1} \right\} + \sigma_k \psi_{ij} = S_{ij}.$$

$i, j = 1, \dots, \Lambda$

Si bien en la deducción de la ecuación anterior aparecen los momentos transversales definidos en (6.8), $\psi_{jx[iy]}$, en su lugar se han utilizado los momentos $\psi_{jx[iy]}^*$. Esto se debe a que los momentos transversales del flujo en las superficies utilizados en las ecuaciones de balance en el método AHOT-N, provienen de las ecuaciones de interpolación que se definen a continuación, los que han sido definidos como $\psi_{jx[iy]}^*$, ya que no son iguales a $\mathbf{M}_{jx[iy]}\psi$.

La necesidad de usar más ecuaciones que las dadas por (6.10) es debido a que este sistema tiene $(\Lambda + 1)^2$ ecuaciones y $(\Lambda + 1)(\Lambda + 3)$ incógnitas, las que están dadas por los $(\Lambda + 1)^2$ momentos nodales y $2(\Lambda + 1)$ momentos transversales evaluados en las superficies salientes.

En el método AHOT-N, las ecuaciones faltantes se obtienen aplicando los operadores transversales a la ecuación de transporte y resolviendo las ecuaciones diferenciales unidimensionales resultantes en forma analítica. Aplicando el operador \mathbf{M}_{jx} a la Ec. 6.4 se tiene la siguiente ecuación diferencial para $\psi_{jx}(x)$

$$\mu \frac{d\psi_{jx}(x)}{dx} + \sigma \psi_{jx}(x) = S_{jx}(x) - \frac{\eta}{h_y} \left\{ \psi(x, y_{k+1/2}) - (-1)^j \psi(x, y_{k-1/2}) - 2 \sum_{m=0}^{\lfloor \frac{i-1}{2} \rfloor} (2j - 4m - 1) \psi_{(j-2m-1)x}(x) \right\}, \quad j = 0, \dots, \Lambda. \quad (6.11)$$

El mismo procedimiento pero con \mathbf{M}_{iy} genera una ecuación equivalente a la anterior en $\psi_{iy}(y)$. El flujo $\psi(x, y_{k\pm 1/2})$ puede ser expandido usando las relaciones (6.9) de forma tal que se obtiene un sistema de ecuaciones para $\psi_{jx}(x)$ que está relacionado a las soluciones del sistema correspondiente a $\psi_{iy}(y)$ evaluadas en $y_{k\pm 1/2}$, es decir,

$$\mu \frac{d\psi_{jx}(x)}{dx} + \sigma \psi_{jx}(x) = \sum_{i=0}^{\Lambda} (2i + 1) p_{i,k}(x) \left\{ S_{ij} - \frac{\eta}{h_y} [\psi_{iy}(y_{k+1/2}) - (-1)^j \psi_{iy}(y_{k-1/2})] \right\} + \frac{2\eta}{h_y} \sum_{m=0}^{\lfloor \frac{i-1}{2} \rfloor} (2j - 4m - 1) \psi_{(j-2m-1)x}(x), \quad j = 0, \dots, \Lambda. \quad (6.12)$$

Este sistema de ecuaciones podría ser resuelto directamente como está planteado en (6.12). Sin embargo, en el método AHOT-N los flujos que aparecen en la última sumatoria del segundo miembro de la ecuación anterior son proyectados sobre los polinomios en x , con lo que el sistema de ecuaciones queda desacoplado como se expresa en la siguiente ecuación:

$$\mu \frac{d\psi_{jx}^*(x)}{dx} + \sigma \psi_{jx}^*(x) = \sum_{i=0}^{\Lambda} (2i + 1) p_{i,k}(x) \left\{ S_{ij} - \frac{\eta}{h_y} [\psi_{iy}^*(y_{k+1/2}) - (-1)^j \psi_{iy}^*(y_{k-1/2})] \right\} + \frac{2\eta}{h_y} \sum_{m=0}^{\lfloor \frac{i-1}{2} \rfloor} (2j - 4m - 1) \psi_{i(j-2m-1)}, \quad j = 0, \dots, \Lambda. \quad (6.13)$$

Se han definido entonces los momentos $\psi_{jx}^*(x)$ y $\psi_{iy}^*(y)$ como las soluciones del sistema (6.13) y el correspondiente a la variable y respectivamente. Estas soluciones son las utilizadas en las ecuaciones de balance (6.10).

Es importante notar que $\psi_{jx}^*(x)$ no es un polinomio de orden Λ en la variable x , es decir

$$\psi_{jx}^*(x) \neq \sum_{i=0}^{\Lambda} (2i+1)\psi_{ij}p_{i,k}(x)$$

La solución exacta de (6.13) es

$$\begin{aligned} \psi_{jx}^*(x) = & \psi_{jx}^*(x_{k-1/2})e^{-\frac{\sigma}{\mu}(x-x')} + \frac{1}{\mu} \left\{ S_{ij} - \frac{\eta}{h_y} \left[\psi_{iy}^*(y_{k+1/2}) - (-1)^j \psi_{iy}^*(y_{k-1/2}) - \right. \right. \\ & \left. \left. 2 \sum_{m=0}^{\lfloor \frac{j-1}{2} \rfloor} (2j-4m-1)\psi_{i,j-2m-1} \right] \int_{x_{k-1/2}}^x e^{-\frac{\sigma}{\mu}(x-x')} p_{i,k}(x') dx' \right\}, \quad j = 0, \dots, \Lambda. \end{aligned} \quad (6.14)$$

En el método AHOT-N se necesitan solamente los valores de ψ^* en las superficies salientes de cada celda, $x_{k+1/2}$ e $y_{k+1/2}$ para μ y η mayores que cero ya que los valores en las superficies entrantes son condición de contorno en cada celda. Evaluando entonces la Ec. (6.14) en $x_{k+1/2}$, en su segundo miembro aparecen los coeficientes de orden i de la expansión de $e^{\sigma x/\mu}$ en polinomios de Legendre, $\xi_{(i,k)}$, definidos en la Sección 2.3. En (Azmy, 1988a) la expresión anterior junto con las ecuaciones de balance son trabajadas algebraicamente hasta obtener las siguientes expresiones en *diferencias pesadas* para ψ_{jx}^*

$$\begin{aligned} & \left(\frac{1+\alpha_x}{2} \right) \psi_{jx}^*(x_{k+1/2}) + \left(\frac{1-\alpha_x}{2} \right) \psi_{jx}^*(x_{k-1/2}) = \\ & \sum_{i=0, \text{ par}}^{\Lambda} (2i+1)\psi_{ij} + \sum_{i=1, \text{ imp}}^{\Lambda} (2i+1)\alpha_x \psi_{ij}, \quad j = 0, \dots, \Lambda \end{aligned} \quad (6.15)$$

y las correspondientes a ψ_{iy}^* . Los *coeficientes de peso* α están definidos de igual forma que en el caso unidimensional, es decir, por las ecuaciones (2.25) y (2.26).

De esta forma queda definido el esquema numérico, donde los momentos de los flujos salientes y de los nodales se obtienen a partir de las ecuaciones (6.10) y (6.15).

6.3 Implementación

Si bien la resolución simultánea de las ecuaciones (6.10) y (6.15) permiten resolver el problema de transporte para cada dirección discreta del método SN, en este trabajo se las ha implementado de forma tal que su resolución sea aplicable a un sistema de barrido estándar. Es decir, en una dada dirección y en una dada celda, se obtienen en primer lugar los momentos nodales del flujo angular utilizando la fuente calculada en la iteración anterior y los momentos transversales entrantes provenientes de condiciones de contorno o de las celdas vecinas, y luego, con los momentos nodales así calculados se evalúan los momentos transversales salientes.

Sustituyendo en la Ec. (6.10) los momentos de los flujos salientes obtenidos de (6.15), las ecuaciones de balance permiten calcular los momentos de ψ en función de los momentos entrantes y los de la fuente. Estos últimos se conocen de la iteración anterior, mientras que los entrantes provienen de las condiciones de contorno o de la condición de continuidad en las interfases de las celdas.

De esta forma, una vez obtenidos los momentos de ψ para una celda determinada, los momentos salientes de dicha celda se calculan usando las ecuaciones en diferencias pesadas (6.15).

Si bien no se ha hecho un análisis detallado sobre la conveniencia desde el punto de vista del costo computacional de los distintos tipos de implementación de las ecuaciones mencionadas, el esquema propuesto en este trabajo tiene la ventaja de que puede implementarse fácilmente en programas ya existentes en Diferencias Finitas.

Es importante remarcar que el esquema multidimensional también se ve afectado por las oscilaciones numéricas originadas por los coeficientes de peso espaciales α_x y α_y , por lo que en este caso el método también ha sido implementado utilizando los coeficientes de peso asintóticos introducidos en la Sección 4.2.

6.4 Ejemplos numéricos

El método AHOT-N ha sido implementado en un código de transporte estacionario, bidimensional, monoenergético para resolver problemas de fuente externa fija.

A efectos de validar las soluciones con él obtenidas ha sido resuelto un problema ejemplo consistente en un cuadrado de 10 cm de lado con reflexión total en las caras inferior e izquierda y vacío en la superior y derecha. El sistema se divide en cuatro cuadrados iguales. En el inferior izquierdo hay una fuente unitaria uniformemente distribuida, $\sigma = 1$ y $c = 0.5$; en los otros tres no hay fuente, $\sigma = 2$ y $c = 0.05$ (Azmy, 1988a).

El problema ha sido resuelto utilizando una cuadratura simétrica S4 y todos los momentos del flujo escalar han sido convergidos con una precisión puntual de 10^{-5} . Los flujos escalares medios obtenidos se muestran en la Tabla 6.1, donde la región *I* identifica al cuadrante inferior izquierdo, las *II* y *III* al inferior derecho y superior izquierdo respectivamente y la *IV* al superior derecho. Puede verse que a medida que el problema es resuelto con mayor orden se obtienen resultados precisos con bajas discretizaciones del sistema.

Tabla 6.1: Flujos escalares medios correspondientes a varios órdenes y discretizaciones del sistema.

Λ	discr.	<i>I</i>	<i>II = III</i>	<i>IV</i>	Λ	<i>I</i>	<i>II = III</i>	<i>IV</i>
0	2×2	1.638	4.645×10^{-2}	2.311×10^{-3}	1	1.660	4.370×10^{-2}	2.319×10^{-3}
	4×4	1.649	4.506×10^{-2}	2.309×10^{-3}		1.670	4.238×10^{-2}	2.047×10^{-3}
	8×8	1.662	4.341×10^{-2}	2.155×10^{-3}		1.675	4.177×10^{-2}	2.001×10^{-3}
	16×16	1.671	4.228×10^{-2}	2.053×10^{-3}		1.676	4.162×10^{-2}	1.992×10^{-3}
	32×32	1.675	4.180×10^{-2}	2.010×10^{-3}		1.676	4.159×10^{-2}	1.992×10^{-3}
	64×64	1.676	4.165×10^{-2}	1.996×10^{-3}				
	128×128	1.676	4.160×10^{-2}	1.993×10^{-3}				
2	2×2	1.671	4.225×10^{-2}	1.922×10^{-3}	3	1.675	4.178×10^{-2}	2.064×10^{-3}
	4×4	1.675	4.173×10^{-2}	1.995×10^{-3}		1.676	4.162×10^{-2}	1.991×10^{-3}
	8×8	1.676	4.161×10^{-2}	1.991×10^{-3}		1.676	4.159×10^{-2}	1.992×10^{-3}
	16×16	1.676	4.159×10^{-2}	1.992×10^{-3}				
4	2×2	1.676	4.165×10^{-2}	1.955×10^{-3}	5	1.676	4.161×10^{-2}	2.007×10^{-3}
	4×4	1.676	4.160×10^{-2}	1.991×10^{-3}		1.676	4.159×10^{-2}	1.992×10^{-3}
6	2×2	1.676	4.160×10^{-2}	1.983×10^{-3}	7	1.676	4.159×10^{-2}	1.994×10^{-3}
8	2×2	1.676	4.159×10^{-2}	1.991×10^{-3}	9	1.676	4.159×10^{-2}	1.992×10^{-3}

El segundo problema ejemplo tiene la misma geometría y distribución de fuente que el problema anterior, pero con sección eficaz total y radio de scattering igual a 10^{-4} cm^{-1} y 0 en la región I, y 10^{-6} cm^{-1} y 0.9 en las otras. Este problema ha sido resuelto con la misma cuadratura $S4$ que el anterior y los flujos han sido convergidos con una precisión de 10^{-4} . Debido a la baja sección eficaz total, las soluciones se ven contaminadas debido a los errores de redondeo en los coeficientes de peso espacial. En la Fig. 6.1, izq., se muestran los errores relativos de los flujos escalares medios en cada región obtenidos con la expresión completa de los coeficientes de peso espacial y con sus valores asintóticos. En la misma figura, der., se muestran los errores relativos de los flujos escalares medios reconstruidos en los vértices superiores derechos de 1.25 cm de lado en cada región. Los valores de referencia corresponden a los flujos obtenidos usando los coeficientes asintóticos con $\Lambda = 10$. Además de las oscilaciones de los flujos debidas a los errores en los coeficientes espaciales, éstas pueden producir la divergencia del proceso iterativo. Los puntos correspondientes a estos casos no se muestran en la Fig. 6.1. Este problema muestra la importancia de los coeficientes de peso asintóticos en sistemas con regiones vacías.

