

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

**Solução LTS_N da equação de
transporte em geometria
cartesiana unidimensional
para $c = 1$**

por

Diana Vega Marona

Dissertação submetida como requisito parcial
para a obtenção do grau de
Mestre em Matemática Aplicada

Prof. Dr. Cynthia Feijó Segatto
Orientador

Porto Alegre, novembro de 2007.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Marona, Diana Vega

Solução LTS_N da equação de transporte em geometria cartesiana unidimensional para $c = 1$ / Diana Vega Marona.—
Porto Alegre: PPGMAP da UFRGS, 2007.

51 p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2007.

Orientador: Segatto, Cynthia Feijó

Dissertação: Matemática Aplicada
equação transporte, método LTS_N , albedo unitário

**Solução LTS_N da equação de transporte em geometria cartesiana
unidimensional para $c = 1$**

por

Diana Vega Marona

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em Matemática
Aplicada do Instituto de Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul,
como requisito parcial para a obtenção do grau de

Mestre em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Teoria de Transporte e Transformadas Integrais

Orientador: Prof. Dr. Cynthia Feijó Segatto

Banca examinadora:

Prof. Dr. Ricardo Carvalho Barros
IPRJ/UERJ

Prof. Dr. Rubem Vargas
ENG. PUCRS

Prof. Dr. Marco Túlio M. B. de Vilhena
PPGMAp/UFRGS

Dissertação apresentada e aprovada em
novembro 2007.

Prof. Maria Cristina Varriale, Ph.D.
Coordenador

*À minha família, em especial
aos meus pais, Victor e Carmen,
e ao meu noivo Alexandre.*

AGRADECIMENTOS

À minha família, pela compreensão e incentivo permanente.

À minha irmã Mariana Vega Marona, pela revisão lingüística e gramatical.

Às minhas impulsoras Neda Gonçalves e Vera Bauer, pelo crédito.

À minha orientadora, Cynthia Feijó Segatto, pela amizade, confiança e pelo compartilhamento de seus conhecimentos no auxílio da elaboração desta dissertação.

Ao professor Marco Túlio Vilhena, pelas conversas e risos.

Aos membros da comissão examinadora por suas valiosas contribuições ao trabalho.

PREFÁCIO

”Não pode haver uma linguagem mais universal e mais simples, mais livre de erros e obscuridades, mais digna de expressar as relações invariáveis das coisas naturais do que a Matemática. Interpreta todos os fenômenos pela mesma linguagem, como para atestar a unidade e simplicidade do plano do universo e tornar ainda mais evidente esta ordem mutável que preside sobre todas as causas naturais”.

Joseph Fourier, Teoria Analítica do Calor, 1822

Sumário

LISTA DE TABELAS	iii
LISTA DE SÍMBOLOS	iv
RESUMO	vi
ABSTRACT	vii
1 INTRODUÇÃO	1
2 O MÉTODO LTS_N CLÁSSICO	4
2.1 Problemas de transporte com simetria azimutal	4
2.2 Métodos de inversão da matriz LTS_N	8
2.2.1 O Algoritmo recursivo usando decomposição de Schur	10
2.2.2 O Método da Diagonalização	13
2.3 Tratando do caráter exponencial da solução	14
2.4 Exemplificando com $N = 4$	16
3 O MÉTODO LTS_N COM $C = 1$	21
3.1 Método recursivo de inversão considerando autovalor duplo	22
3.1.1 Exemplificando com $N = 4$	26
4 RESULTADOS NUMÉRICOS	33
4.1 Diagonalização x Schur	33
4.2 Aplicação na física	37

5 CONCLUSÕES	44
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	45

Lista de Tabelas

Tabela 4.1	Fluxo escalar $\phi(x)$, $Q(x) = 0$, $x_0 = 10$, $\Psi(0) = e^{5\mu}$ e $\Psi(10) = 0$	34
Tabela 4.2	Fluxo escalar $\phi(x)$, $Q(x) = e^{-x}$, $x_0 = 10$, $\Psi(0) = 1$ e $\Psi(10) = 0$	35
Tabela 4.3	Fluxo escalar $\phi(x)$, $Q(x) = 0$, $x_0 = 1$, $\Psi(0) = 1$ e $\Psi(1) = 0$. . .	36
Tabela 4.4	Fluxo escalar $\phi(x)$, $Q(x) = e^{-x}$, $x_0 = 1$, $\Psi(0) = 1$ e $\Psi(1) = 0$.	36
Tabela 4.5	Fluxo escalar $\phi(x)$, $Q(x) = 0$, $x_0 = 10$, $\Psi(0) = 1$ e $\Psi(10) = 0$.	37
Tabela 4.6	Densidade radiação, $N = 300$, $Q(\tau) = \tau^2 + \tau$, $f_1 = f_2 = 0$ e $\tau_0 = 1$	41
Tabela 4.7	Simulação para uma placa de espessura ótica $\tau_0 = 0.2$	42
Tabela 4.8	Simulação para uma placa de espessura ótica $\tau_0 = 1.0$	42
Tabela 4.9	Simulação para uma placa de espessura ótica $\tau_0 = 2.0$	42

LISTA DE SÍMBOLOS

A	Matriz dependente da aproximação considerada, independente do parâmetro s
A^{-1}	Matriz inversa da matriz A
$a(i, j)$	Elementos da matriz A
$Adj(S_k)$	Matriz adjunta da matriz S_k
$B(x)$	Matriz transformada inversa de Laplace $(sI - A)^{-1}$
$B^{+(x)}$	Decomposição da matriz $B(x)$ nos autovalores positivos
$B^{-}(x)$	Decomposição da matriz $B(x)$ nos autovalores negativos
β_l	Coefficientes da expansão em polinômios de Legendre da função de espalhamento
c	Albedo de espalhamento simples do meio
D	Matriz diagonal dos autovalores de A
$f(\mu)$	Fluxo angular de partículas incidentes na fronteira $x = 0$ da placa na direção μ
$g(\mu)$	Fluxo angular de partículas incidentes na fronteira $x = x_0$ da placa na direção μ
$g(\tau)$	Fonte de energia interna
$H(x)$	Vetor convolução da matriz $B(x)$ com o vetor fonte
I	Matriz identidade
$I(\tau, \mu)$	Intensidade de radiação em τ , na direção de μ
L	Grau de anisotropia
\mathcal{L}^{-1}	Operador da transformada inversa de Laplace
$(sI - A)$	Matriz simbólica associada à solução genérica quadrada de ordem N
P_l^m	Funções associadas de Legendre
P_l	Polinômio de Legendre
$p(\cos\theta)$	Função de fase
$P_l(\mu)$	Polinômios de Legendre
$P_l^m(\mu)$	Funções associadas de Legendre
$Q(x)$	Vetor fonte

$Q(x, \mu)$	Termo fonte na posição x e na direção de μ e φ
$Q_m(x)$	Termo fonte na posição x e na direção discreta μ_m
$q^r(\tau)$	Fluxo radiativo
$\rho(\tau)$	Densidade de radiação
s	Parâmetro complexo proveniente da Transformada de Laplace
S_k	Seqüência de matrizes
σ	Constante de Stefan-Boltzmann
T	Matriz triangular superior
τ	Variável ótica
U	Matriz unitária
U^T	Matriz transposta da matriz unitária
x	Espessura ótica
X	Matriz dos autovetores de A
X^{-1}	Matriz inversa de X
x_0	Comprimento da placa
μ	Variável angular; direção de propagação da partícula
μ_i	Raízes do Polinômio de Legendre: direções discretas
w_i	Pesos da Quadratura de Gauss-Legendre
$\psi(x, \mu)$	Fluxo angular de partículas em x na direção μ
$\psi_n(x)$	Fluxo angular de partículas em x na direção discreta μ_n
$\Psi(x)$	Vetor fluxo angular de partículas em x
$\Psi(s)$	Vetor fluxo angular de partículas transformado
φ	Ângulo azimutal
*	Operação convolução

RESUMO

Nos últimos anos, o método LTS_N - que resolve diversos problemas de transporte em uma placa plana - emergiu de forma contínua em nossa literatura. Porém, não é de nosso conhecimento que se tenha aplicado este método a problemas isotrópicos de transporte de partículas neutras em uma placa plana, quando o parâmetro albedo vale $c = 1$. Sabemos que para esta situação a equação de transporte unidimensional apresenta dois autovalores que se encontram no infinito. Conseqüentemente, a formulação LTS_N não pode ser aplicada, pois a solução LTS_N é utilizada para problemas onde a matriz LTS_N é diagonalizável, e isto ocorre quando $c \neq 1$. Para a resolução destes tipos de problemas, nós modificamos a solução LTS_N que aproxima a solução de Case quando o albedo é unitário, combinando de forma adequada a decomposição de Schur e a expansão de Heavside. A convergência provada do Método LTS_N permite que determinemos a solução com precisão prescrita. Apresentamos simulações e comparações numéricas com resultados disponíveis na literatura. Por este procedimento, esperamos terminar o estudo da praticabilidade do LTS_N para resolver problemas do transporte em uma placa plana.