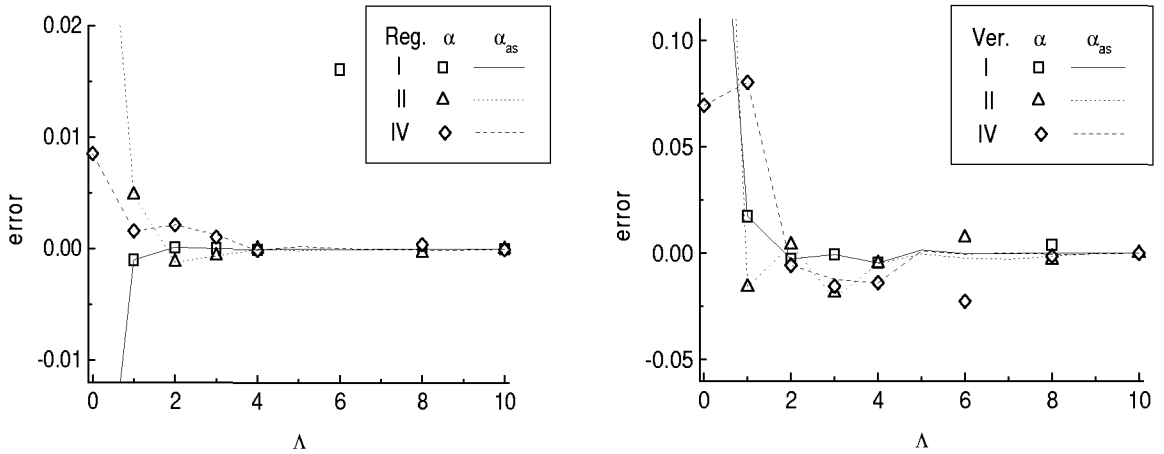


Figura 6.1: Error relativo de los flujos escalares medios en cada región (izq.) y en cada vértice (der.), obtenidos con los coeficientes de peso, α , y sus expresiones asintóticas, α_{as} .

6.5 Conclusiones

En este Capítulo se ha introducido el método AHOT-N en su forma multidimensional. A diferencia de los métodos nodales de orden fijo, las ecuaciones que describen al método AHOT-N se expresan en función del orden Λ . De esta forma, la precisión de las soluciones puede modificarse no solamente densificando la discretización espacial como en los métodos clásicos o nodales de bajo orden sino también aumentando el orden.

Este esquema numérico se basa en expandir la fuente en polinomios de Legendre hasta orden Λ , para luego obtener ecuaciones de balance para cada momento de la expansión del flujo angular y relaciones de interpolación entre éstos y los momentos transversales en las interfases. Las ecuaciones de balance se obtienen a través de la proyección L^2 de la ecuación de transporte sobre la base local de polinomios en cada celda, mientras que las ecuaciones de interpolación surgen de integrar en forma exacta las ecuaciones unidimensionales que se obtienen a través del

procedimiento de integración transversal.

La resolución exacta de las ecuaciones unidimensionales contribuye a la elevada precisión de este método numérico, aunque el procedimiento de integración transversal empleado para obtener dichas ecuaciones limita su aplicación a problemas en geometría cartesiana rectangular.

Las ecuaciones de interpolación han sido llevadas a un esquema en diferencias pesadas que depende de un solo coeficiente (de peso espacial) por celda y por dirección, surgiendo de esta forma expresiones sencillas de implementar. Por otra parte, el esquema numérico puede ser programado siguiendo el procedimiento usual de barrido de fuente, lo que simplifica su implementación en códigos de cálculo ya existentes.

Resolviendo un problema ejemplo se ha mostrado la evolución de los flujos escalares medios en función de la discretización espacial y del orden de aproximación. En éste puede verse que aún discretizando espacialmente el sistema según las discontinuidades materiales (o de fuente) se pueden obtener soluciones muy precisas elevando el orden de la aproximación.

Es importante notar que los coeficientes de peso espacial se contaminan de errores de redondeo cuando λ es grande o el camino óptico es chico, por lo que deben utilizarse (como en el caso unidimensional) los coeficientes asintóticos deducidos previamente en este trabajo.

Capítulo 7

Precisión de las soluciones 2D

Si bien los métodos nodales, y en particular el método AHOT-N, han mostrado ser muy precisos aún cuando la discretización espacial del sistema contiene mallas de gran tamaño, esta precisión ha sido generalmente evaluada sobre los flujos medios (Azmy, 1988a). Esto se fundamenta, en parte, en que los valores medios son usualmente las cantidades de mayor interés en los cálculos neutrónicos. Sin embargo, el método AHOT-N permite la reconstrucción *puntual* de los flujos en el sistema, propiedad que lo hace de gran interés como esquema para generar soluciones de referencia para nuevos problemas benchmark (Azmy, 1997). Este tipo de reconstrucción motiva el análisis de la precisión de los valores puntuales de los flujos que se obtienen a través de dicho método.

Como se mostró en el Capítulo anterior, las soluciones de la ecuación de transporte generadas por el método AHOT-N son los momentos nodales ψ_{ij} en cada celda C_k y los transversales $\psi_{jx}^*(x)$, $\psi_{iy}^*(y)$, $i, j = 0, \dots, \Lambda$, en las interfases. Los primeros permiten la reconstrucción inmediata de $\tilde{\psi}(x, y)$ con $(x, y) \in C_k$, mientras que los transversales generan reconstrucciones de los flujos en las superficies en polinomios de orden Λ en la dirección espacial transversal. Dichas reconstrucciones producen diferentes valores del flujo en las superficies de cada celda y en particular, $\tilde{\psi}$ no es continua en las interfases. Si bien estas discrepancias tienden a disminuir a medida que se aumenta el orden de la aproximación, es importante analizar las propiedades de las soluciones generadas por el método AHOT-N a efectos de extraer de las mismas la mayor precisión posible.

En este capítulo se proponen diversas reconstrucciones del flujo angular empleando las soluciones generadas por el método AHOT-N. Se analizan sus propiedades de convergencia, precisión y simplicidad de su implementación.

Si bien dichos estudios están motivados en los resultados obtenidos en una dimensión donde se obtuvo una reconstrucción ψ superconvergente respecto a la usualmente utilizada $\tilde{\psi}$, en dos o más dimensiones la situación es muy diferente. Cabe notar en estos casos la dificultad de encontrar un equivalente a ψ en 1D, es decir, una función que sea solución del método numérico multidimensional.

Las reconstrucciones espaciales del flujo angular presentadas en este Capítulo si bien no muestran superconvergencia respecto a $\tilde{\psi}$ son más precisas que ésta. En general la falta de superconvergencia puede atribuirse a que, en cada dirección angular los flujos entrantes a una celda son, a diferencia de 1D, polinomios de orden Λ .

En la siguiente Sección se analiza una reconstrucción basada en las soluciones obtenidas de las

ecuaciones diferenciales unidimensionales logradas a través de la integración transversal. Dicha reconstrucción, llamada $\psi_{ab}(x, y)$ conserva los momentos $\tilde{\psi}$, y si bien es discontinua en las interfaces entre nodos, es más precisa que $\tilde{\psi}$.

En la Sección 7.2 se propone una reconstrucción basada en la solución exacta de la ecuación de transporte sobre las características, utilizando como condición de contorno los flujos salientes del nodo vecino reconstruido a través de los momentos transversales. Dado que los flujos en las superficies así obtenidos son más precisos que los evaluados a través de $\tilde{\psi}$, y que la solución exacta sobre las características es de mayor precisión que la solución generada por AHOT-N, los flujos así reconstruidos son también más precisos que $\tilde{\psi}$.

7.1 Reconstrucción basada en soluciones exactas 1D

Asumamos que existe una función $\psi_n(x, y)$, solución del problema de ordenadas discretas resuelto por el método AHOT-N,

$$\vec{\Omega}_n \cdot \nabla \psi_n(x, y) + \sigma \psi_n(x, y) = \sigma_s \tilde{\phi}(x, y) + \tilde{q}_n(x, y), \quad n = 1, \dots, M(N), \quad (7.1)$$

con condiciones de contorno $\psi_{jx}(x_{k-1/2}) = 0$, $\psi_{iy}(y_{k-1/2}) = 0$, $i, j = 0, \dots, \Lambda$ cuando μ y η son mayores que cero y los correspondientes momentos nulos en las caras entrantes a C_k en las demás direcciones, donde $\tilde{\psi}(x, y)$ es el desarrollo en polinomios de Legendre hasta orden Λ de $\psi(x, y)$ (el índice n ha sido nuevamente eliminado de las funciones que representan el flujo angular) y $\tilde{\phi}$ es el flujo escalar asociado a $\tilde{\psi}$. Entonces, para cada dirección angular discreta puede escribirse

$$\psi(x, y) = \tilde{\psi} + \left(\sum_{i=\Lambda+1}^{\infty} \sum_{j=0}^{\Lambda} + \sum_{i=0}^{\Lambda} \sum_{j=\Lambda+1}^{\infty} + \sum_{i,j=\Lambda+1}^{\infty} \right) ((2i+1)(2j+1)\psi_{ij} p_{i,k}(x) p_{j,k}(y)), \quad (x, y) \in C_k. \quad (7.2)$$

Dado que el método AHOT-N provee como solución los momentos ψ_{ij} con $i, j \leq \Lambda$, surge que la reconstrucción $\tilde{\psi}$ del flujo angular es una representación de ψ limitada hasta orden Λ en cada variable espacial. Como se esquematiza en la Fig. 7.1, donde ψ está representado por los momentos de orden $i, j = 0, \dots, \infty$, los momentos de $\tilde{\psi}$ reproducen a los de ψ solamente en el cuadrado superior izquierdo.

En esta Sección se propone una reconstrucción del flujo angular, utilizando las soluciones obtenidas con el método AHOT-N, que contiene más información sobre ψ que $\tilde{\psi}$. En particular, dicha reconstrucción reproduce los momentos de ψ excepto los correspondientes al cuadrado inferior derecho de la Fig. 7.1. La misma muestra ser más precisa que $\tilde{\psi}$ y ambas convergen con el mismo orden asintótico.

Sean $\psi_a(x, y)$ y $\psi_b(x, y)$ las siguientes funciones:

$$\psi_a(x, y) \equiv \sum_{j=0}^{\Lambda} (2j+1) p_{j,k}(y) \psi_{jx}^*(x) \quad (7.3)$$

$$\psi_b(x, y) \equiv \sum_{i=0}^{\Lambda} (2i+1) p_{i,k}(x) \psi_{iy}^*(y), \quad (7.4)$$

donde ψ_{jx}^* es la solución exacta de (6.13) dada por la Ec. (6.14) y ψ_{iy}^* es la solución de la correspondiente ecuación en y .

Notando que los momentos transversales pueden ser expandidos de la siguiente manera:

$$\psi_{jx}^*(x) = \sum_{i=0}^{\infty} (2i+1) \psi_{ijx}^* p_{i,k}(x), \quad \psi_{iy}^*(y) = \sum_{j=0}^{\infty} (2j+1) \psi_{iyj}^* p_{j,k}(y),$$

se tiene que

$$\psi_a(x, y) = \sum_{j=0}^{\Lambda} \sum_{i=0}^{\infty} (2i+1)(2j+1) \psi_{aij} p_{i,k}(x) p_{j,k}(y) \quad (7.5)$$

$$\psi_b(x, y) = \sum_{i=0}^{\Lambda} \sum_{j=0}^{\infty} (2i+1)(2j+1) \psi_{bij} p_{i,k}(x) p_{j,k}(y), \quad (7.6)$$

donde se han definido

$$\psi_{aij} \equiv \psi_{ijx}^*, \quad \psi_{bij} \equiv \psi_{iyj}^*. \quad (7.7)$$

En el teorema 7.1.1 se demuestra que los momentos de las expansiones en polinomios de Legendre de ψ_a y ψ_b coinciden entre sí y con los de $\tilde{\psi}$ para órdenes menores o iguales que Λ , por lo que puede escribirse:

$$\psi_a(x, y) = \tilde{\psi}(x, y) + \sum_{j=0}^{\Lambda} \sum_{i=\Lambda+1}^{\infty} (2i+1)(2j+1) \psi_{a,ij} p_{i,k}(x) p_{j,k}(y) \quad (7.8)$$

$$\psi_b(x, y) = \tilde{\psi}(x, y) + \sum_{j=\Lambda+1}^{\infty} \sum_{i=0}^{\Lambda} (2i+1)(2j+1) \psi_{b,ij} p_{i,k}(x) p_{j,k}(y). \quad (7.9)$$

De esta forma, se propone como reconstrucción del flujo angular a la función $\psi_{ab}(x, y)$ definida como

$$\psi_{ab}(x, y) \equiv \psi_a(x, y) + \psi_b(x, y) - \tilde{\psi}(x, y). \quad (7.10)$$

Teniendo en cuenta esta definición y las Ecs. (7.7) a (7.9) surge que la supuesta solución ψ puede expresarse de la siguiente manera:

$$\psi(x, y) = \psi_{ab}(x, y) + \sum_{i=\Lambda+1}^{\infty} \sum_{j=\Lambda+1}^{\infty} (2i+1)(2j+1) \psi_{ij} p_{i,k}(x) p_{j,k}(y), \quad (x, y) \in C_k, \quad (7.11)$$

donde $\psi_{ab}(x, y)$ puede calcularse utilizando la solución numérica a través de las Ecs. (7.3), (7.4) y (7.10). Comparando la ecuación anterior con la (7.2) se observa que ψ_{ab} contiene más información de ψ que $\tilde{\psi}$. En el esquema mostrado en la Fig. 7.1, ψ_{ab} es una representación de ψ a la que le faltan los momentos correspondientes al cuadrado inferior derecho, mientras que $\tilde{\psi}$ contiene, como se mencionó anteriormente, solamente los momentos de ψ del cuadrado superior izquierdo de dicha figura. De esta forma, es de esperar que ψ_{ab} sea una reconstrucción de la solución del método numérico más precisa que $\tilde{\psi}$.

Es conveniente remarcar algunos conceptos referentes a las reconstrucciones propuestas hasta el momento para la solución ψ del problema de ordenadas discretas.

- $\tilde{\psi}$ es la proyección de ψ (y de ψ_{ab}) sobre la base local de polinomios en cada una de las direcciones espaciales truncada a orden Λ . Es una representación continua de una función generalmente discontinua (o al menos de derivada discontinua) sobre las características, lo que hace que en general se necesiten polinomios de alto orden para que $\tilde{\psi}$ sea una buena representación de ψ . Por otra parte, $\tilde{\psi}$ es discontinua en todas las interfases.

- ψ_a representa exactamente la dependencia respecto a la variable x de ψ en cada celda si el flujo entrante por la interfase correspondiente es exacto. Sin embargo su dependencia en y es una representación polinómica truncada a orden Λ . La expansión de $\psi_a(x, y)$ en polinomios $p_{i,k}(x)p_{j,k}(y)$ truncada a orden Λ coincide con $\tilde{\psi}(x, y)$ en cada C_k . Si bien ψ_a es una función continua de x en todo el dominio espacial, es discontinua respecto a y en todas las interfaces horizontales.
- ψ_b tiene las mismas propiedades que ψ_a pero intercambiando las variables x e y .
- De lo expuesto se deduce que si bien ψ_{ab} contiene más información de ψ que $\tilde{\psi}$, también es discontinua en todas las interfaces.

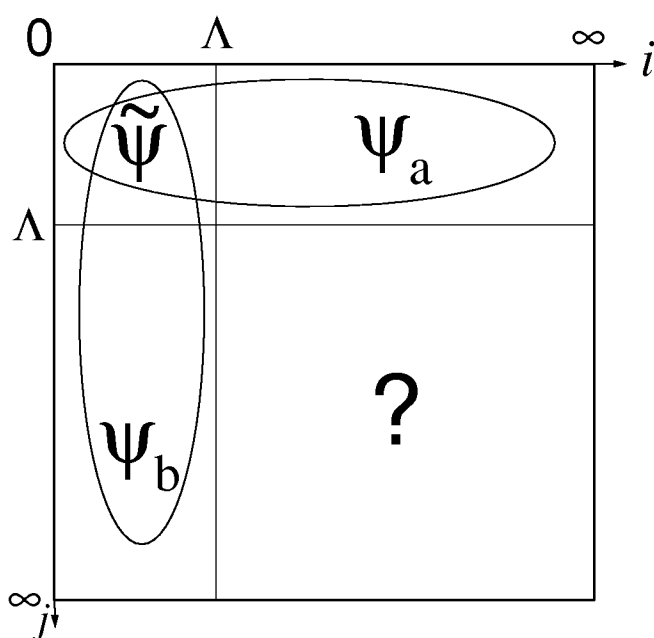


Figura 7.1: Interpretación de $\tilde{\psi}$ y ψ_{ab} .

Para la evaluación de ψ_{ab} se utiliza la Ec. (7.10), donde ψ_a y ψ_b están dados por las Ecs. (7.3) y (7.4). Los momentos $\psi_{jx}^*(x)$ se evalúan con la Ec. (6.14), los $\psi_{iy}^*(y)$ con la correspondiente en y , y las integrales que aparecen en estas ecuaciones pueden ser calculadas con las fórmulas recursivas introducidas en la Sección 4.1.

En este trabajo se ha analizado la precisión de ψ_{ab} y la de $\tilde{\psi}$ resolviendo un problema ejemplo como se detalla en la siguiente Sección.

Teorema 7.1.1 Sean $\psi_a(x, y)$ y $\psi_b(x, y)$ definidas según (7.3) y (7.4), entonces:

$$\mathbf{M}_{ij}\psi_a = \mathbf{M}_{ij}\psi_b = \mathbf{M}_{ij}\psi. \quad (7.12)$$

Dem: Consideremos en primer lugar las ecuaciones de balance escritas de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} & \frac{\mu}{h_x} \left\{ \psi_{jx}^*(x_{k+1/2}) - (-1)^i \psi_{jx}^*(x_{k-1/2}) - \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \psi_{jx}(x) \frac{dp_{i,k}(x)}{dx} dx \right\} + \\ & \frac{\eta}{h_y} \left\{ \psi_{iy}^*(y_{k+1/2}) - (-1)^j \psi_{iy}^*(y_{k-1/2}) - \int_{y_{k-1/2}}^{y_{k+1/2}} \psi_{iy}(y) \frac{dp_{j,k}(y)}{dy} dy \right\} + \sigma \psi_{ij} = S_{ij}, \end{aligned} \quad (7.13)$$

donde ψ^* está dada por la Ec. (6.14), $\psi_{ij} = \mathbf{M}_{ij}\psi$, $\psi_{jx}(x) = \mathbf{M}_{jx}\psi$ y $\psi_{iy}(y) = \mathbf{M}_{iy}\psi$.

Aplicando el operador

$$\sum_{j=0}^{\Lambda} (2j+1) p_{j,k}(y) \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} (2i+1) p_{i,k}(x) dx$$

a la ecuación de transporte (6.3), y notando que

$$\int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \psi^*(x, y_{k+1/2}) p_{i,k}(x) dx = h_x \psi_{iy}^*(y_{k+1/2})$$

se obtiene la siguiente ecuación para ψ_a :

$$\begin{aligned} & \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \left\{ \mu \frac{\partial \psi_a}{\partial x} + \sigma \psi_a \right\} (2i+1) p_{i,k}(x) dx = \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} (2i+1) \tilde{S}(x, y) p_{i,k}(x) dx - \\ & -(2i+1) h_x \frac{\eta}{h_y} \sum_{j=0}^{\Lambda} (2j+1) p_{j,k}(y) \left\{ \psi_{iy}^*(y_{k+1/2}) - (-1)^j \psi_{iy}^*(y_{k-1/2}) - \int_{y_{k-1/2}}^{y_{k+1/2}} \psi_{iy}(y') \frac{dp_{j,k}}{dy'} dy' \right\}. \end{aligned} \quad (7.14)$$

Utilizando la ecuación de balance (7.13), la ecuación anterior puede escribirse de la siguiente manera:

$$\begin{aligned} & \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \left\{ \mu \frac{\partial \psi_a}{\partial x} + \sigma \psi_a \right\} (2i+1) p_{i,k}(x) dx = (2i+1) h_x \sum_{j=0}^{\Lambda} (2j+1) p_{j,k}(y) \\ & \left\{ \sigma \psi_{ij} + \frac{\mu}{h_x} \left[\psi_{jx}^*(x_{k+1/2}) - (-1)^i \psi_{jx}^*(x_{k-1/2}) - \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \psi_{jx}(x) \frac{dp_{i,k}}{dx} dx \right] \right\} = \\ & = (2i+1) \sum_{j=0}^{\Lambda} (2j+1) p_{j,k}(y) \left[h_x \sigma \psi_{ij} - \mu \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \psi_{jx}(x) \frac{dp_{i,k}}{dx} dx \right] + \\ & + \mu (2i+1) \left[\psi_a(x_{k+1/2}, y) - (-1)^i \psi_a(x_{k-1/2}, y) \right]. \end{aligned} \quad (7.15)$$

Dado que

$$\psi_{ij} = \frac{1}{h_x} \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \psi_{jx}(x) p_{i,k}(x) dx,$$

y teniendo en cuenta que

$$\sum_{j=0}^{\Lambda} (2j+1) \psi_{jx}(x) p_{j,k}(y) = \tilde{\psi}(x, y),$$

se tiene que la Ec. (7.15) puede escribirse como

$$\begin{aligned} & \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \left\{ \mu \frac{\partial \psi_a}{\partial x} + \sigma \psi_a \right\} p_{i,k}(x) dx = \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \left[\sigma p_{i,k}(x) - \mu \frac{dp_{i,k}(x)}{dx} \right] \tilde{\psi}(x, y) dx + \\ & \mu \left[\psi_a(x_{k+1/2}, y) - (-1)^i \psi_a(x_{k-1/2}, y) \right]. \end{aligned} \quad (7.16)$$

Integrando por partes el primer término del primer miembro de la ecuación anterior se tiene que

$$\int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \left[-\mu \frac{dp_{\lambda,k}(x)}{dx} + \sigma p_{\lambda,k}(x) \right] \left[\psi_a(x, y) - \tilde{\psi}(x, y) \right] dx = 0, \quad \forall y \in C_k, \quad \lambda = 0, \dots, \Lambda. \quad (7.17)$$

La aplicación sucesiva de la ecuación anterior para distintos valores de λ a partir de $\lambda = 0$ muestra que $\psi_{aij} = \psi_{ij}$. La demostración para ψ_b es similar.

7.1.1 Ejemplos numéricos

En esta Sección se analizan los comportamientos de $\tilde{\psi}$ y ψ_{ab} resolviendo un problema ejemplo que posee solución exacta, para lo cual se utilizan las siguientes definiciones:

$$\tilde{\epsilon} \equiv \sqrt{\int_0^{L_y} \int_0^{L_x} (\tilde{\psi} - \psi^e)^2 dx dy} \quad (7.18)$$

$$\epsilon_{ab} \equiv \sqrt{\int_0^{L_y} \int_0^{L_x} (\psi_{ab} - \psi^e)^2 dx dy} \quad (7.19)$$

$$\tilde{\epsilon}_{ab} \equiv \sqrt{\int_0^{L_y} \int_0^{L_x} (\psi_{ab} - \tilde{\psi})^2 dx dy} \quad (7.20)$$

donde ψ^e es la solución exacta a la aproximación de ordenadas discretas del problema resuelto.

El problema ejemplo tratado consiste en un cuadrado homogéneo de 5 cm de lado rodeado de vacío, con una fuente externa uniformemente distribuida de intensidad igual a 1 n/cm³seg, sección eficaz total $\sigma = 1 \text{ cm}^{-1}$ y scattering nulo.

Dicho problema fue resuelto en una computadora personal utilizando una precisión aritmética de 32 bits. Se emplearon órdenes de desarrollo variando entre 1 y 4 y una discretización espacial uniforme del sistema con $h = L \times 2^{-n}$, $n = 1, \dots, 5$, donde $h \equiv h_x = h_y$. Se empleó una cuadratura simétrica S2 con $\mu = 0.3500210$, $\eta = 0.8688903$, $w = 0.25$. Los errores definidos en las Ecs. (7.18) a (7.20) fueron evaluados para la dirección $\mu = \eta > 0$. Las integrales se evaluaron numéricamente por Simpson utilizando 80×80 puntos de integración en cada celda, luego de haber verificado la convergencia de estas integrales con la discretización.

En la Fig. 7.2 se muestran los comportamientos obtenidos de $\tilde{\epsilon}$, ϵ_{ab} y $\tilde{\epsilon}_{ab}$. Puede verse que en general ψ_{ab} es más preciso que $\tilde{\psi}$, pero a medida que h tiende a cero los errores de ambas reconstrucciones no sólo convergen con el mismo orden sino que tienden a los mismos valores.

También se cumple en el problema analizado que $\tilde{\epsilon}_{ab}$ tiende a cero a medida que h disminuye, lo cual es razonable ya que debe verificarse que $\tilde{\epsilon}^2 \leq \epsilon_{ab}^2 + \tilde{\epsilon}_{ab}^2$.

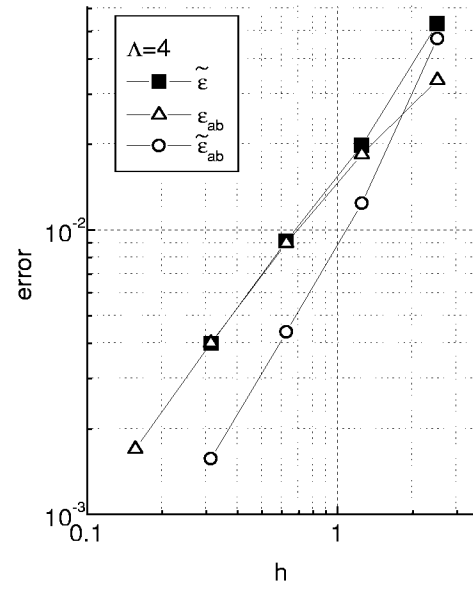
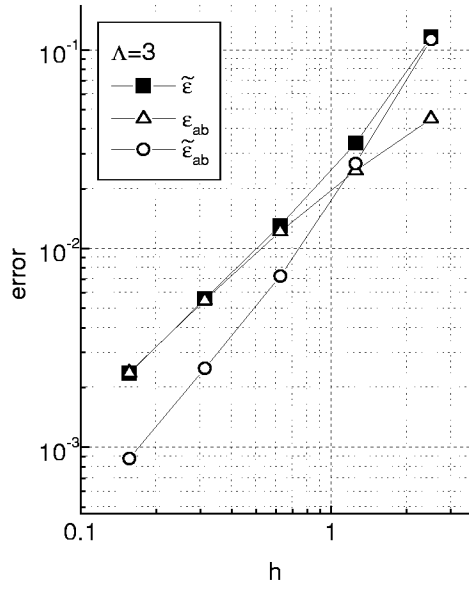
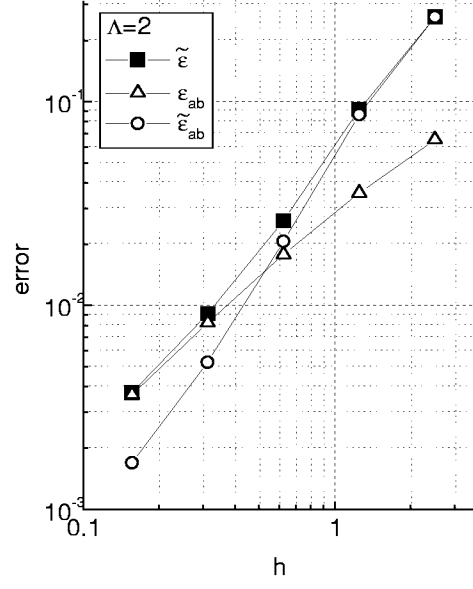
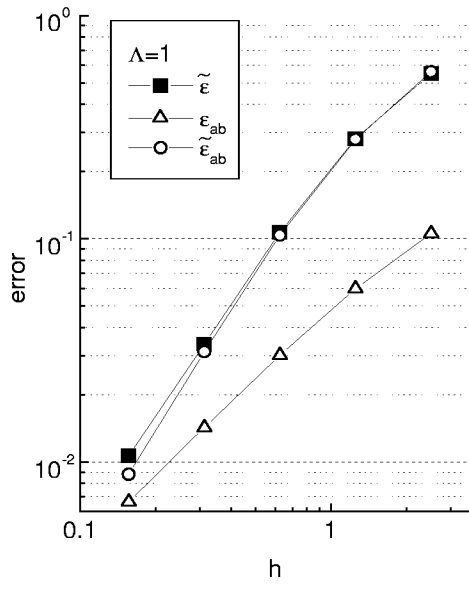


Figura 7.2: Errores de $\tilde{\psi}$ y $\tilde{\psi}_{ab}$.