ABSTRACT

In the last years, the LTS_N method - for transport problems in slab-geometry appears frequently in the literature. However, to our knowledge, this method has not been applied to the solution of neutral particle transport problems in a slab with isotropic scattering for $c = 1$. We know that in this situation the neutron transport equation presents two eigenvalues that coalesce to infinity. Therefore, the LTS_N formulation can not be applied to this type of problem, because the LTS_N solution is derived for problems in which the LTS_N matrix is non-defective, that is for problems with $c \neq 1$. To solve these types of problems we modify the LTS_N solution that approaches the Case solution when the albedo is unitary, combining in an adequate form the Schur decomposition and the Heavside expansion. The convergence of the LTS_N method allows us to determine the solution with prescribed accuracy. We present numerical simulations and comparisons with results available in the literature. By this procedure we hope to complete the study of the LTS_N formulation to solve transport problems in slab-geometry.

1 INTRODUÇÃO

A equação linear de transporte de Boltzmann é uma equação que descreve a distribuição de partículas que fluem em um meio material, levando em conta seu movimento e suas interações com o meio [Duderstadt e Hamilton, 1976]. Soluções exatas desta equação só podem ser obtidas para problemas específicos pelo método de Case [Case,1960] e pela técnica de "Wiener-Hopf" [Duderstadt e Martin, 1979]. Pela importância da equação de transporte, surgem na literatura muitas técnicas para sua resolução. Entre a grande variedade existente, nesta dissertação vamos nos deter no método das ordenadas discretas, mais comumente conhecido como método S_N . As equações S_N foram desenvolvidas por Chandrasekhar no estudo de astrofísica [Chandrasekhar, 1950]. Esta aproximação parte da forma integro-diferencial da equação de transporte, discretizando a variável angular e obtendo um sistema de equações diferenciais nas variáveis espaciais para problemas independentes do tempo. Nos últimos 15 anos tem-se devotado atenção especial à resolução da equação de transporte de partículas pelo método LTS_N , que resolve de forma analítica o sistema de equações S_N . Este método - que foi desenvolvido na década de 90, [Vilhena e Barrichello, 1991] - pode ser resumido em três etapas: aplicação da transformada de Laplace no conjunto de equações S_N , inversão analítica da matriz simbólica, e resolução do sistema linear obtido para a intensidade de radiação transformada. Convém observar que foi demonstrada a convergência do método LTS_N , usando a teoria de semi-grupos fortemente contínuos [Pazos e Vilhena, 1999a], o que garante que para $N \rightarrow \infty$, a solução LTS_N aproxima a solução exata de Case [Case, 1960]. O método LTS_N , tem sido aplicado a uma grande classe de problemas de partículas neutras, tais como: problemas unidimensionais para meio homogêneo [Barichello, 1992] e heterogêneo [Tavares, 2000]; em modelos de um grupo ou multi-grupo de energia [Barichello e Vilhena, 1993a],[Barroso, 2000] [Vilhena e Barichello, 1995]; problemas anisotrópicos com ou sem simetria azimutal [Segatto e Vilhena, 1997], [Segatto e Vilhena, 1994a], [Segatto, 1995], [Brancher et al., 1999]. Também já foi utilizado na equação de transporte dependente do tempo [Vilhena e Segatto,

1993], [Segatto e Vilhena, 1994b], [Renz, 1999], [Oliveira et al., 2003], [Gonzalez, 2007], bem como, a problemas lineares ou não lineares [Vargas e Vilhena, 1997], [Vargas e Vilhena, 1999], [Vilhena e Barichello, 1999], [Vargas e Vilhena, 2004]. Ainda é importante citar que em 2000, Lemos utilizou o método LTS_N para calcular a solução da equação de transferência radiativa condutiva [Lemos, 2000]. Em 2004, o método LTS_N para problemas de transporte com autovalores complexos foi generalizado, e como exemplificação, foi aplicado a um problema de transferência radiativa incluindo efeito de polarização [Simch et al., 2005]. O método LTS_N também já foi utilizado para determinar a distribuição de partículas em meios compostos por uma mistura aleatória binária usando modelos "atomic-mix" e "Levermore-Pomraning", [Vasques, 2005] e [Larsen, 2005]. Esta metodologia não está limitada a problemas unidimensionais, também resolve problemas multidimensionais em geometria cartesiana para nêutrons [Zabadal et al., 1993], [Zabadal, 1994], [Hauser et al, 2005], tanto quanto para fótons e elétrons [Rodrigues et al., 2007a].

Então, com o objetivo de aumentar a abrangência do método LTS_N , mantendo seu caráter analítico, vamos estendê-lo a certos tipos de situações ainda não presentes em nossa literatura: resolução de problemas isotrópicos de transporte de nêutrons em uma placa plana, quando o albedo é unitário. Para isto, primeiramente apresentamos, no capítulo 2, o método LTS_N clássico aplicado à equação de transporte linear unidimensional, estacionária e com simetria azimutal. A etapa de inversão da matriz LTS_N gera muitos estudos, já que nem sempre é uma tarefa trivial a inversão de uma matriz. Enfatizaremos nosso estudo em duas metodologias: decomposição de Schur e diagonalização. Encerrando o capítulo 2, apresentamos a título de exemplificação a resolução de um problema de transporte considerando $N = 4$. Dando continuidade ao cumprimento de nosso objetivo, nós reformulamos a solução LTS_N que aproxima a solução de Case quando o albedo é unitário, combinando de forma adequada a decomposição de Schur e a expansão de Heaviside; tal combinação é apresentada no capítulo 3 desta dissertação.

Concluindo, encerramos este trabalho apresentando comparações numéricas entre resultados existentes em nossa literatura e os gerados pela nossa formulação.

2 O MÉTODO LTS_N CLÁSSICO

Este capítulo, que serve para fundamentação deste trabalho, é dedicado à apresentação da formulação LTS_N clássica, aplicado em problemas de transporte com simetria azimutal. O Método LTS_N clássico é considerado quando tomamos N inteiro par. Apresentamos também, a título de exemplificação, todo processo para $N = 4$. E ainda, fazemos uma detalhada explanação sobre a inversão da matriz LTS_N usando tanto o método iterativo associado à decomposição de Schur, quanto a decomposição espectral da matriz \mathbf{A} .

2.1 Problemas de transporte com simetria azimutal

Neste trabalho consideraremos a equação de transporte linear unidimensional, monoenergética, estacionária e com simetria azimutal. Desta forma, a função fluxo angular de partículas, $\psi(x, \mu)$, dependerá de apenas duas variáveis: x de posição e μ de direção, onde $\mu = \cos \theta$ e θ é o ângulo polar. Neste trabalho vamos considerar o seguinte problema em uma placa de espessura x_0 ,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, \mu) + \psi(x, \mu) = \frac{c}{2} \int_{-1}^1 p(\cos \Theta) \psi(x, \mu') d\mu' + Q(x, \mu), \quad (2.1)$$

com condições de contorno

$$\psi(0, \mu) = f(\mu) \quad \text{se } \mu > 0$$

$$\psi(x_0, \mu) = g(\mu) \quad \text{se } \mu < 0,$$

onde $f(\mu)$ e $g(\mu)$ são os fluxos incidentes na fronteira do domínio. Na equação acima temos que:

- x é a variável espacial que pertence a $[0, x_0]$ em unidade de livre caminho médio;

- $\mu = \cos \theta$, onde θ é o ângulo polar; portanto $\mu \in [-1, 1]$;
- $\psi(x, \mu)$ é o fluxo de partículas em x na direção de μ ;
- c é a razão de espalhamento do meio, denominada albedo;
- $p(\cos \Theta)$ é a função de espalhamento, onde Θ é o ângulo de espalhamento, isto é, o ângulo formado pela direção de movimento da partícula antes da interação e o ângulo resultante após a interação;
- $Q(x, \mu)$ é uma fonte externa de partículas.

No presente trabalho, assumimos que a função de espalhamento pode ser aproximada através uma série truncada em polinômios de Legendre, isto é:

$$p(\cos \Theta) = \sum_{\ell=0}^L \beta_{\ell} P_{\ell}(\cos \Theta), \quad (2.2)$$

onde $\beta_0 = 1$. Usando o teorema da adição para os polinômios de Legendre podemos reescrever (2.2) como

$$p(\cos \Theta) = \sum_{m=0}^M \sum_{\ell=m}^L \beta_{\ell}^m P_{\ell}^m(\mu') P_{\ell}^m(\mu) \cos m(\varphi - \varphi'), \quad (2.3)$$

onde φ é o ângulo azimutal formado com um ângulo de referência φ' , $P_{\ell}^m(\mu)$ são funções associadas de Legendre e

$$\beta_{\ell}^m = \frac{\ell - m}{\ell + m}.$$

Como estamos considerando simetria azimutal, temos $M = 0$ em (2.3), assim, substituindo (2.3) em (2.1), temos

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, \mu) + \psi(x, \mu) = \frac{c}{2} \int_{-1}^1 \sum_{\ell=0}^L \beta_{\ell} P_{\ell}(\mu') P_{\ell}(\mu) \psi(x, \mu') d\mu' + Q(x, \mu). \quad (2.4)$$

Para encontrarmos a aproximação S_N da equação (2.4), primeiramente aproximamos seu termo integral por quadratura de Gauss-Legendre de ordem N

(N par), e logo após usamos o método da colocação na variável de direção μ , considerando como função teste a Delta de Dirac e como pontos de colocação as raízes dos polinômios de Legendre de grau N . Desta forma temos a aproximação S_N da equação de transporte unidimensional em uma placa descrita como,

$$\mu_n \frac{d\psi_n}{dx}(x) + \psi_n(x) = \frac{c}{2} \sum_{\ell=0}^L \beta_\ell \sum_{k=0}^N \psi_k(x) \omega_k P_\ell(\mu_n) P_\ell(\mu_k) + Q_n(x), \quad (2.5)$$

e as condições de contorno são dadas por:

$$\psi_n(0) = f_n, \text{ se } \mu_n > 0 \quad (2.6)$$

e

$$\psi_n(x_0) = g_n, \text{ se } \mu_n < 0. \quad (2.7)$$

Aqui, μ_n são as raízes dos polinômios de Legendre de grau N que consideramos ordenadas de forma decrescente, isto é

$$\mu_N < \dots < \mu_{\frac{N}{2}+1} < 0 < \mu_{\frac{N}{2}} < \dots < \mu_1,$$

e os ω_n são os pesos da quadratura Gaussiana respectivos a cada raiz μ_n . Para facilitar a notação, denotamos o fluxo de partículas na direção discreta μ_n , por $\psi_n(x)$.

Agora, com a finalidade de introduzirmos o método LTS_N de forma mais simples, vamos reescrever as equações (2.5) como uma equação diferencial ordinária matricial de primeira ordem,

$$\frac{d}{dx} \mathbf{\Psi}(x) - \mathbf{A} \mathbf{\Psi}(x) = \mathbf{Q}(x), \quad (2.8)$$

onde \mathbf{A} é uma matriz quadrada de ordem N definida por

$$a(i, j) = \begin{cases} -\frac{1}{\mu_i} + \frac{c\omega_j}{2\mu_i} \left[\sum_{\ell=0}^L \beta_\ell P_\ell(\mu_i) P_\ell(\mu_j) \right], & \text{se } i = j \\ \frac{c\omega_j}{2\mu_i} \left[\sum_{\ell=0}^L \beta_\ell P_\ell(\mu_i) P_\ell(\mu_j) \right], & \text{se } i \neq j \end{cases} \quad (2.9)$$

E ainda, $\mathbf{Q}(x)$ é o vetor fonte preescrita de ordem N definido por

$$\mathbf{Q}(x) = \left[\frac{Q_1(x)}{\mu_1}, \dots, \frac{Q_N(x)}{\mu_N} \right]^T, \quad (2.10)$$

onde definimos $Q_i(x) = Q(x, \mu_i)$. O vetor fluxo angular de partículas é definido por

$$\mathbf{\Psi}(x) = \begin{bmatrix} \Psi_1(x) \\ \Psi_2(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \psi_1(x) \\ \vdots \\ \psi_{N/2}(x) \\ \psi_{N/2+1}(x) \\ \vdots \\ \psi_N(x) \end{bmatrix}, \quad (2.11)$$

com $\Psi_1(x)$ e $\Psi_2(x)$ sendo dois sub-vetores de ordem $N/2$ do vetor fluxo angular de partículas $\mathbf{\Psi}(x)$, o primeiro contendo somente os fluxos das direções positivas e o segundo, os fluxos das direções negativas de μ . Com esta notação, as condições de contorno podem ser escritas como:

$$\Psi_1(0) = \begin{bmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_{\frac{N}{2}} \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad \Psi_2(x_0) = \begin{bmatrix} g_{\frac{N}{2}+1} \\ \vdots \\ g_N \end{bmatrix}. \quad (2.12)$$

Para resolvermos a equação matricial (2.8) usamos o método LTS_N . Isto é, aplicamos a transformada de Laplace sobre a variável espacial desta equação, gerando um sistema linear de N incógnitas e N equações, que podemos representar por:

$$(s\mathbf{I} - \mathbf{A})\overline{\mathbf{\Psi}}(s) = \mathbf{\Psi}(0) + \overline{\mathbf{Q}}(s) \quad (2.13)$$

onde a barra representa a transformada de Laplace, isto é, $\overline{\mathbf{\Psi}}(s) = \mathcal{L}[\mathbf{\Psi}(x)]$ e $\overline{\mathbf{Q}}(s) = \mathcal{L}[\mathbf{Q}(x)]$, s é um parâmetro complexo e \mathbf{I} é uma matriz identidade de ordem N . Resolvendo a equação descrita acima para o fluxo angular de partículas transformado, obtemos:

$$\overline{\mathbf{\Psi}}(s) = (s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} \mathbf{\Psi}(0) + (s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} \overline{\mathbf{Q}}(s). \quad (2.14)$$

Assim, para obtermos o vetor fluxo angular de partículas $\mathbf{\Psi}(x)$ basta aplicarmos a transformada inversa de Laplace

$$\mathbf{\Psi}(x) = \mathbf{B}(x)\mathbf{\Psi}(0) + \mathbf{H}(x), \quad (2.15)$$

onde para simplificarmos nossa notação definimos

$$\mathbf{B}(x) = \mathcal{L}^{-1} [(s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}], \quad (2.16)$$

e o vetor $\mathbf{H}(x)$ é definido como:

$$\mathbf{H}(x) = \mathbf{B}(x) * \mathbf{Q}(x) = \int_0^x \mathbf{B}(x - \xi) \mathbf{Q}(\xi) d\xi. \quad (2.17)$$

Aqui, devemos observar que parte do vetor $\Psi(0)$ que aparece na solução dada pela equação (2.15) não é conhecida. Para encontrarmos o valor do fluxo angular em zero nas direções negativas, $\Psi_2(0)$, vamos reescrever a solução (2.15) na forma particionada, como:

$$\begin{bmatrix} \Psi_1(x) \\ \Psi_2(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} B_{11}(x) & B_{12}(x) \\ B_{21}(x) & B_{22}(x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_1(0) \\ \Psi_2(0) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} H_1(x) \\ H_2(x) \end{bmatrix}. \quad (2.18)$$

Agora, aplicando $x = x_0$ em (2.18) temos, das últimas $N/2$ equações, que

$$\Psi_2(x_0) = B_{21}(x_0)\Psi_1(0) + B_{22}(x_0)\Psi_2(0) + H_2(x_0) \quad (2.19)$$

ou, se notamos que os vetores $\Psi_1(0)$, $\Psi_2(x_0)$ e $H_2(x_0)$ são vetores conhecidos, temos o sub-vetor desconhecido $\Psi_2(0)$ como:

$$\Psi_2(0) = B_{22}^{-1}(x_0) (\Psi_2(x_0) - B_{21}(x_0)\Psi_1(0) - H_2(x_0)). \quad (2.20)$$

Desta forma, temos a solução (2.15) completamente determinada.

Na seção a seguir, vamos discutir duas formas analíticas para o cálculo da matriz $\mathbf{B}(x)$.

2.2 Métodos de inversão da matriz LTS_N

Nesta seção, faremos uma breve abordagem sobre metodologias já utilizadas para proceder à inversão da matriz LTS_N . Posteriormente, faremos um estudo mais aprofundado sobre o método iterativo associado à decomposição de Schur e o método da diagonalização, pois estes serão utilizados neste trabalho.