7.1.2 Conclusiones

En esta Sección se ha propuesto una reconstrucción para el flujo angular utilizando las soluciones generadas por el método AHOT-N. Dicha reconstrucción está basada en el empleo de las soluciones analíticas que pueden obtenerse de las ecuaciones diferenciales unidimensionales que surgen a través de la integración transversal empleada en el esquema numérico.

Se ha demostrado que la reconstrucción propuesta, ψ_{ab} , tiene los mismos momentos que $\tilde{\psi}$ en la expansión polinómica hasta orden Λ , y de esta forma, asumiendo que existe una solución ψ al problema espacial de ordenadas discretas resuelto por AHOT-N, se deduce que ψ_{ab} contiene más información de ψ que $\tilde{\psi}$.

Es interesante notar que la reconstrucción ψ_{ab} tiene algunas similitudes con la función ψ utilizada en una dimensión. La más importante desde el punto de vista de nuestro análisis es que su componente ψ_a no sólo es una función continua en x sino que para todo x , $\psi_a(x, y)$ no es un desarrollo polinómico truncado a algún orden en la variable x . Lo mismo puede decirse de ψ_b en su dependencia con la variable y . Esta comparación puede hacer pensar que ψ_{ab} sea una reconstrucción superconvergente como lo era ψ en $1D$. Sin embargo esta conclusión no es correcta ya que $\psi_a(x, y)$ es una expansión polinómica en la variable y truncada a orden Λ (como también lo es ψ_b en x), por lo que no puede esperarse que ψ_{ab} converja más rápido que $\tilde{\psi}$ a la solución exacta.

A través de un ejemplo numérico que posee solución exacta se ha mostrado que ψ_{ab} es más precisa que $\tilde{\psi}$, pero a medida que se densifica la discretización ambas reconstrucciones tienden a los mismos valores.

Si bien es posible concluir que ψ_{ab} puede ser utilizada como una reconstrucción de la solución numérica del método AHOT-N que en general produce flujos más precisos que $\tilde{\psi}$, en la siguiente Sección se propone otra reconstrucción del flujo angular basada en soluciones exactas sobre las características. Esta nueva reconstrucción permite, entre otras cosas, deducir que los momentos de ψ que no son representados por ψ_{ab} no contribuyen en general de manera importante a los errores de ésta.

7.2 Reconstrucción basada en soluciones sobre las características

En esta Sección se propone una nueva reconstrucción de las soluciones del método AHOT-N. La misma se basa en resolver en forma exacta la ecuación de transporte en cada celda a lo largo de las características, con condiciones de contorno dadas por ψ_a y ψ_b en la correspondiente interfase entrante de acuerdo a la dirección discreta $\vec{\Omega}_n$, y utilizando como fuente la obtenida del cálculo numérico. Esta reconstrucción también es más precisa que $\tilde{\psi}$ y ambas convergen con el mismo orden.

Los flujos ψ_a y ψ_b en las interfases de cada celda y la fuente \tilde{Q} , formada por la fuente externa más el término de scattering en el interior de cada celda, son las condiciones de contorno y el término de fuente empleados por el método numérico para resolver la ecuación de transporte en cada celda. Dichas cantidades se van actualizando durante el proceso iterativo; las condiciones de contorno a través de los flujos salientes calculados y la fuente por medio del flujo escalar (en el caso de

scattering isotrópico). Estando un cálculo convergido, y por lo tanto ψ_a , ψ_b y \tilde{Q} , los flujos angulares obtenidos en cada celda son una aproximación a los flujos angulares "exactos" correspondientes estas condiciones de contorno y fuente. De esta forma, si ψ^c es la solución exacta mencionada, ésta debería ser una aproximación a ψ más precisa que $\tilde{\psi}$.

ψ^c es la solución de la ecuación

$$\frac{d\psi^c(s)}{ds} + \sigma\psi^c(s) = \tilde{Q}(s), \quad s = \frac{x - x_{k-1/2}}{\mu} = \frac{y - y_{k-1/2}}{\eta}, \quad x, y \in C_k, \quad (7.21)$$

con condiciones de contorno $\psi^c(0) = \psi_0^c$, con ψ_0^c igual a $\psi_a(x_{k-1/2}, y)$ o $\psi_b(x, y_{k-1/2})$ según la característica s intersecte la recta $x = x_{k-1/2}$ o $y = y_{k-1/2}$ (si $\mu, \eta > 0$). La fuente \tilde{Q} de la Ec. (7.21) contiene la fuente externa más el término de scattering convergido, por lo que dicha ecuación representa un problema de fuente externa fija y por lo tanto no está acoplado en las direcciones angulares.

La solución a la Ec. (7.21) está dada por

$$\psi^c(x, y) = \begin{cases} \psi_a(x_{k-1/2}, y)e^{\sigma(x-x_{k-1/2})/\mu} + \frac{1}{\mu} \int_{x_{k-1/2}}^x \tilde{Q}(x', y)e^{-\sigma(x-x')/\mu} dx', & \text{si } x < \frac{\eta}{\mu}y \\ \psi_b(x, y_{k-1/2})e^{\sigma(y-y_{k-1/2})/\eta} + \frac{1}{\eta} \int_{y_{k-1/2}}^y \tilde{Q}(x, y')e^{-\sigma(y-y')/\eta} dy', & \text{si } x > \frac{\eta}{\mu}y \end{cases} \quad (7.22)$$

para $\mu, \eta > 0$.

La ecuación anterior debe ser evaluada una vez convergido el proceso iterativo que genera las soluciones del método AHOT-N. Si \tilde{Q} no es almacenada en forma explícita por el programa, para su reconstrucción deben haberse guardado todos los momentos del flujo escalar. Para reconstruir ψ_a y ψ_b debe disponerse al finalizar el cálculo de todos los momentos transversales en las interfases. Esto agrega solamente un requerimiento de almacenamiento ya que dichos momentos son calculados en forma explícita por el método numérico.

El argumento empleado para asumir que ψ^c es una solución más precisa que $\tilde{\psi}$ se basó solamente en la forma de obtener la solución de la ecuación de transporte con el método AHOT-N. Sin embargo, podría pensarse que si se utilizan condiciones de contorno más precisas que ψ_a y ψ_b , la solución a la Ec. (7.21) podría ser de mayor precisión aún.

Existen dos posibles reconstrucciones del flujo angular entrante en cada interfase, las que para una dirección con μ y η mayores que cero son $\tilde{\psi}(x_{k-1/2}, y)$, $\tilde{\psi}(x, y_{k-1/2})$ y $\psi_a(x_{k-1/2}, y)$, $\psi_b(x, y_{k-1/2})$. Los momentos transversales de ψ_a y ψ_b son los utilizados como condición de contorno por el método numérico para resolver las ecuaciones unidimensionales en cada celda, y las celdas vecinas se acoplan con continuidad de dichos momentos transversales. Por otra parte, $\tilde{\psi}$ es discontinua en todas las interfases. Es decir que en principio parecerían ser ψ_a y ψ_b las mejores candidatas a condiciones de contorno de la Ec. (7.21). De todas formas, en la Sección 7.2.1 se muestra con un problema ejemplo que ψ_a (o ψ_b) son más precisas que $\tilde{\psi}$ en las interfases de cada celda.

Es importante notar que si bien $\psi^c(x, y)$ es fácil de calcular para todo (x, y) , ya que una vez expandida \tilde{Q} la integral resultante de la Ec. (7.22) puede calcularse en forma recursiva como se mostró en la Sección 4.1, cualquier aplicación que se quiera hacer con ψ^c requerirá en general de su evaluación en varios puntos, lo cual puede ser computacionalmente costoso. Para simplificar estos cálculos se propone a continuación una aproximación a ψ^c , llamada $\hat{\psi}$.

Habiendo obtenido una solución con el método AHOT-N de orden Λ , consideremos una celda C_k cuya fuente convergida es $\tilde{Q}(\Lambda)$ y las condiciones de contorno están dadas por $\psi_a(x_{k-1/2}, y, \Lambda)$ y

$\psi_b(x, y_{k-1/2}, \Lambda)$. Se ha explicitado la dependencia en Λ de las funciones anteriores para remarcar que sus desarrollos en polinomios de Legendre tienen Λ componentes en cada dirección espacial.

Sean $\hat{\psi}_a(x_{k-1/2}, y, \Lambda + l)$ y $\hat{\psi}_b(x, y_{k-1/2}, \Lambda + l)$ las extensiones de $\psi_a(x_{k-1/2}, y, \Lambda)$ y $\psi_b(x, y_{k-1/2}, \Lambda)$ sobre las respectivas bases de polinomios en x e y de orden $\Lambda + l$ con momentos de orden mayor que Λ iguales a cero, y $\hat{Q}(x, y, \Lambda + l)$ la extensión de $\tilde{Q}(x, y, \Lambda)$ sobre $\{p_{k,i}(x)p_{k,j}(y), i, j = 0, \dots, \Lambda + l\}$ con momentos nulos cuando i o j son mayores que Λ .

Si se resuelve con el método AHOT-N de orden $\Lambda + l$ el problema de fuente externa fija dada por \hat{Q} y condiciones de contorno $\hat{\psi}_a$ y $\hat{\psi}_b$, se obtendrá una solución $\tilde{\psi}(x, y, \Lambda + l)$ a la que llamaremos $\tilde{\psi}(x, y)$.

Teniendo en cuenta que fijada la fuente y las condiciones de contorno en todo el dominio, $\tilde{\psi}$ converge a la solución exacta ψ^c en cada celda a medida que se aumenta el orden de la aproximación, puede concluirse que $\hat{\psi}$ tenderá a ψ^c a medida que se incrementa l .

El procedimiento para obtener $\hat{\psi}$, por ser un problema de fuente externa fija, requiere solamente un barrido adicional del sistema para todas las direcciones angulares. En este barrido, los momentos transversales entrantes a cada celda deben tomarse iguales a los momentos transversales salientes de las celdas vecinas correspondientes obtenidos a orden Λ , a diferencia del barrido habitual donde se los toma igual a los salientes recién evaluados.

Puede notarse que tanto ψ^c como $\hat{\psi}$ son sencillas de calcular, pero la última, por ser un polinomio, facilita su uso posterior como reconstrucción puntual del flujo angular.

En la Sección 7.2.2 se analiza a través de un problema ejemplo la convergencia de $\hat{\psi}$ a ψ^c en función de la cantidad de órdenes adicionales l y de ésta a una solución de referencia.

7.2.1 Análisis numérico de las condiciones de contorno.

En la Sección anterior se discutieron conceptos para justificar el uso de ψ_a y ψ_b en vez de $\tilde{\psi}$ como condiciones de contorno para la Ec. (7.21). El más importante es que al ser los momentos de ψ_a y ψ_b utilizados por el método numérico para acoplar celdas vecinas son continuos en las interfaces $x = Cte$ e $y = Cte$ respectivamente, mientras que $\tilde{\psi}$ es discontinuo en estas rectas. Por otra parte, debido a que estas funciones son la solución exacta de las ecuaciones diferenciales unidimensionales obtenidas por medio de la integración transversal, se presume que sean más precisas que $\tilde{\psi}$. Este hecho se verifica a continuación a través de un problema ejemplo.

Sean los errores $\tilde{\chi}$ y χ_{ab} definidos de la siguiente manera:

$$\tilde{\chi} \equiv \max_k \left\{ \sqrt{\int_{y_{k-1/2}}^{y_{k+1/2}} [\tilde{\psi}(x_{k-1/2}, y) - \psi^e((x_{k-1/2}, y))]^2 dy}, \sqrt{\int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} [\tilde{\psi}(x, y_{k-1/2}) - \psi^e((x, y_{k-1/2}))]^2 dx} \right\}$$

$$\chi_{ab} \equiv \max_k \left\{ \sqrt{\int_{y_{k-1/2}}^{y_{k+1/2}} [\psi_a(x_{k-1/2}, y) - \psi^e((x_{k-1/2}, y))]^2 dy}, \sqrt{\int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} [\psi_b(x, y_{k-1/2}) - \psi^e((x, y_{k-1/2}))]^2 dx} \right\}$$

donde ψ^e es la solución exacta. $\tilde{\chi}$ es una medida del error de $\tilde{\psi}$ y χ_{ab} de ψ_a y ψ_b en las interfaces entrantes (para μ y η mayores que cero en este caso).