Estudos sobre a inversão da matriz LTS_N começaram a ser realizados na década de 90. O primeiro trabalho surgiu em 1992 com Barichello [Barichello,1992], que propôs um algoritmo para a inversão da matriz LTS_N considerando anisotropia linear. Este algoritmo utiliza a estrutura da matriz associada ao problema linearmente anisotrópico, decompondo a matriz \mathbf{A} em sub-colunas; deste modo pôde, de forma analítica, calcular o determinante e a adjunta da matriz pencil $s\mathbf{I} - \mathbf{A}$. Este algoritmo foi generalizado para o caso de anisotropia de maior ordem por Oliveira [Oliveira, 1993], porém, devido à complexidade do algoritmo, este tornou-se computacionalmente inviável. Uma segunda opção foi o uso do algoritmo de Trzaska [Trzaska, 1987], que inverte uma matriz genérica do tipo $(s\mathbf{A} + \mathbf{B})$, usando o teorema de Cayley-Hamilton e portanto potenciação de matrizes. Brancher [Brancher, 1998] constatou que estas metodologias eram computacionalmente inviáveis para ordem de aproximação $N > 22$. Para melhorar o desempenho computacional, [Cardona e Vilhena, 1998] desenvolveram um algoritmo, que através de operações elementares, triangulariza a matriz LTS_N isotrópica e a inverte de forma recursiva. Para a inversão da Transformada de Laplace foi novamente utilizada a técnica de expansão de Heaviside, porém tal argumento não se mostrou válido para problemas anisotrópicos. Logo a seguir, Segatto [Segatto et al., 1999a] apresentou um método recursivo para calcular a inversa da matriz simbólica $(s\mathbf{I} - \mathbf{A})$. Este método usa a decomposição de Schur para triangularizar a matriz \mathbf{A} e o método recursivo para inverter a matriz LTS_N e, novamente, a técnica de Heaviside para inversão da transformada de Laplace. Tal procedimento pode ser aplicado a uma matriz pencil genérica, isto é independe da matriz \mathbf{A} , bastando que $(s\mathbf{I} - \mathbf{A})$ seja invertível. Logo a seguir, levando em conta que para $c \neq 1$ os autovalores da matriz \mathbf{A} associada ao problema unidimensional de transporte de partículas (2.1) possui autovalores distintos [Segatto et al., 1999b] sugeriu fazer a decomposição espectral da matriz LTS_N , facilitando muito o cálculo da matriz $\mathbf{B}(x)$. Este método é usualmente chamado de diagonalização.

Nas próximas subseções apresentaremos as duas últimas formas de inversão, pois serão utilizadas nesta dissertação.

2.2.1 O Algoritmo recursivo usando decomposição de Schur

Para explicarmos este algoritmo, consideramos uma matriz pencil

$$s\mathbf{I} - \mathbf{A},$$

onde \mathbf{A} é uma matriz real de ordem N . O teorema de Schur, [Golub et al., 1989], garante que toda matriz quadrada \mathbf{A} pode ser decomposta na forma,

$$\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{T}\mathbf{U}^T, \quad (2.21)$$

onde \mathbf{U} é uma matriz unitária (isto é, $\mathbf{U}^{-1} = \mathbf{U}^T$) e \mathbf{T} uma matriz triangular superior. Desta forma, podemos simplificar a inversão da matriz cheia $(s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}$ para a inversão de uma matriz triangular do seguinte modo:

$$(s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1} = (s\mathbf{U}\mathbf{U}^T - \mathbf{U}\mathbf{T}\mathbf{U}^T)^{-1} = (\mathbf{U}(s\mathbf{I} - \mathbf{T})\mathbf{U}^T)^{-1} = \mathbf{U}(s\mathbf{I} - \mathbf{T})^{-1}\mathbf{U}^T. \quad (2.22)$$

Assim, como \mathbf{U} é uma matriz constante

$$\mathcal{L}^{-1} [(s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}] = \mathbf{U}\mathcal{L}^{-1} [(s\mathbf{I} - \mathbf{T})^{-1}] \mathbf{U}^T. \quad (2.23)$$

Neste momento, é importante observarmos que:

- A matriz $s\mathbf{I} - \mathbf{T}$ tem a forma

$$s\mathbf{I} - \mathbf{T} = \begin{bmatrix} s - t_{11} & -t_{12} & \cdots & -t_{1N-1} & -t_{1N} \\ 0 & s - t_{22} & \ddots & -t_{2N-1} & -t_{2N} \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & s - t_{NN} \end{bmatrix}, \quad (2.24)$$

- Seu determinante é dado por:

$$\det(s\mathbf{I} - \mathbf{T}) = \prod_{i=1}^N (s - t_{ii}). \quad (2.25)$$

- A inversa da seguinte matriz bloco pode ser calculada como,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{D} \\ \mathbf{0} & \mathbf{E} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}^{-1} & -\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{E}^{-1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{E}^{-1} \end{bmatrix}, \quad (2.26)$$

onde $\mathbf{0}$ é uma matriz nula e as matrizes \mathbf{C}^{-1} e \mathbf{E}^{-1} existem.

Para invertermos a matriz (2.24) vamos construir uma seqüência de matrizes \mathbf{S}_k de ordem k definidas por:

$$\mathbf{S}_k = \begin{bmatrix} s - t_{11} & -t_{12} & \cdots & -t_{1k-1} & -t_{1k} \\ 0 & s - t_{22} & \ddots & -t_{2k-1} & -t_{2k} \\ 0 & \ddots & \ddots & \ddots & \vdots \\ \vdots & \ddots & \ddots & \ddots & \ddots \\ 0 & \cdots & 0 & 0 & s - t_{kk} \end{bmatrix}, \quad k = 2, \dots, N. \quad (2.27)$$

Da fórmula acima, notamos que podemos escrever as matrizes \mathbf{S}_k em função de \mathbf{S}_{k-1} como:

$$\mathbf{S}_k = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_{k-1} & -\mathbf{V} \\ \mathbf{0} & [s - t_{kk}] \end{bmatrix}, \quad (2.28)$$

onde $\mathbf{0} = [0, 0, \dots, 0]$ representa o vetor linha nulo de ordem $k - 1$, e

$$\mathbf{V} = [t_{1k}, \dots, t_{k-1k}]^T$$

é um vetor coluna de ordem $k - 1$. Quando $k = 2$, \mathbf{S}_1 é uma matriz de ordem 1, logo, sua inversa é facilmente calculada pela fórmula (2.28):

$$\mathbf{S}_2^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_1^{-1} & \frac{\mathbf{S}_1^{-1}\mathbf{V}}{s-t_{22}} \\ \mathbf{0} & \frac{1}{s-t_{22}} \end{bmatrix}. \quad (2.29)$$

Seguindo de forma recursiva este raciocínio, temos que

$$\mathbf{S}_k^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_{k-1}^{-1} & \frac{\mathbf{S}_{k-1}^{-1}\mathbf{V}}{s-t_{kk}} \\ [0 \ \cdots \ 0] & \frac{1}{s-t_{kk}} \end{bmatrix}, \quad k = 2, \dots, N. \quad (2.30)$$

Agora, para usarmos a técnica de Heaviside para inverter a transformada de Laplace na matriz $s\mathbf{I} - \mathbf{T}$ é necessário calcularmos sua adjunta, a saber

$$\text{Adj}(\mathbf{S}_k) = \mathbf{S}_k^{-1} \det(\mathbf{S}_k). \quad (2.31)$$

Efetuada a multiplicação descrita acima, obtemos a seguinte fórmula recursiva para a determinação da adjunta da matriz \mathbf{S}_N

$$\text{Adj}(\mathbf{S}_k) = \mathbf{S}_k^{-1} \det(\mathbf{S}_k) = \begin{bmatrix} (s - t_{kk})\text{Adj}(\mathbf{S}_{k-1}) & \text{Adj}(\mathbf{S}_{k-1})\mathbf{V} \\ [0 \quad \dots \quad 0] & \det(\mathbf{S}_{k-1}) \end{bmatrix}, \quad k = 2, 3, \dots, N. \quad (2.32)$$

Finalmente, quando $c \neq 1$, os autovalores de \mathbf{A} são todos distintos. Assim, o teorema de expansão de Heaviside garante que se temos uma função racional do tipo

$$F(s) = \frac{P(s)}{Q(s)}$$

onde o grau de $P(s)$ é menor que o grau de $Q(s)$, se os polinômios não possuem fatores comuns e se as raízes de $Q(s)$ são todas simples, então

$$\mathcal{L}^{-1} \left[\frac{P(s)}{Q(s)} \right] = \sum_{n=1}^{\text{grau de } Q(s)} \frac{P(s_n)}{\frac{d}{ds}Q(s)|_{s=s_n}} e^{-s_k x}, \quad (2.33)$$

onde s_n são as raízes de $Q(s)$.

Desta forma quando $c \neq 1$ a matriz $\mathbf{B}(x)$ é dada por:

$$\begin{aligned} \mathbf{B}(x) &= \mathcal{L}^{-1} [(s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}] \\ &= \mathbf{U} \mathcal{L}^{-1} [(s\mathbf{I} - \mathbf{T})^{-1}] \mathbf{U}^T \\ &= \mathbf{U} \mathcal{L}^{-1} [\mathbf{S}_N^{-1}] \mathbf{U}^T \\ &= \mathbf{U} \mathcal{L}^{-1} \left[\frac{\text{Adj}(\mathbf{S}_N)}{\det(\mathbf{S}_N)} \right] \mathbf{U}^T \\ &= \mathbf{U} \left[\sum_{i=1}^N \frac{\text{Adj}(\mathbf{S}_N)}{\frac{d}{ds} \det(\mathbf{S}_N)|_{s=t_{ii}}} e^{t_{ii}x} \right] \mathbf{U}^T. \end{aligned} \quad (2.34)$$

No caso $c = 1$, a matriz \mathbf{A} apresentará autovalor nulo com multiplicidade dois. Isto será abordado no próximo capítulo.