Los resultados obtenidos para el problema descrito en la Sección 7.1.1 se muestran en la Fig. 7.3, donde puede apreciarse que ψ_a y ψ_b son más precisas que $\tilde{\psi}$ en las interfaces.

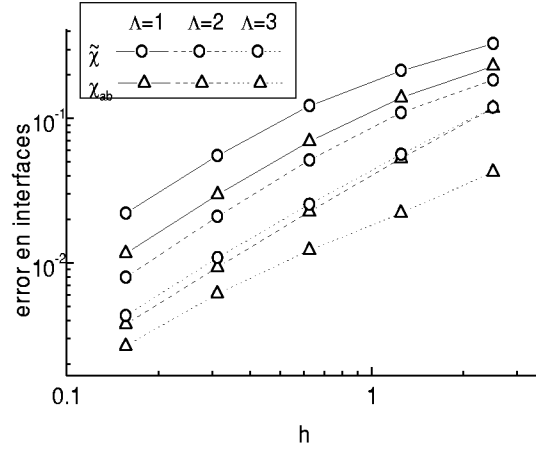


Figura 7.3: Errores de $\tilde{\psi}$ y ψ_{ab} en las interfases.

7.2.2 Ejemplos numéricos

En esta Sección se analiza la precisión de ψ^c y su aproximación $\hat{\psi}$ comparativamente con $\tilde{\psi}$.

En primer lugar se resuelve el problema propuesto en la Sección 7.1.1. Los errores analizados en este caso son ϵ^c , definido en la Ec. (7.18),

$$\epsilon^c \equiv \sqrt{\int_0^{L_y} \int_0^{L_x} (\psi^c - \psi^e)^2 dx dy} \quad (7.23)$$

y

$$\hat{\epsilon}(\Lambda + l) \equiv \sqrt{\int_0^{L_y} \int_0^{L_x} (\hat{\psi}(\Lambda + l) - \psi^e)^2 dx dy}. \quad (7.24)$$

Las integrales involucradas fueron evaluadas numéricamente aplicando la regla de Simpson con 80×80 puntos de integración.

En la Figura 7.4 se muestran los errores obtenidos para órdenes 1, 2 y 4 en función del tamaño de celda. Puede verse que ψ^c es más preciso que $\tilde{\psi}$, y a medida que h se achica ambas soluciones tienden al mismo valor. Además se observa que $\hat{\epsilon}$ tiende a ϵ^c a medida que l se incrementa. Es decir que la reconstrucción dada por ψ^c puede ser evaluada de una manera sencilla a través de $\hat{\psi}$.

Al estar este problema formado por un medio puramente absorbente, la fuente \tilde{Q} es igual a la fuente externa ($\tilde{Q} = Q_{00} = 1n/cm^3seg$). Teniendo en cuenta la expresión para ψ^c dada por la Ec. (7.22), puede verse que en este caso, ψ^c difiere de ψ^e solamente en el primer término del segundo miembro de esta ecuación. Entonces, en este problema, la contribución a ϵ^c está dada solamente por los errores en los flujos angulares entrantes a cada celda ya que las integrales de la Ec. (7.22) son exactamente las mismas para ψ^c y ψ^e .

A efectos de analizar el comportamiento de la reconstrucción propuesta en un caso más general, se ha resuelto el mismo problema con una relación de scattering igual a 0.5. Debido a que este problema no tiene solución exacta se ha tomado como solución de referencia la obtenida numéricamente utilizando $\Lambda = 7$. A los errores $\tilde{\epsilon}$ y $\hat{\epsilon}$ se los llama en este caso $\tilde{\epsilon}_r$ y $\hat{\epsilon}_r$ respectivamente, y se los evalúa reemplazando $\tilde{\psi}(7)$ en el lugar de ψ^e en las Ecs. (7.18) y (7.24).

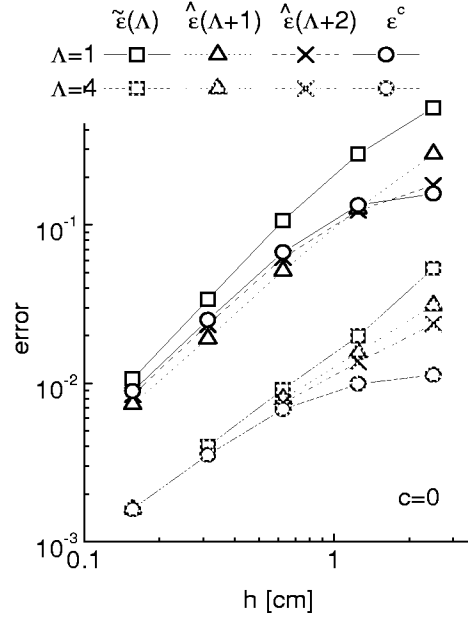


Figura 7.4: $\tilde{\epsilon}$, ϵ^c y $\hat{\epsilon}(\Lambda + l)$ para el problema sin scattering.

En la Fig. 7.5 se muestra el comportamiento de $\tilde{\epsilon}_r$ y $\hat{\epsilon}_r$, este último obtenido con $l = 2$. En este caso se observa un comportamiento de los errores similar al obtenido en el mismo problema sin fuente de scattering.

A efectos de analizar la convergencia de $\hat{\psi}$ a ψ^c en función de l se muestra también en la Fig. 7.5 el comportamiento de $\hat{\epsilon}$ obtenido para $\Lambda = 1$ y $l = 6$. Puede verse que éste no presenta diferencias apreciables con $\hat{\epsilon}$ correspondiente a $\Lambda = 1$, $l = 2$. Notando que en este problema resuelto sin scattering $\hat{\epsilon}(\Lambda + 2)$ prácticamente coincide con ϵ^c cuando $\Lambda = 1$, Fig. 7.4, puede concluirse que con $\Lambda = 1$, $l = 2$ es una buena aproximación para estimar ψ^c a través de $\hat{\psi}$.

7.2.3 Conclusiones

En esta Sección se ha propuesto una reconstrucción a posteriori del flujo angular utilizando las soluciones generadas por el método AHOT-N. Está basada en la solución exacta de la ecuación de transporte para cada dirección discreta del esquema SN, donde la fuente y las condiciones de contorno a cada celda están dadas por los valores convergidos de las mismas luego del cálculo numérico. Dicha solución, ψ^c , existe ya que de esta forma el problema resuelto es un problema de fuente externa fija.

A efectos de simplificar el uso de esta reconstrucción se ha propuesto también una aproximación a la misma consistente en resolver con el esquema numérico el mismo problema de fuente fija utilizando órdenes más altos que el empleado para obtener la solución convergida. Es decir, una vez resuelto el problema con el método AHOT-N de orden Λ , se utilizan las fuentes y flujos en las interfases convergidos como datos externos fijos y se resuelve nuevamente el problema con orden $\Lambda + l$. La reconstrucción $\tilde{\psi}$ que surge de la solución a este problema, a la que se llama $\hat{\psi}$, es la aproximación a ψ^c .

Resolviendo dos ejemplos numéricos se ha ilustrado la mejor precisión de ψ^c respecto a $\tilde{\psi}$ y la

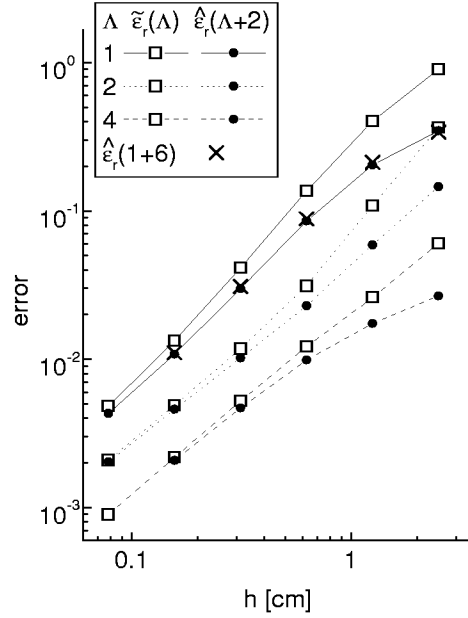


Figura 7.5: $\tilde{\epsilon}_7$ y $\hat{\epsilon}_7(\Lambda + l)$ para el problema con scattering.

convergencia de $\hat{\psi}$ a ψ^c a medida que se incrementa el orden.

7.3 Conclusiones

En este Capítulo se han propuesto dos reconstrucciones puntuales de los flujos generados como solución del método AHOT-N. Ambas son más precisas que $\tilde{\psi}$, convergen con el mismo orden asintótico y el esfuerzo computacional requerido para evaluarlas es despreciable comparado con el costo de obtención de la solución numérica.

La primera reconstrucción, ψ_{ab} , se define a través de las soluciones exactas de las ecuaciones unidimensionales obtenidas con el proceso de integración transversal de la ecuación de transporte. Esta función tiene los mismos momentos de orden i, j que $\tilde{\psi}$ cuando $i, j \leq \Lambda$, pero tiene más información que $\tilde{\psi}$ ya que no es un desarrollo polinómico truncado en x para $j \in [0, \Lambda]$ ni en y para $i \in [0, \Lambda]$. Esta propiedad hace que ψ_{ab} sea más precisa que $\tilde{\psi}$ para todo Λ y h , aunque esta mejora en la precisión resulta más notoria para grandes valores de h . Teniendo en cuenta que el método AHOT-N es ventajoso respecto a esquemas clásicos cuando el sistema contiene celdas de gran tamaño, puede concluirse que la función propuesta es más adecuada que $\tilde{\psi}$ para reconstruir puntualmente las soluciones de AHOT-N.

La segunda reconstrucción propuesta consiste en la solución exacta de la ecuación de transporte sobre las características en cada celda, con el término de fuente dado por la fuente convergida del proceso numérico y condiciones de contorno reconstruidas de los momentos transversales en las interfases. Si bien la obtención de esta reconstrucción, ψ^c , es sencilla, se ha propuesto una aproximación a la misma, $\hat{\psi}$, que tiene la ventaja sobre la anterior de ser un polinomio. Luego de convergido el proceso numérico con orden Λ , $\hat{\psi}$ se obtiene con un barrido adicional del sistema empleando orden $\Lambda + l$ y con las fuentes y flujos entrantes en cada celda dados por las soluciones

obtenidas a orden Λ . Nuevamente puede decirse que el costo adicional requerido para la evaluación de estas dos reconstrucciones no es importante. Debido a que el método numérico produce una solución aproximada al problema de transporte cuya solución exacta en cada celda es ψ^c , tanto ésta como su aproximación $\hat{\psi}$ son más precisas que $\tilde{\psi}$.

Capítulo 8

Estimación de errores *a posteriori* del método AHOT-N multidimensional

Como ya se ha discutido en este trabajo, la estimación *a posteriori* de errores es de utilidad a la hora de cuantificar los mismos luego de realizado determinado cálculo. Si bien un proceso de cálculo contiene en general diversos subprocesos, cada uno de los cuales tiene asociado un error, una componente importante que contribuye a los mismos está dada por el tratamiento de la variable espacial en los cálculos de transporte.

En este Capítulo se presenta un estimador de errores a posteriori para las soluciones del problema espacial de ordenadas discretas generadas por el método AHOT-N multidimensional. Por medio de la descomposición espacial de dicho estimador se proponen indicadores locales de error que permiten cuantificar la distribución espacial de los errores en el sistema.

El estimador unidimensional presentado en el Capítulo 5 ha sido obtenido en forma rigurosa como un estimador *jerárquico*, es decir, proveniente de la norma de la diferencia de dos soluciones con distinto orden de convergencia asintótica. En el caso multidimensional se han propuesto varias reconstrucciones para el flujo angular (utilizando la solución del esquema numérico) que, como se ha mostrado en el Capítulo anterior, tienen distinta precisión pero todas convergen con el mismo orden asintótico, por lo que no ha sido posible proponer un estimador *jerárquico* a través de comparaciones con los resultados logrados en una dimensión.

Sin embargo, se puede demostrar que utilizando la diferencia entre dos de las reconstrucciones propuestas, $\tilde{\psi} - \psi^c$, se obtiene el residuo de la ecuación de transporte, es decir, se recupera la ecuación resuelta por el método numérico sustituyendo ψ^c en el lugar de los flujos angulares que aparecen en la misma. De esta forma, basados en que el estimador unidimensional es un estimador por residuo, se propone como estimador *a posteriori* del error de ψ^c una expresión similar a la del caso en una dimensión.

A diferencia del caso unidimensional donde la reconstrucción del flujo angular utilizada en el estimador de error es continua en todo el dominio, la reconstrucción ψ^c es discontinua en las interfases, por lo que su residuo y el estimador propuesto también lo son. Esto hace que dichas discontinuidades tengan que ser tomadas en cuenta en la evaluación del estimador en el caso multidimensional.

A efectos de estimar la distribución espacial del error de la solución numérica se descompone el estimador en indicadores de error por celda (indicadores locales), donde las discontinuidades

asociadas a cada uno se consideran en las interfaces salientes según la dirección angular discreta. Por medio de ejemplos numéricos se muestra el comportamiento global del estimador en relación al error verdadero así como la capacidad del indicador local para identificar los máximos del error en el dominio espacial.

En la próxima Sección se introduce el estimador de error *a posteriori* para las soluciones de AHOT-N multidimensional, en la Sección 8.2 se detalla su implementación, los ejemplos numéricos se presentan en la Sección 8.3 y finalmente se discuten las conclusiones.