2.2.2 O Método da Diagonalização

Nesta subsecção faremos uma descrição do método da diagonalização e para tanto, observemos que os autovalores da matrix \mathbf{A} são todos simétricos não-nulos e distintos, quando $c \neq 1$. Neste caso, a matrix \mathbf{A} pode ser decomposta em seu espectro como

$$\mathbf{A} = \mathbf{X}\mathbf{D}\mathbf{X}^{-1},$$

onde \mathbf{D} é uma matrix diagonal formada pelos autovalores da matrix \mathbf{A} , e \mathbf{X} é a matrix cujas colunas são seus respectivos autovetores. Assim,

$$\mathbf{B}(x) = \mathcal{L}^{-1}[(s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}] = \mathcal{L}^{-1}\{(s\mathbf{X}\mathbf{X}^{-1} - \mathbf{X}\mathbf{D}\mathbf{X}^{-1})^{-1}\}. \quad (2.35)$$

Colocando em evidência a matrix dos autovetores \mathbf{X} à esquerda e \mathbf{X}^{-1} à direita, temos

$$\mathbf{B}(x) = \mathcal{L}^{-1}[(\mathbf{X}(s\mathbf{I} - \mathbf{D})\mathbf{X}^{-1})^{-1}] = \mathcal{L}^{-1}[\mathbf{X}(s\mathbf{I} - \mathbf{D})^{-1}\mathbf{X}^{-1}]$$

e como \mathbf{X} é uma matrix constante então podemos escrever,

$$\mathbf{B}(x) = \mathbf{X}\mathcal{L}^{-1}[(s\mathbf{I} - \mathbf{D})^{-1}]\mathbf{X}^{-1}. \quad (2.36)$$

Desta forma, a matrix simbólica $s\mathbf{I} - \mathbf{D}$ é uma matrix diagonal que podemos escrever como,

$$s\mathbf{I} - \mathbf{D} = \begin{pmatrix} s - d_1 & 0 & \dots & 0 \\ & s - d_2 & & \\ & & s - d_3 & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & \vdots \\ 0 & \dots & 0 & s - d_N \end{pmatrix},$$

onde os elementos d_i são os autovalores de \mathbf{A} . Assim sua inversa é facilmente calculada por

$$(s\mathbf{I} - \mathbf{D})^{-1} = \begin{pmatrix} \frac{1}{s-d_1} & 0 & \dots & 0 \\ & \frac{1}{s-d_2} & \dots & \\ & & \frac{1}{s-d_3} & \vdots \\ \vdots & & & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & \frac{1}{s-d_N} \end{pmatrix}. \quad (2.37)$$

Aplicando a transformada inversa de Laplace em (2.37) obtemos,

$$\mathcal{L}^{-1}[(s\mathbf{I} - \mathbf{D})^{-1}] = \begin{pmatrix} e^{xd_1} & 0 & \dots & 0 \\ 0 & e^{xd_2} & & \vdots \\ & & e^{xd_3} & \\ \vdots & & & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & e^{xd_N} \end{pmatrix} = e^{\mathbf{D}x}. \quad (2.38)$$

Assim, podemos escrever a matrix $\mathbf{B}(x)$ como:

$$\mathbf{B}(x) = \mathbf{X}e^{\mathbf{D}x}\mathbf{X}^{-1}. \quad (2.39)$$

Simulações numéricas utilizando esta metodologia podem ser encontradas nos trabalhos de [Segatto et al., 1999b] e [Gonçalves et al., 2002].

2.3 Tratando do caráter exponencial da solução

Conforme vimos nas subseções anteriores, a solução LTS_N possui caráter exponencial. Também sabemos que os autovalores da matriz \mathbf{A} associada à equação matricial (2.8), quando $c \neq 1$, são todos distintos entre si e simétricos. O comportamento exponencial da solução, combinado com o fato de que os autovalores s_k crescem em magnitude com N , mostra que esta formulação não é apropriada para resolver problemas de grandes espessuras ou altos graus de anisotropia. Para contornar esta dificuldade, primeiramente, Barichello [Barichello et al., 1998] propôs

uma mudança de base na solução do problema homogêneo, porém, para problemas não-homogêneos, o overflow é repassado para o termo da fonte externa. Em 1998, Brancher [Brancher, 1998] resolveu o problema de overflow para o caso não-homogêneo quando a fonte é da forma exponencial, utilizando o método dos coeficientes a determinar. No entanto, somente em 2000 o problema de overflow foi completamente eliminado por Gonçalves [Gonçalves et al., 2000], que usou simultaneamente a propriedade de invariância de direções discretas e a mudança de variáveis sugerida por Barichello [Barichello et al., 1998]. A propriedade de invariância de projeção consiste em estabelecer a equivalência de condições entre as coordenadas (x, μ) e $(-x, -\mu)$, ou alternativamente o tratamento equivalente a fluxos nas direções μ e $-\mu$. O par $(-x, -\mu)$ pode ser recolocado por $(x_0 - x, -\mu)$ como resultado do deslocamento do ponto de reflexão de 0 para $x_0/2$. Na solução LTS_N , a propriedade de invariância de projeção está representada pela assimetria das raízes do determinante da matriz \mathbf{A} . Usando esta propriedade, Gonçalves, Vilhena e Segatto [Gonçalves et al., 2002] eliminaram o *overflow* originado pelos termos de exponencial positiva para N grande, separando as soluções homogênea e particular em componentes que contêm apenas os termos positivos e outra os negativos. Reescreveram a matriz $\mathbf{B}(x)$ como $\mathbf{B}(x) = \mathbf{B}^+(x) + \mathbf{B}^-(x)$, onde a matriz $\mathbf{B}^+(x)$ contém apenas os autovalores positivos e a matriz $\mathbf{B}^-(x)$ somente os negativos. Desta forma, puderam reescrever a solução LTS_N como:

$$\Psi(x) = \mathbf{B}^+(x - x_0)\Psi(x_0) + \mathbf{B}^-(x)\Psi(0) + \mathbf{H}(x), \quad (2.40)$$

onde o vetor $\mathbf{H}(x)$ é dado por:

$$\mathbf{H}(x) = \int_{x_0}^x \mathbf{B}^+(x - \zeta)\mathbf{Q}(\zeta)d\zeta + \int_0^x \mathbf{B}^-(x - \zeta)\mathbf{Q}(\zeta)d\zeta. \quad (2.41)$$

Aqui é bom salientar que todos os argumentos dos termos exponenciais na solução LTS_N (2.40) são negativos.

2.4 Exemplificando com $N = 4$

Para exemplificar todo o processo recursivo associado à decomposição de Schur para inversão da matriz LTS_N , descrito nas seções anteriores, vamos usar $N = 4$ para encontrar a solução do seguinte problema de transporte:

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, \mu) + \psi(x, \mu) = \frac{0.9}{2} \int_{-1}^1 \psi(x, \mu') d\mu' \quad (2.42)$$

com condições de contorno

$$\psi(0, \mu) = 1 \quad \text{se } \mu > 0$$

$$\psi(1, \mu) = 0 \quad \text{se } \mu < 0.$$

É sabido que as raízes e os pesos da quadratura Gaussiana de ordem 4 são dados por:

$$\mu_1 = -\mu_4 = 0.8611363116$$

$$\mu_2 = -\mu_3 = 0.3399810436$$

$$\omega_1 = \omega_4 = 0.3478548451$$

$$\omega_2 = \omega_3 = 0.6521451549$$

A equação S_4 associada a este problema é:

$$\frac{d}{dx} \begin{bmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \\ \psi_3(x) \\ \psi_4(x) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -0.9794794486 & 0.3407884626 & 0.3407884626 & 0.1817768897 \\ 0.4604217890 & -2.078159043 & 0.8631814192 & 0.4604217890 \\ -0.4604217890 & -0.8631814192 & 2.078159043 & -0.4604217890 \\ -0.1817768897 & -0.3407884626 & -0.3407884626 & 0.9794794486 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \\ \psi_3(x) \\ \psi_4(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}.$$

Agora devemos encontrar a função $\mathbf{B}(x)$. Assim, procedemos a decomposição de Schur $\mathbf{A} = \mathbf{U}\mathbf{T}\mathbf{U}^T$, onde