8.1 Estimador de error *a posteriori*

En esta Sección se propone un estimador de error *a posteriori* para el método AHOT-N multidimensional. El mismo surge inspirado en comparaciones con el estimador propuesto para el caso unidimensional (Capítulo 5).

A efectos de introducir el estimador para el caso multidimensional es conveniente remarcar algunos de los resultados logrados en una dimensión. Por una parte se tienen en este caso dos reconstrucciones del flujo angular utilizando las soluciones de AHOT-N 1D, ψ y $\tilde{\psi}$, donde la primera converge más rápido que la segunda a la solución exacta. A través de una ecuación para el error de ψ ha sido posible acotar superiormente la norma L^2 de dicho error con un estimador η , Ec.(5.12), el que contiene la diferencia $\tilde{\psi} - \psi$. Si bien esta propiedad hace que el estimador η pertenezca a la clase de estimadores *jerárquicos*, en la Sección 5.4.2 se muestra que también es un estimador basado en el *residuo* de la ecuación diferencial.

En el caso multidimensional se presentaron tres reconstrucciones del flujo angular: ψ_{ab} , ψ^c y $\tilde{\psi}$, Capítulo 7. Asumiendo que existe una solución ψ a las ecuaciones resueltas por AHOT-N 2(3)D y basados en algunos argumentos teóricos, las dos primeras reconstrucciones fueron propuestas como más precisas que $\tilde{\psi}$, hecho que se comprobó numéricamente resolviendo algunos problemas ejemplo. Sin embargo, a diferencia de lo que ocurre en una dimensión, todas las reconstrucciones multidimensionales propuestas convergen con el mismo orden asintótico.

Consideremos la reconstrucción ψ^c que ha sido propuesta como la solución exacta de la ecuación resuelta por el método AHOT-N estando fijada la fuente por la misma convergida luego de un cálculo numérico. Es decir, ψ^c es la solución exacta de

$$\vec{\underline{\Omega}} \cdot \nabla \underline{\psi}^c(x, y) + \sigma \underline{\psi}^c(x, y) = \sigma \underline{S} \tilde{\psi}(x, y) + \tilde{q}(x, y) \quad (x, y) \in C_k, \quad (8.1)$$

con condiciones de contorno dadas por los momentos transversales de los flujos en las interfaces entrantes en cada dirección angular, ψ_{jx} y ψ_{iy} , y donde la fuente $\sigma \underline{S} \tilde{\psi} + \tilde{q}$ es una *fente externa fija* (es la solución convergida de un cálculo con AHOT-N). En la ecuación anterior se ha empleado la matriz \underline{S} definida por (2.4) y, por similitud con la notación utilizada en una dimensión, se ha definido la matriz y el vector:

$$\vec{\underline{\Omega}} \equiv \begin{pmatrix} \vec{\Omega}_1 & 0 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \vec{\Omega}_2 & 0 & \cdots & \vdots \\ 0 & 0 & \ddots & 0 & \vdots \\ \vdots & \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \cdots & \cdots & 0 & \vec{\Omega}_M \end{pmatrix}, \quad \nabla \underline{\psi}^c(x, y) \equiv \begin{pmatrix} \nabla \psi_1^c(x, y) \\ \vdots \\ \nabla \psi_M^c(x, y) \end{pmatrix}. \quad (8.2)$$

Sumando y restando al segundo miembro de la Ec. (8.1) la fuente $\sigma \underline{S} \underline{\psi}^c + \underline{q}$, donde \underline{q} es la fuente externa exacta, se tiene la siguiente expresión para el residuo de $\underline{\psi}^c$:

$$\sigma \underline{S} (\underline{\tilde{\psi}} - \underline{\tilde{\psi}}^c) + \underline{\tilde{q}} - \underline{q} = \underline{\tilde{\Omega}} \cdot \nabla \underline{\psi}^c + \sigma \underline{\psi}^c - \sigma \underline{S} \underline{\psi}^c - \underline{q} \equiv \underline{\mathcal{R}} (\underline{\psi}^c). \quad (8.3)$$

En el caso unidimensional, el primer término de la expresión anterior (con ψ en lugar de ψ^c) da lugar a un estimador que acota superiormente al error de ψ medido en norma L^2 , Eq. (5.10). Dado que dicho término en el caso multidimensional también es un residuo, se propone en esta Sección una expresión similar al caso unidimensional como estimador del error de ψ^c medido en norma L^2 , es decir,

$$\|\epsilon\|_{L^2} = \|\underline{\psi}^c - \underline{\psi}^\epsilon\|_{L^2} = \sqrt{\int_0^L \int_0^L |\underline{\psi}^c - \underline{\psi}^\epsilon|^2 dx dy}. \quad (8.4)$$

Existe sin embargo una diferencia con el problema unidimensional, y es que en éste, la función ψ es continua en todo el dominio, mientras que en más de una dimensión ψ^c es discontinua en todas las interfases. Esto hace que, de alguna manera, dichas discontinuidades deban considerarse en la evaluación del estimador (Padra, 1993). A efectos de ilustrar esta afirmación, consideremos un vector \underline{v} regular en todo el dominio \mathcal{D} y una norma tal que $\|\underline{v}\|$ es siempre finita. Considerando a ψ^c como distribución se tiene que

$$\begin{aligned} \langle \underline{\mathcal{R}}(\underline{\psi}^c), \underline{v} \rangle &\equiv \int_{\mathcal{D}} (\underline{\tilde{\Omega}} \cdot \nabla \underline{\psi}^c + \sigma \underline{\psi}^c - \sigma \underline{S} \underline{\psi}^c - \underline{q}) \cdot \underline{v} dx dy = \\ &= \sum_k \int_{C_k} \underline{\mathcal{R}}(\underline{\psi}^c) \cdot \underline{v} dx dy + \sum_l \int_l \underline{\tilde{\Omega}} \cdot \underline{\tilde{n}} [[\underline{\psi}^c]] \cdot \underline{v} d\Gamma, \end{aligned} \quad (8.5)$$

donde el dominio \mathcal{D} ha sido discretizado en K celdas disjuntas C_k , l indica las interfases de las celdas, $\underline{\tilde{n}}$ es un vector cuyas M componentes son iguales al versor saliente en cada interfase l y $[[\underline{\psi}^c]]$ representa la discontinuidad de $\underline{\psi}^c$ en la interfase l .

La expresión anterior muestra que el residuo de ψ^c tiene una componente volumétrica y otra superficial que mide las discontinuidades de ψ^c en cada celda. En el caso unidimensional este último término no aparece debido a la continuidad de la solución utilizada en el residuo.

Una medida del residuo dado por la Ec. (8.5) se expresa en la Ec. (8.6), ecuación que define el estimador para el problema multidimensional, η ,

$$\eta \equiv \left\{ \sum_k \|\underline{\mathcal{R}}(\underline{\psi}^c)\|_{L^2(C_k)}^2 + \sum_l \|\underline{\tilde{\Omega}} \cdot \underline{\tilde{n}} [[\underline{\psi}^c]]\|_{L^2(l)}^2 \right\}^{1/2}. \quad (8.6)$$

La Ec. (8.6) representa un estimador global, es decir, una estimación del error integrada en todo el dominio. A efectos de cuantificar el error celda, la Ec. (8.6) puede descomponerse de la siguiente manera:

$$\eta^2 \equiv \sum_{k=1}^K \eta_k^2, \quad (8.7)$$

donde η_k representa al indicador local en la celda C_k y está dado por

$$\eta_k^2 = \|\underline{\mathcal{R}}(\underline{\psi}^c)\|_{L^2(k)}^2 + \sum_{l(k)} \|\underline{\tilde{\Omega}} \cdot \check{n} [[\underline{\psi}^c]]\|_{L^2(l)}^2. \quad (8.8)$$

8.2 Implementación del estimador

En el procedimiento mostrado en la Sección anterior se utiliza la reconstrucción ψ^c , ya que ésta es la solución exacta de la Ec. (8.1) cuando el término de fuente está fijado por los valores de $\tilde{\psi}$ convergidos. Si bien es posible evaluar el estimador de error a través de ψ^c , resulta más sencillo hacerlo utilizando $\hat{\psi}$ ya que ésta es un polinomio ($\hat{\psi}$ ha sido introducida en el Capítulo anterior como una aproximación a ψ^c).

El término de residuo del estimador de error puede ser evaluado utilizando cualquiera de las dos igualdades de la Ec. (8.3). Si ψ^c se aproxima por $\hat{\psi}$, ambas expresiones son relativamente sencillas de implementar, ya que el gradiente de $\hat{\psi}$ también es un polinomio y las integrales involucradas pueden resolverse en forma analítica debido a la ortogonalidad de los polinomios de Legendre en los intervalos de integración. En este trabajo dicho término ha sido implementado de forma similar a lo realizado en una dimensión, es decir, a través de integrales de $\tilde{\psi} - \hat{\psi}$.

El término de discontinuidades de la Ec. (8.6) no presenta complicaciones para su implementación y claramente el estimador global contiene las discontinuidades en todas las interfases del sistema. Sin embargo, para una dada celda y dirección angular, ψ^c es discontinuo en todas las interfases (excepto en las entrantes que tienen condición de contorno vacío), por lo que deben asignarse al indicador local las discontinuidades adecuadas (entrantes o salientes). Evidentemente, en cada dirección angular no pueden contribuir ambas al indicador local ya que éste debe cumplir la Ec. (8.7). En este trabajo se propone utilizar las discontinuidades en las interfases salientes de cada celda para la evaluación del indicador en la misma. Esta afirmación puede sostenerse considerando que ψ^c verifica en forma exacta las condiciones de contorno en las caras entrantes a cada celda, por lo que la discontinuidad de ψ^c en dichas interfases es debido al error de ψ^c en la celda vecina aguas arriba. Por otra parte, se han realizado pruebas numéricas que muestran mejor comportamiento del indicador respecto al error verdadero utilizando las discontinuidades salientes en lugar de las entrantes en la evaluación del indicador local.

Aplicando la desigualdad de Cauchy Schwarz discreta a los términos de discontinuidades de la Ec. (8.6) y teniendo en cuenta lo argumentado anteriormente, el indicador local η_k ha sido implementado con la siguiente expresión, donde por simplicidad se asume que $\tilde{q} = q$:

$$\begin{aligned} \eta_k^2 &= h_{xk}^2 h_{yk}^2 \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} \int_{y_{k-1/2}}^{y_{k+1/2}} [\sigma_{k\underline{\underline{k}}} \underline{\tilde{\psi}} - \underline{\hat{\psi}}(x', y')]^2 dx' dy' + \\ &+ h_{xk}^2 \sum_{m=1}^{M(N)} \left(\underline{\tilde{\Omega}}_m \cdot \check{j} \int_{x_{k-1/2}}^{x_{k+1/2}} [[\hat{\psi}_m(x, y^+)]] dx \right)^2 + \\ &+ h_{yk}^2 \sum_{m=1}^{M(N)} \left(\underline{\tilde{\Omega}}_m \cdot \check{i} \int_{y_{k-1/2}}^{y_{k+1/2}} [[\hat{\psi}_m(x^+, y)]] dy \right)^2. \end{aligned} \quad (8.9)$$

En esta expresión, los versores \check{i} y \check{j} son colineales a las direcciones x e y respectivamente; x^+ e y^+ representan la interfase saliente de acuerdo a la dirección $\underline{\tilde{\Omega}}_m$.

8.3 Ejemplos numéricos

En esta Sección se analiza numéricamente el comportamiento del estimador de error para el método AHOT-N multidimensional propuesto en este Capítulo. Se han resuelto varios problemas ejemplo, en particular los mostrados en el Capítulo anterior, y conceptualmente los resultados son similares. Es decir, tanto el estimador global como los indicadores locales siguen el comportamiento del error verdadero. De estos problemas se ha seleccionado para presentar a continuación el introducido en la Sección 6.4 por ser uno de los más completos, S4 heterogéneo (Azmy, 1988a). Los datos geométricos y materiales se muestran en la Fig. 8.3. Se ha utilizado una cuadratura simétrica S4 y una precisión de 10^{-5} para la convergencia puntual de todos los momentos del flujo escalar.

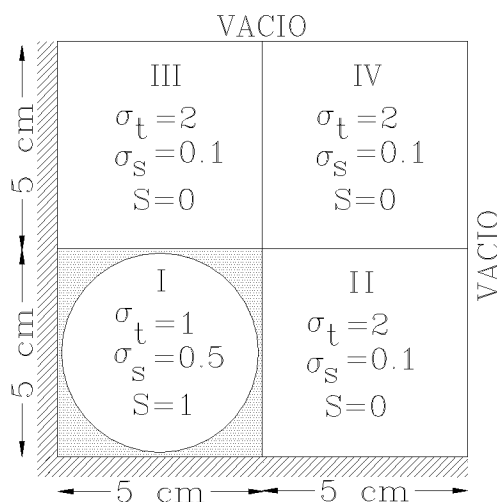


Figura 8.1: Geometría y composición del benchmark 2D.

El problema ha sido resuelto con varios órdenes de aproximación y discretización espacial uniforme de 2×2 hasta 16×16 celdas.

El error correspondiente a cada solución numérica ha sido evaluado con la Ec. (8.4), donde la solución "exacta", ψ^e , es reemplazada por la reconstrucción $\tilde{\psi}$ obtenida en cada discretización espacial con $\Lambda = 12$. Dicha solución de referencia se muestra en la Fig. 8.3 para una discretización del sistema de 8×8 celdas.