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} -2.055185283 & 0.4313302929 & -1.055367650 & -0.9180027176 \\ 0 & -0.5255601326 & -1.155504518 & -0.9693104570 \\ 0 & 0 & 0.5255601326 & -0.08758343457 \\ 0 & 0 & 0 & 2.055185283 \end{bmatrix}$$

e

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} -0.3578004554 & 0.8748943019 & 0.3005549531 & 0.1273008826 \\ 0.9142212422 & 0.2580860360 & 0.2720072563 & 0.1536332344 \\ 0.1621410417 & 0.3137519518 & -0.3533836184 & -0.8662505490 \\ 0.0994416256 & 0.2636499027 & -0.8430888393 & 0.45804071978 \end{bmatrix}.$$

Os autovalores de \mathbf{A} são dados pela diagonal principal de \mathbf{T} e vamos denotá-los por:

$$s_1 = 2.055185283, s_2 = 0.5255601326, s_3 = -0.5255601326 \text{ e } s_4 = -2.055185283.$$

Para encontrarmos as adjuntas em cada autovalor, usamos o método recursivo, o qual será mostrado para o primeiro autovalor, assim partimos da adjunta de $\mathbf{S}_2(s_1)$ que é dada de forma imediata por:

$$\text{Adj}(\mathbf{S}_2(s_1)) = \begin{bmatrix} s_1 - (-0.5255601326) & 0.4313302929 \\ 0 & s_1 - (-2.055185283) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2.5807454155 & 0.4313302929 \\ 0 & 4.1103705658 \end{bmatrix}$$

$$\text{Adj}(\mathbf{S}_3(s_1)) = \begin{bmatrix} (s_1 - t_{33})\text{Adj}(\mathbf{S}_2) & \text{Adj}(\mathbf{S}_2)\mathbf{V} \\ [0, 0] & \det(\mathbf{S}_2(s_1)) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 3.9475730941 & 0.6597736642 & -3.2220393274 \\ 0 & 6.2873261946 & -4.7495517604 \\ 0 & 0 & 10.6078199936 \end{bmatrix}$$

$$\text{Adj}(\mathbf{S}_4(s_1)) = \begin{bmatrix} (s_1 - t_{44})\text{Adj}(\mathbf{S}_3) & \text{Adj}(\mathbf{S}_3)\mathbf{V} \\ [0, 0, 0] & \det(\mathbf{S}_3(s_1)) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 0 & -3.9812110695 \\ 0 & 0 & 0 & -5.6783889712 \\ 0 & 0 & 0 & -0.9290693084 \\ 0 & 0 & 0 & 16.2259882524 \end{bmatrix}$$

Usando esta mesma fórmula recursiva, encontramos as adjuntas calculadas nos outros autovalores como:

$$\text{Adj}(\mathbf{S}_4(s_2)) = \begin{bmatrix} 0 & 0 & 2.4592126586 & 0.1408098520 \\ 0 & 0 & 4.5614385463 & 0.2611793186 \\ 0 & 0 & -4.1493740773 & -0.2375852888 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\text{Adj}(\mathbf{S}_4(s_3)) = \begin{bmatrix} 0 & 1.1700583871 & 1.2862541021 & 0.4831179296 \\ 0 & 4.1493740773 & 4.5614385463 & 1.7132794700 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\text{Adj}(\mathbf{S}_4(s_4)) = \begin{bmatrix} -16.22598825 & 4.5754741051 & -4.5868151205 & -2.6426268053 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}.$$

De posse das adjuntas e sabendo que o determinante de S_4 é dado por:

$$\det(S_4(s)) = (s - s_1)(s - s_2)(s - s_3)(s - s_4),$$

podemos calcular as matrizes coeficientes do teorema de Heaviside como:

$$\mathbf{P}_1 = \frac{\text{Adj}(\mathbf{S}_4(s_1))}{\frac{d}{ds} \det(\mathbf{S}_4)|_{s=s_1}} = \begin{bmatrix} 0.0000000000 & 0.0000000000 & 0.0000000000 & -0.2453601597 \\ 0.0000000000 & 0.0000000000 & 0.0000000000 & -0.3499564330 \\ 0.0000000000 & 0.0000000000 & 0.0000000000 & -0.0572581031 \\ 0.0000000000 & 0.0000000000 & 0.0000000000 & 1.0000000000 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{P}_2 = \frac{\text{Adj}(\mathbf{S}_4(s_2))}{\frac{d}{ds} \det(\mathbf{S}_4)|_{s=s_2}} = \begin{bmatrix} 0.0000000000 & 0.0000000000 & -0.5926707529 & -0.0339352030 \\ 0.0000000000 & 0.0000000000 & -1.0993076212 & -0.0629442691 \\ 0.0000000000 & 0.0000000000 & 1.0000000000 & 0.0572581031 \\ 0.0000000000 & 0.0000000000 & 0.0000000000 & 0.0000000000 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{P}_3 = \frac{\text{Adj}(\mathbf{S}_4(s_3))}{\frac{d}{ds} \det(\mathbf{S}_4)|_{s=s_3}} = \begin{bmatrix} 0.0000000000 & 0.2819843102 & 0.3099875013 & 0.1164315197 \\ 0.0000000000 & 1.0000000000 & 1.0993076212 & 0.4129007022 \\ 0.0000000000 & 0.0000000000 & 0.0000000000 & 0.0000000000 \\ 0.0000000000 & 0.0000000000 & 0.0000000000 & 0.0000000000 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{P}_4 = \frac{\text{Adj}(\mathbf{S}_4(s_4))}{\frac{d}{ds} \det(\mathbf{S}_4)|_{s=s_4}} = \begin{bmatrix} 1.0000000000 & -0.2819843102 & 0.2826832517 & 0.1628638431 \\ 0.0000000000 & 0.0000000000 & 0.0000000000 & 0.0000000000 \\ 0.0000000000 & 0.0000000000 & 0.0000000000 & 0.0000000000 \\ 0.0000000000 & 0.0000000000 & 0.0000000000 & 0.0000000000 \end{bmatrix}.$$

Desta forma a função $\mathbf{B}(x)$ é dada por:

$$\mathbf{B}(x) = \mathbf{U}(\mathbf{P}_1 e^{s_1 x} + \mathbf{P}_2 e^{s_2 x} + \mathbf{P}_3 e^{s_3 x} + \mathbf{P}_4 e^{s_4 x}) \mathbf{U}^T. \quad (2.43)$$

Agora para encontrarmos a parte desconhecida do vetor fluxo angular em $x = 0$ usamos a fórmula dada por (2.20) e obtemos,

$$\Psi_2(0) = B_{22}^{-1}(1) (\Psi_2(1) - B_{21}(1) \Psi_1(0)) = \begin{bmatrix} 0.4643800424 \\ 0.2991721151 \end{bmatrix} \quad (2.44)$$

onde,

$$B_{21}(1) = \begin{bmatrix} -1.146283090 & -1.420158545 \\ -0.0227039135 & 0.0203804261 \end{bmatrix} \quad (2.45)$$

$$B_{22}^{-1}(1) = \begin{bmatrix} 0.1808010560 & 0.1569557690 \\ 0.1161732926 & 0.4390556236 \end{bmatrix}. \quad (2.46)$$

Desta forma o fluxo angular de partículas em $x = 0$ é dado por:

$$\Psi(0) = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0.4643800424 \\ 0.2991721151 \end{bmatrix}. \quad (2.47)$$

Enfim, podemos calcular o fluxo angular de partículas em cada ponto da placa. Por exemplo, o fluxo angular em $x = 0.5$ e em $x = 1$ é dado por

$$\mathbf{\Psi}(0.5) = \mathbf{B}(0.5)\mathbf{\Psi}(0) = \begin{bmatrix} 0.7758009231 \\ 0.5947860961 \\ 0.2373686326 \\ 0.1295651450 \end{bmatrix}, \quad (2.48)$$

$$\mathbf{\Psi}(1) = \mathbf{B}(1)\mathbf{\Psi}(0) = \begin{bmatrix} 0.5552289161 \\ 0.3377568250 \\ -10^{-18} \\ 10^{-18} \end{bmatrix}. \quad (2.49)$$

Cumpra observar que devido a aritmética computacional que considera um número finito de casas após a vírgula, podemos notar que na equação acima, 10^{-18} é aproximadamente zero, conforme as condições de contorno nulas na direção negativa em $x_0 = 1$.

3 O MÉTODO LTS_N COM $C = 1$

Neste capítulo vamos utilizar a versão do método LTS_N discutida no capítulo 2, aplicando a decomposição de Schur apropriada para autovalores repetidos que aparecem nos problemas isotrópicos com $c = 1$. Através desta técnica, propomos nesta dissertação uma formulação LTS_N para modelar problemas isotrópicos com albedo unitário. Para isto, falaremos da influência do albedo na solução da equação de transferência radiativa, mais precisamente, sua influência na inversão da matriz $(sI - A)$. A equação de transporte que vamos analisar neste capítulo é linear, unidimensional, isotrópica, monoenergética, estacionária, com simetria azimutal:

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, \mu) + \psi(x, \mu) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \psi(x, \mu') d\mu' + Q(x, \mu). \quad (3.1)$$

Já foi mostrado por [Pazos, 1999], que a solução do método LTS_N , quando $N \rightarrow \infty$, converge para a solução de Case [Case,1960]. E ainda, que os autovalores encontrados pelo método LTS_N para a matriz \mathbf{A} são o inverso dos autovalores gerados pelo Método de Case [Case,1960]. Segundo Case, a equação acima, para o caso isotrópico, possui um conjunto de autovalores formados por um par discreto mais o intervalo $[-1, 1]$. No Método LTS_N , este intervalo gera $N - 2$ autovalores reais simétricos com módulo maior que um. Já o par de autovalores discretos gera dois autovalores cujos valores dependem do valor do albedo c e da quadratura angular utilizada, sendo que

- se $0 < c < 1$, a matriz LTS_N apresenta um par de autovalores reais simétricos e em módulo, menores que $\frac{1}{\mu_N}$.
- se $c > 1$, a matriz LTS_N apresenta um par de autovalores imaginários puros e conjugados.
- se $c = 1$, os autovalores de Case se aglutinam no infinito, logo a matriz LTS_N apresenta dois autovalores nulos.

Neste ponto devemos observar que a matriz LTS_N não é mais diagonalizável, já que a matriz apresenta autovalor duplo e nulo. A proposta desta dissertação é abordar tal problema de duas maneiras distintas. Na primeira, resolvemos um problema isotrópico com $c = 1$, gerando uma seqüência de aproximações $c_0 = 0.9$, $c_1 = 0.99, \dots$, isto é, tomando $c \rightarrow 1$. Como nosso problema é linear, a seqüência de soluções converge para a solução do problema quando $c = 1$. Na segunda abordagem do problema, vamos adaptar o método recursivo de inversão associado à decomposição de Schur para resolver problemas com autovalor duplo.

3.1 Método recursivo de inversão considerando autovalor duplo

Vamos considerar a equação de transporte isotrópica dada por (3.1) com condições de fluxo incidente conhecidas na fronteira. A aproximação S_N deste problema é dada por

$$\mu_n \frac{\partial \psi_n}{\partial x}(x) + \psi_n(x) = \frac{1}{2} \sum_{k=0}^N \psi_k(x) \omega_k + Q_n(x), \quad (3.2)$$

com $n = 1, 2, \dots, N$. Matricialmente, o problema é escrito como

$$\frac{d}{dx} \mathbf{\Psi}(x) - \mathbf{A} \mathbf{\Psi}(x) = \mathbf{Q}(x) \quad (3.3)$$

onde os elementos da matriz \mathbf{A} são calculados da seguinte maneira:

$$a(i, j) = \begin{cases} -\frac{1}{\mu_i} + \frac{\omega_j}{2\mu_i}, & \text{se } i = j \\ \frac{\omega_j}{2\mu_i}, & \text{se } i \neq j \end{cases} \quad (3.4)$$

sendo ω_j e μ_i os pesos e as raízes dos polinômios de Legendre. Os vetores envolvidos são dados por

$$\mathbf{Q}(x) = \left[\frac{Q_1(x)}{\mu_1}, \dots, \frac{Q_N(x)}{\mu_N} \right]^T \quad (3.5)$$

e

$$\Psi(x) = [\Psi_1(x), \dots, \Psi_N(x)]^T. \quad (3.6)$$

Conforme já discutido, a solução deste problema é dada por

$$\Psi(x) = \mathbf{B}(x)\Psi(0) + \mathbf{B}(x) * \mathbf{Q}(x), \quad (3.7)$$

onde

$$\mathbf{B}(x) = \mathcal{L}^{-1} [(s\mathbf{I} - \mathbf{A})^{-1}]. \quad (3.8)$$

Para encontrarmos a solução $\Psi(x)$ da equação matricial apresentada acima, primeiramente temos que calcular a inversa da matriz $(s\mathbf{I} - \mathbf{A})$. Neste momento é que surgem nossos problemas. Com albedo unitário, segundo Case [Case,1960], temos dois autovalores que se aglutinam no infinito, e, tendo em vista que os autovalores do método LTS_N são calculados como o inverso dos autovalores de Case, os autovalores do método LTS_N tendem a zero. O autovalor zero não gera um par de autovetores linearmente independentes, e portanto, a matriz \mathbf{A} não será diagonalizável. Como faremos para invertê-la?

Uma maneira de obtermos a solução exata da equação é aplicar expansão de Heaviside para inversão da transformada de Laplace. Para tanto, vamos usar a decomposição de Schur para inversão da matriz $(s\mathbf{I} - \mathbf{A})$ e expansão de Heaviside, considerando autovalores duplos para inversão da transformada de Laplace.

Iniciaremos retomando o método de recorrência associado a decomposição de Schur apresentado no capítulo anterior, realizando as devidas modi-

ficações para $c = 1$. Partiremos da fórmula recursiva para encontrar a adjunta da matriz S_N dada por

$$\text{Adj}(\mathbf{S}_k) = \mathbf{S}_k^{-1} \det(\mathbf{S}_k) = \begin{bmatrix} (s - t_{kk})\text{Adj}(\mathbf{S}_{k-1}) & \text{Adj}(\mathbf{S}_{k-1})\mathbf{V} \\ [0 \quad \dots \quad 0] & \det(\mathbf{S}_{k-1}) \end{bmatrix} \quad (3.9)$$

onde

$$\det(\mathbf{S}_k) = \prod_{i=1}^N (s - t_{ii}),$$

com $k = 2, \dots, N$.

Consideraremos, deste ponto em diante, t_0 a raiz dupla da equação acima. Neste caso, o teorema de Schur garante que se temos uma função racional do tipo

$$F(s) = \frac{P(s)}{Q(s)}$$

onde o grau de $P(s)$ é menor que o grau de $Q(s)$ e $Q(s) = 0$ possui uma raiz repetida t_0 de multiplicidade m e outras $N - m$ raízes distintas t_1, t_2, \dots, t_{N-m} , a expansão de Heaviside tem a forma:

$$\mathcal{L}^{-1}[F(s)] = e^{t_0 x} \left[\frac{A_1 x^{m-1}}{(m-1)!} + \frac{A_2 x^{m-2}}{(m-2)!} + \dots + A_m \right] + \sum_{i=1}^{N-m} P_i e^{t_i x}, \quad (3.10)$$

onde

$$A_k = \lim_{s \rightarrow t_0} \frac{1}{(k-1)!} \frac{d^{k-1}}{ds^{k-1}} [(s - t_0)^m F(s)], \quad k = 1, \dots, m \quad (3.11)$$

e

$$P_i = \frac{P(t_i)}{\frac{d}{ds}(Q(s))|_{s=t_{ii}}}. \quad (3.12)$$

Assim, aplicando esta técnica para uma raiz dupla e $N-2$ raízes simples, temos:

$$\begin{aligned}\mathcal{L}^{-1}(\mathbf{S}_N^{-1}) &= \mathcal{L}^{-1}\left(\frac{\text{Adj}(\mathbf{S}_N)}{\det(\mathbf{S}_N)}\right) \\ &= \left(\sum_{i=1}^{N-2} \frac{\text{Adj}(\mathbf{S}_N)}{\frac{d}{ds}\det(\mathbf{S}_N)} \Big|_{s=t_{ii}} e^{t_{ii}x}\right) + (A_1x + A_2)e^{t_0x}\end{aligned}\quad (3.13)$$

onde

$$A_1 = \lim_{s \rightarrow t_0} (s - t_0)^2 \frac{\text{Adj}(\mathbf{S}_N)}{\det(\mathbf{S}_N)} = \lim_{s \rightarrow t_0} \frac{\text{Adj}(\mathbf{S}_N)}{\prod_{i=1}^{N-2} (s - t_{ii})} \quad (3.14)$$

$$A_2 = \lim_{s \rightarrow t_0} \frac{d}{ds} \left(\frac{\text{Adj}(\mathbf{S}_N)}{\prod_{i=1}^{N-2} (s - t_{ii})} \right). \quad (3.15)$$