Dado que para el cálculo del estimador se utiliza la reconstrucción $\hat{\psi}$ para aproximar a ψ^e , el error de cada solución también es calculado para $\hat{\psi}$. En el problema ejemplo resuelto en esta Sección, $\hat{\psi}$ se obtiene utilizando $l = 2$, es decir, $\hat{\psi} = \tilde{\psi}(\Lambda + 2)$.

En la Fig. 8.3 se muestra la evolución del estimador global η , Ecs. (8.7) y (8.9), y del error de $\hat{\psi}$, $\|\epsilon\|_{L^2}$, en función del tamaño de celda h para órdenes de aproximación entre 1 y 5. Puede verse que en todos los casos el estimador es mayor que el error y que ambos parecen tener el mismo comportamiento asintótico, aunque este buen comportamiento es más notorio a medida que crece Λ .

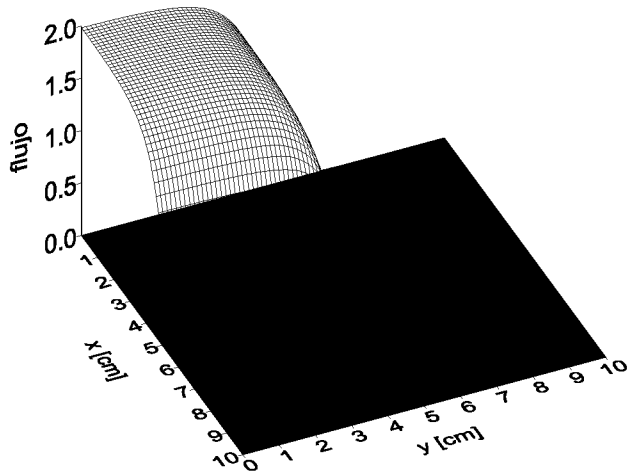


Figura 8.2: Solución de referencia.

Como ya se ha mencionado en este trabajo, una propiedad deseable de los indicadores locales de error es que éstos identifiquen las celdas del sistema donde la precisión de la aproximación numérica debe ser aumentada. A efectos de observar este tipo de comportamiento, en las Figs. 8.4 y 8.5 se muestra la distribución celda por celda del indicador y error locales, η_k y $\|\epsilon_k\|_{L^2}$, obtenidos con órdenes entre 1 y 7 para el sistema discretizado en 4×4 ($K = 16$) y 8×8 ($K = 64$) celdas respectivamente. En estas figuras se ha omitido el caso $\Lambda = 3$ para incluir en las mismas el caso $\Lambda = 7$. La numeración mostrada de las celdas es realizada de izquierda a derecha y de abajo hacia arriba, es decir, la celda 1 está en el vértice inferior izquierdo del sistema representado en la Fig. 8.3.

Puede observarse que los indicadores locales identifican de manera muy aceptable las celdas de mayor error en el sistema. Por otra parte, las anomalías que se aprecian, como por ejemplo las regiones donde el indicador es menor al error, disminuyen a medida que aumenta el orden Λ . Este efecto es más notorio en el caso correspondiente a $K = 16$, Fig. 8.4, donde hasta $\Lambda = 4$ el error es mayor que el indicador en algunas celdas, mientras que para Λ mayor que 5 el comportamiento del indicador respecto al error es realmente bueno. En el caso de 8×8 celdas estos problemas también aparecen, ver celdas 41 a 44 con $\Lambda = 2$ por ejemplo, pero la situación se normaliza para menores valores de Λ respecto al caso anterior. Estos efectos de "no tan buen comportamiento" del indicador pueden atribuirse en parte, de forma similar a la situación presentada en una dimensión, a los términos de orden superior que se han despreciado al obtener el estimador unidimensional. Es importante en tal sentido recordar que el estimador en varias dimensiones ha sido introducido como una extensión del caso en una dimensión.

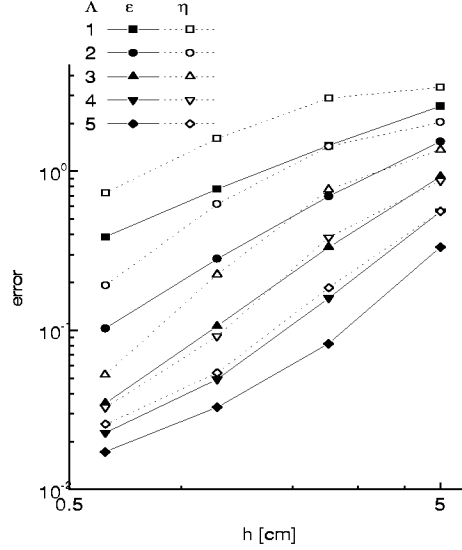


Figura 8.3: Estimador y error global para diversos órdenes Λ en función del tamaño de celda h .

8.4 Conclusiones

En este Capítulo se ha introducido un estimador de error *a posteriori* para el método AHOT-N multidimensional así como indicadores locales de error por celda. Ambos consisten básicamente en la diferencia entre las fuentes de scattering generadas por la reconstrucción ψ^c de la solución numérica de AHOT-N y la representación $\tilde{\psi}$ de las mismas, más un término de discontinuidades debido a que ψ^c no es continua en las interfaces.

Para la implementación del estimador e indicador se ha propuesto utilizar la aproximación $\hat{\psi}$ en lugar de ψ^c ya que la primera puede ser empleada más fácilmente que la segunda en las ecuaciones de estimación de errores dado que es una expresión polinómica.

A través de un ejemplo numérico consistente en un problema heterogéneo resuelto en S4 se ha mostrado que el estimador tiene un comportamiento de convergencia similar al error verdadero a medida que se densifica la discretización espacial del sistema para varios órdenes de aproximación Λ . Observando el error por celda y el indicador local puede concluirse que éste también sigue al error en función de la posición.

Esta última propiedad hace que el indicador propuesto sea apto para conducir un esquema adaptivo, como por ejemplo el presentado en (Zamonsky, 1998).

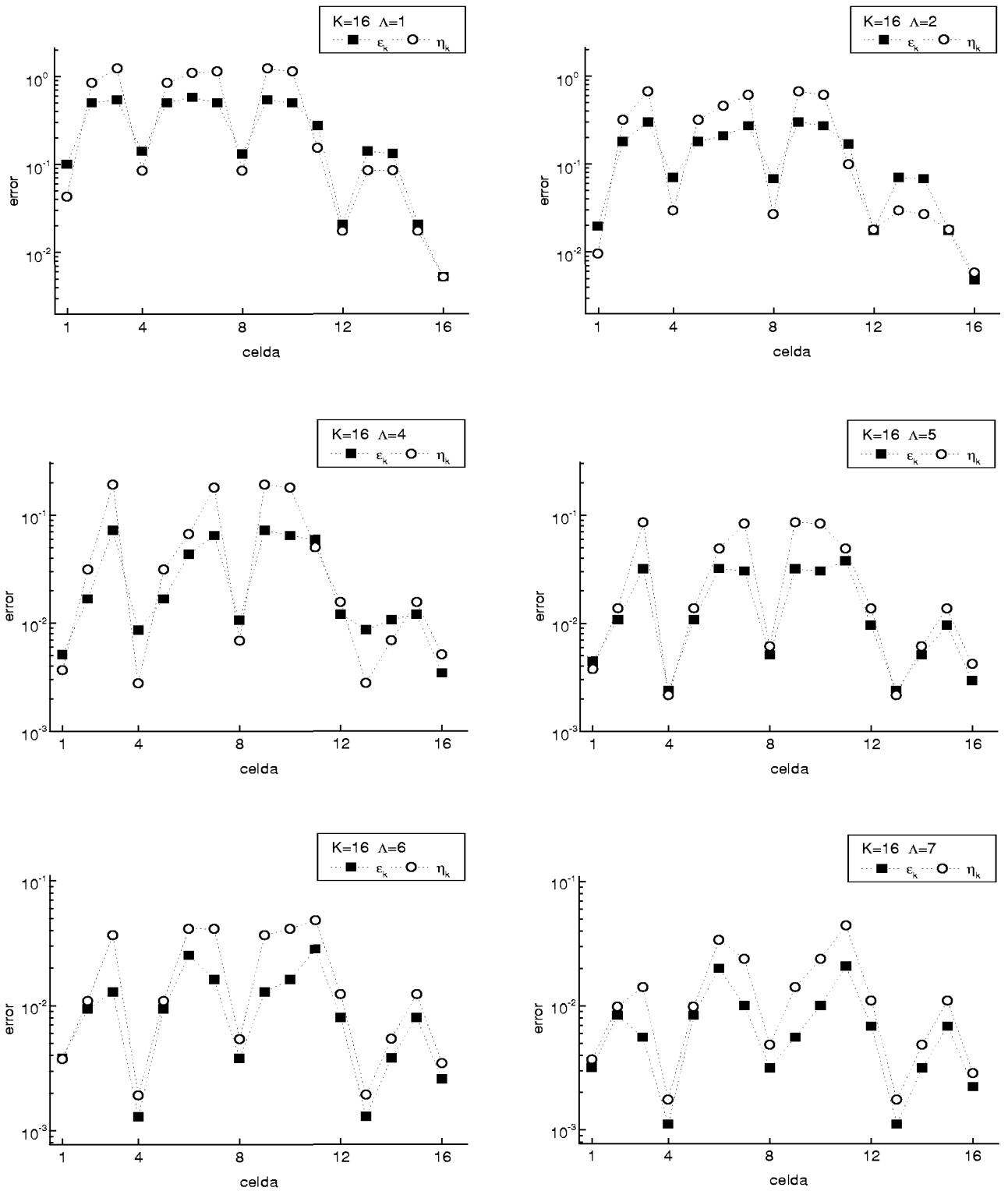


Figura 8.4: Comportamiento *celda por celda* del error local e indicador para el caso $K = 16$.

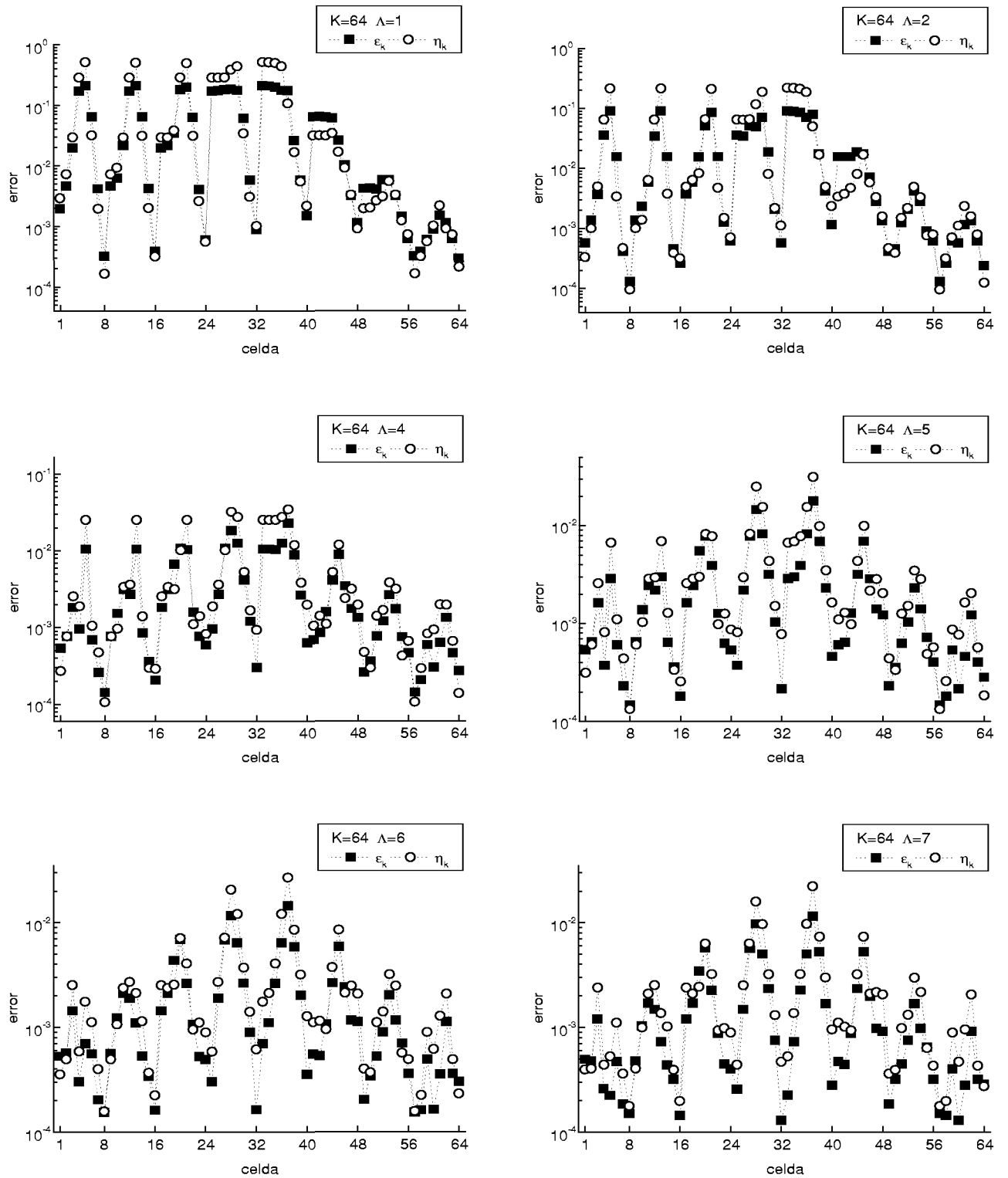


Figura 8.5: Comportamiento *celda por celda* del error local e indicador para el caso $K = 64$.

Apéndice A

Solución analítica de la ecuación de transporte unidimensional en la aproximación S_N .

Sea la ecuación de transporte en una dimensión con scattering isotrópico

$$\frac{d\underline{\psi}^e}{dx}(x) + \underline{A}(x)\underline{\psi}^e(x) = \underline{\mu}^{-1}\underline{q}(x), \quad (\text{A.1})$$

con condiciones de contorno $\underline{\psi}_i^e(a_i) = 0$, $a_i = 0$ si $\mu_i > 0$, y $a_i = L$ si $\mu_i < 0$, donde $\underline{A}(x) \equiv \underline{\mu}^{-1}\sigma(x) (\underline{I} - \underline{S}(x))$, siendo \underline{I} la matriz identidad de dimensión $N \times N$, con N igual a la cantidad de direcciones discretas de la cuadratura S_N . La matriz $\underline{\mu}$ es diagonal con componentes $\mu_{ii} = \mu_i$, $i = 1, \dots, N$ y \underline{S} tiene, en el caso de scattering isotrópico, todos los elementos de cada columna i iguales a w_i .

Definiendo

$$\underline{L} \equiv \frac{1}{\sigma} \underline{\mu} \frac{d}{dx} + \underline{I} - \underline{S}, \quad (\text{A.2})$$

la Ec. (A.1) se expresa de la siguiente manera:

$$\underline{L}\underline{\psi} = \frac{1}{\sigma} \underline{q} \quad (\text{A.3})$$

La solución general de la Ec. (A.3) puede expresarse en cada celda C_k , donde σ , c y \underline{q} son constantes, como la suma de una solución particular más la solución homogénea, es decir,

$$\underline{\psi}^e(x) = \frac{1}{\sigma(1-c)} \underline{q} + \left\{ \underline{\psi}_h^e(x) / \underline{L}\underline{\psi}_h^e(x) = \underline{0} \right\} \quad x \in C_k. \quad (\text{A.4})$$

La solución homogénea, $\underline{\psi}_h^e$, está en un espacio vectorial de dimensión N , por lo que es suficiente encontrar una base del mismo. Para ello utilizamos el método de separación de variables de forma similar al análisis espectral dado en (Case, 1967). Sea

$$\underline{\psi}_\nu^e = \underline{a}(\nu) e^{\sigma x/\nu}, \quad (\text{A.5})$$

solución de la ecuación homogénea, por lo que

$$\underline{L} \left[\underline{a}(\nu) e^{\sigma x/\nu} \right] = \underline{0}. \quad (\text{A.6})$$

Utilizando la definición de $\underline{\underline{L}}$ dada por la Ec. (A.3) se obtiene la siguiente ecuación de autovalores:

$$\underline{\underline{T}}\underline{\underline{a}}(\nu) = \frac{1}{\nu}\underline{\underline{a}}(\nu), \quad (\text{A.7})$$

donde se ha definido $\underline{\underline{T}} \equiv \underline{\underline{\mu}}^{-1} (\underline{\underline{S}} - \underline{\underline{I}})$. Para elegir un autovector $\underline{\underline{a}}(\nu)$ de $\underline{\underline{T}}$ tomamos la siguiente condición de normalización:

$$\sum_{i=1}^N w_i a_i(\nu) \equiv 1, \quad (\text{A.8})$$

con lo que la Ec. (A.7) conduce a

$$a_i(\nu) = \frac{c\nu}{\nu + \mu_i}. \quad (\text{A.9})$$

Para hallar los autovalores $1/\nu$ de $\underline{\underline{T}}$ correspondientes al autovector $\underline{\underline{a}}(\nu)$ puede multiplicarse la Ec. (A.9) por w_i y sumar sobre todas las direcciones, lo cual, teniendo en cuenta la condición de normalización (A.8) da

$$c \sum_{i=1}^N \frac{\nu}{\nu + \mu_i} w_i = 1. \quad (\text{A.10})$$

Multiplicando la Ec. (A.10) por $\prod_{i=1}^N (\nu + \mu_i)$ se obtiene un polinomio de grado N en ν cuyas raíces son los autovalores $\{\nu_i, i = 1, \dots, N\}$. De esta forma,

$$\underline{\underline{\psi}}_h^e(x) = \sum_{i=1}^N C_i \underline{\underline{a}}(\nu_i) e^{\sigma x / \nu_i}, \quad (\text{A.11})$$

y la solución general a la Ec. (A.1) queda

$$\underline{\underline{\psi}}^e(x) = \frac{1}{\sigma(1-c)} \underline{\underline{q}} + \sum_{i=1}^N C_i \underline{\underline{a}}(\nu_i) e^{\sigma x / \nu_i} \quad (\text{A.12})$$

Las constantes C_i se determinan con las condiciones de contorno para las celdas exteriores del sistema y con la continuidad de $\underline{\underline{\psi}}^e$ en las interfaces de las mallas.

Referencias

- Adams R.A., 1975. Sobolev Spaces. Academic Press, Pure and Applied Mathematics.
- Alcouffe R.E., Larsen E.W., Miller Jr. W.F., Wienke B.R., 1979. Computational Efficiency of Numerical Methods for the Multigroup Discrete-Ordinates Neutron Transport Equation. The slab geometry case. Nuclear Science and Engineering, 71, 111-127.
- Azmy Y.Y., 1988*a*. The Weighted Diamond-Difference Form of Nodal Transport Methods. Nuclear Science and Engineering, 98, 29-40.
- Azmy Y.Y., 1988*b*. Comparison of Three Approximations to the Linear-Linear Nodal Transport Method in Weighted Diamond-Difference Form. Nuclear Science and Engineering, 100, 190-200.
- Azmy Y.Y., 1993. General Order Nodal Transport Methods and Application to Parallel Computing. Transport Theory and Statistical Physics, 22, 359-390.
- Azmy Y.Y., 1997. A New Algorithm for Generating Highly Accurate Benchmark Solutions to Transport Test Problems. Proc. of the XI ENFIR Conference, Agosto 18-22.
- Azmy Y.Y., Zamonsky O.M., 1998. Thin-Cell Limit for the Spatial Weights of the Arbitrarily High Order Transport-Nodal Method. Trans. American Nuclear Society, 78, 130-132.
- Badruzzaman A., 1984. An Efficient Algorithm for Nodal Transport Solutions in Multidimensional Geometry. Nuclear Science and Engineering, 84, 281-290.
- Buscaglia G.C., Zamonsky O.M., Azmy Y.Y., 1999. A Posteriori Error Estimation for a Nodal Method in Neutron Transport Calculations, CD-ROM Proc. XX CILAMCE, San Pablo, Brasil, 3-5 de Noviembre de 1999.
- Carlson B.G., Bell G.I., "Solution of the Transport Equation by the SN Method", Proc. U. N. Intl. Conf. Peaceful Uses of Atomic Energy, 2nd Geneva P/2368, 1958.
- Carlson B.G., Lathrop K.D., "Transport Theory - The Method of Discrete Ordinates", Computing Methods in Reactor Physics, H. Greenspan, C. N. Kelber, and D. Okrent, Gordon and Breach, New York, 1968.
- Case K., Zweifel P., 1967. "Linear Transport Theory", Addison Wesley.
- De Barros, R., 1990. "A Spectral Nodal Method for the Solution of Discrete Ordinates Problems in One and Two Dimensional Cartesian Geometry", Tesis Doctoral, Universidad de Michigan.
- Gopinath D.V., Natarajan A., Sundararaman V., 1980. Improved Interpolation Schemes in Anisotropic Source-Flux Iteration Techniques. Nuclear Science and Engineering, 75, 181-184.
- Hennard J.P., 1981. A Unified Formalism for Spatial Discretization Schemes of Transport Equations in Slab Geometry. Annals of Nuclear Energy, 8, 677-681.

- Jatuff F.E., 1995. Error Estimators and Adaptivity for the Neutron Diffusion Problem. *Annals of Nuclear Energy*, 22 (12), 775-886.
- Jatuff F.E., Gho C. J., 1997*a*. On a posteriori Error Estimators: a One-Dimensional Nodal Diffusion Adaptivity Case. *Annals of Nuclear Energy*, 24 (7), 543-552.
- Jatuff F.E., Gho C.J., 1997*b*. Observación de errores y adaptación para el problema de difusión de neutrones en reactores nucleares. Tesis doctoral presentada en el Instituto Balseiro.
- Keller H.B., Nelson P., 1988. Closed Linear One-Cell Functional Spatial Approximations: Consistency implies Convergence and Stability. *Transport Theory and Statistical Physics*, 17, 191-208.
- Larsen E.W., Miller W. F, 1980. Convergence Rates of Spatial Difference Equations for the Discrete-Ordinates Neutron Transport Equations in Slab Geometry. *Nuclear Science and Engineering*, 73, 76-83.
- Larsen E.W., Nelson P., 1982. Finite-Difference Approximations and Superconvergence for the Discrete-Ordinate Equations in Slab Geometry. *SIAM Journal of Numerical Analysis*, 19 (2), 334-348.
- Lawrence R.D., Dorning J.J., 1979. New Coarse Mesh Diffusion and Transport Theory Methods for Efficient Numerical Calculation of Multidimensional Reactor Power Distributions. Proc. OECD/NEACRP Specialists' Mtg. Calculation of Three-Dimensional Rating Distributions in Operating Reactors, 383.
- Lawrence R.D., Dorning J.J., 1980. A Nodal Integral Transport Theory Method for Multidimensional Reactor Physics and Shielding Calculations. Proc. Topl. Mtg. Advances in Reactor Physics and Shielding, Sun Valley, Idaho, Septiembre 14-17, 1980, 840.
- Lee S.M., Vaidyanathan R., 1980. Comparison of the Order of Approximation in Several Spatial Difference Schemes for the Discrete-Ordinates Transport Equation in One-Dimensional Plane Geometry. *Nuclear Science and Engineering*, 76, 1-9.
- Nelson P., 1987. Closed Linear One-Cell Functional Spatial Approximations. *Annals of Nuclear Energy*, 14 (4), 177-191.
- Noor A., Babuška I., 1987. Quality assessment and Control of Finite Element Solutions. *Finite Elements in Analysis and Design*, 3, 1-26.
- Padra C., 1993. Estimaciones del Error para el Método de Elementos Finitos No Conformes (Capítulo 2). Tesis Doctoral, Departamento de Matemática, Facultad de Ciencias Exactas y Naturales, Universidad de Buenos Aires.
- Rhoades W.A., Simpson D.B. The TORT Three-Dimensional Discrete Ordinates Neutron/Photon Transport Code, DOORS3.2: One-, Two-, and Three-Dimensional Discrete Ordinates Neutron/Photon Transport Code System, Section 1, included in Radiation Safety Information Computational Center Code Package CCC-650/DOORS3.2, Oak Ridge National Laboratory, Aug. 1996.
- Stamml'er R.J., Abbate M.J., "Methods of Steady-State Reactor Physics in Nuclear Design", Cap. VI, Academic Press, 1983.
- Vaidyanathan R., 1979. A Finite Moments Algorithm for Particle Transport Problems. *Nuclear Science and Engineering*, 71, 46-54.
- Verfürth R., 1996. A Review of a posteriori Error Estimation and Adaptive Mesh-Refinement Techniques. Wiley-Tenber Series in Advances in Numerical Mathematics, Stuttgart.

- Victory H.D., Ganguly K., 1986. On Finite-Difference Methods for Solving Discrete-Ordinates Transport Equations. *SIAM Journal of Numerical Analysis*, 23 (1), 78-108.
- Wagner M.R., 1979. A Nodal Discrete-Ordinate Method for the Numerical Solution of the Multidimensional Transport Equation. *Proc. Topl. Mtg. Computational Methods in Nuclear Engineering*, Williamsburg, Virginia, Abril 23-25, 1979, Vol. 2, 4117.
- Walters W.F., O'Dell R.D., 1981. Nodal Methods for Discrete-Ordinates Transport Problems in (x,y) Geometry. *Proc. Int. Topl. Mtg. Advances in Mathematical Methods for the Solution of Nuclear Engineering Problems*, Munich, FRG, Abril 27-29, 1981, Vol. 1, 115.
- Walters W.F., 1986. Augmented Weighted-Diamond Form of the Linear-Nodal Scheme for Cartesian Coordinate Systems. *Nuclear Science and Engineering*, 92, 192-196.
- Zamonsky O.M., 1991. Métodos Nodales de Bajo Orden para la Resolución de la Ecuación de Transporte. *Proc. of the VIII ENFIR Conference*, Atibaia, Brasil, 17-20 Septiembre, 383-388.
- Zamonsky O.M., Gho C.J., Azmy Y.Y., 1998. Error Estimation and Adaptive Order Nodal Method for Solving Multidimensional Transport Problems. *Proc. of the 1998 Radiation Protection and Shielding Division Topical Conference*, Nashville, USA, April 19-23, I.457-I.464.
- Zamonsky O.M., Buscaglia G.C., Azmy Y.Y., 1999*a*. Improving the Accuracy of High-Order Nodal Transport Methods, *Proc. of the International Conference on Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications*, Madrid, 27-30 de Septiembre de 1999, p 1598.
- Zamonsky O.M., Buscaglia G.C., 1999*b*. Optimización de Métodos Nodales de Transporte de Alto Orden. *XXVI Reunión Anual de la Asociación Argentina de Tecnología Nuclear*. Bariloche, Argentina. (1999).
- Zamonsky O.M., Buscaglia G.C., Azmy Y.Y., 2000. A Posteriori Error Estimation for the One-Dimensional Arbitrarily High Order Transport-Nodal Method. *Annals of Nuclear Energy*. Vol. 27/4, pp. 355-369.