Calculando a derivada indicada acima, temos:

$$\begin{aligned}\frac{d}{ds} \left(\frac{\text{Adj}(\mathbf{S}_N)}{\prod_{i=1}^{N-2} (s - t_{ii})} \right) &= \frac{\prod_{i=1}^{N-2} (s - t_{ii}) \frac{d}{ds} \text{Adj}(\mathbf{S}_N) - \text{Adj}(\mathbf{S}_N) \frac{d}{ds} \prod_{i=1}^{N-2} (s - t_{ii})}{\left(\prod_{i=1}^{N-2} (s - t_{ii}) \right)^2} \\ &= \frac{1}{\prod_{i=1}^{N-2} (s - t_{ii})} \left[\frac{d}{ds} \text{Adj}(\mathbf{S}_N) - \text{Adj}(\mathbf{S}_N) \left(\frac{1}{s - t_{11}} + \frac{1}{s - t_{22}} + \dots + \frac{1}{s - t_{N-2}} \right) \right]\end{aligned}$$

Nesta equação aparece a derivada da matriz adjunta, o que podemos calcular derivando a equação 3.9:

$$\frac{d}{ds}\text{Adj}(\mathbf{S}_k) = \begin{bmatrix} (s - t_{kk})\frac{d}{ds}\text{Adj}(\mathbf{S}_{k-1}) + \text{Adj}(\mathbf{S}_{k-1}) & \frac{d}{ds}\text{Adj}(\mathbf{S}_{k-1})\mathbf{V} \\ [0 \quad \dots \quad 0] & \frac{d}{ds}\det(\mathbf{S}_{k-1}) \end{bmatrix}. \quad (3.16)$$

Salientamos que são conhecidas as matrizes para $k = 2$, a saber:

$$\text{Adj}(\mathbf{S}_2) = \begin{bmatrix} s - t_{22} & t_{12} \\ 0 & s - t_{11} \end{bmatrix}$$

e

$$\frac{d}{ds}\text{Adj}(\mathbf{S}_2) = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix},$$

portanto, criamos uma recorrência para o cálculo das adjuntas e suas derivadas. Desta forma, calculamos o coeficiente A_2 gerado pela expansão de Heaviside e conseqüentemente fica calculada a transformada inversa de Laplace, indicada na equação (3.16).

Para exemplificarmos o procedimento vamos resolver um problema, considerando $N = 4$.

3.1.1 Exemplificando com $N = 4$

Nesta subseção vamos usar $N = 4$ para encontrar a solução do seguinte problema de transporte:

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, \mu) + \psi(x, \mu) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \psi(x, \mu') d\mu' \quad (3.17)$$

com condições de contorno

$$\psi(0, \mu) = 1, \text{ se } \mu > 0 \quad \text{e} \quad \psi(1, \mu) = 0, \text{ se } \mu < 0. \quad (3.18)$$

É sabido que as raízes e pesos da quadratura Gaussiana de ordem 4 são dados por:

$$\mu_1 = -\mu_4 = 0.8611363116$$

$$\mu_2 = -\mu_3 = 0.3399810436$$

$$\omega_1 = \omega_4 = 0.3478548451$$

$$\omega_3 = \omega_3 = 0.6521451549$$

A equação S_4 associada a este problema é:

$$\frac{d}{dx} \begin{bmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \\ \psi_3(x) \\ \psi_4(x) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} -0.95928202 & 0.37865385 & 0.37865385 & 0.20197432 \\ 0.51157977 & -1.98224999 & 0.9590904657 & 0.51157976 \\ -0.5115797655 & -0.95909047 & 1.98224999 & -0.51157977 \\ -0.20197432 & -0.37865385 & -0.37865385 & 0.95928202 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \\ \psi_3(x) \\ \psi_4(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix}$$

Agora devemos encontrar a função $\mathbf{B}(x)$. Aqui, vamos usar a fórmula recursiva de inversão. Assim, procedemos à decomposição de Schur $\mathbf{A} = \mathbf{UTU}^T$, onde

$$\mathbf{T} = \begin{bmatrix} -1.97202660 & 0.79772404 & 0.95775417 & 0.86327503 \\ 0.00000000 & 1.6317842610 \times 10^{-40} & 1.43800942 & 0.97194457 \\ 0.00000000 & -1.80537533 \times 10^{-40} & 1.63178426 \times 10^{-40} & -0.38924947 \\ 0.00000000 & 0.00000000 & 0.00000000 & 1.97202659 \end{bmatrix}$$

e

$$\mathbf{U} = \begin{bmatrix} 0.41775061 & -0.70834833 & 0.55248452 & 0.13597031 \\ -0.88504972 & -0.18133965 & 0.39670837 & 0.16255888 \\ -0.17460348 & -0.46872931 & -0.26615013 & -0.82399671 \\ -0.10809741 & -0.49563234 & -0.68304277 & 0.52546752 \end{bmatrix}.$$

Os autovalores de \mathbf{A} são dados pela diagonal principal de \mathbf{T} e vamos chamá-los de $s_1 = -1.97202660$, $s_2 = 1.97202659$ e $s_3 = s_4 = 0$. Salientamos que s_3 possui multiplicidade dupla.

Utilizando o mesmo procedimento aplicado na seção 2.4, calculamos as matrizes adjuntas em s_1 , s_2 e s_3 :

$$\text{Adj}(\mathbf{S}_4(s_1)) = \begin{bmatrix} -15.33798462 & 6.204520274 & 2.924838906 & 2.116842988 \\ 0 & 10^{-9} & 10^{-10} & 10^{-10} \\ 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

$$\text{Adj}(\mathbf{S}_4(s_2)) = \begin{bmatrix} 10^{-10} & 10^{-10} & 10^{-10} & .704475228 \\ 0 & 10^{-9} & 10^{-10} & 5.35190719 \\ 0 & 0 & 10^{-9} & -3.027495894 \\ 0 & 0 & 0 & 15.33798462 \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} \text{Adj}(\mathbf{S}_4(s_3)) &= \begin{bmatrix} -5.25095440 \times 10^{-80} & 2.567013690 \times 10^{-40} & -2.262180092 & -0.4465215677 \\ 0 & 6.345827680 \times 10^{-40} & -5.592258858 & -1.103830858 \\ 0 & 0 & 6.345827680 \times 10^{-40} & 1.252574423 \times 10^{-40} \\ 0 & 0 & 0 & 5.250954403 \times 10^{-80} \end{bmatrix} \\ &= \text{Adj}(\mathbf{S}_4(s_4)) \end{aligned}$$

De posse das adjuntas, calculamos as derivadas destas matrizes em s_3 . Esta matriz também é calculada de forma iterativa, usando a fórmula (3.16). Para iniciar o processo iterativo temos,

$$\frac{d}{ds} \text{Adj}(\mathbf{S}_2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \quad \text{e} \quad \text{Adj}(\mathbf{S}_2)(0) = \begin{pmatrix} -1.6317842 \times 10^{-40} & 0.79772403 \\ 0 & 1.97202659 \end{pmatrix}.$$

Agora, para obtermos a derivada da matriz $\text{Adj}(\mathbf{S}_3(s_3))$, primeiramente precisamos de:

- $(s_3 - t_{33}) \frac{d}{ds} \text{Adj}(\mathbf{S}_2) + \text{Adj}(\mathbf{S}_2) = \begin{pmatrix} -1.63178426 \times 10^{-40} & 0.79772403 \\ 0 & 1.97202659 \end{pmatrix},$
- $\frac{d}{ds} \text{Adj}(\mathbf{S}_2(0)) \cdot \mathbf{V} = \begin{pmatrix} 0.95775417 \\ 1.43800942 \end{pmatrix},$
- $\frac{d}{ds} \det(\mathbf{S}_2(0)) = \frac{d}{ds} (s - s_1)(s - s_2) = (s - s_1) + (s - s_2) = 1.97202659.$

Desta forma,

$$\frac{d}{ds} \text{Adj}(\mathbf{S}_3(0)) = \begin{pmatrix} -1.6317842 \times 10^{-40} & 0.79772403 & 0.957754168 \\ 0 & 1.97202659 & 1.43800942 \\ 0 & 0 & 1.97202659 \end{pmatrix}.$$

Para procedermos mais uma iteração e calculamos a derivada da matriz adjunta de quarta ordem, observamos que,

- $\text{Adj}(\mathbf{S}_3(0)) = \begin{bmatrix} 2.66271987 \times 10^{-80} & -1.30171352 \times 10^{-40} & 1.14713467 \\ 0 & -3.21792195 \times 10^{-40} & 2.83579282 \\ 0 & 0 & 3.2179219582 \times 10^{-40} \end{bmatrix},$

- $(0 - t_{44}) \frac{d}{ds} \text{Adj}(\mathbf{S}_3(0)) + \text{Adj}(\mathbf{S}_3(0)) = (0 - 1.97202659) \frac{d}{ds} \text{Adj}(\mathbf{S}_3(0)) + \text{Adj}(\mathbf{S}_3(0)) =$
 $= \begin{bmatrix} 3.21792195 \times 10^{-40} & -1.57313301 & -0.74158201 \\ 0 & -3.88888889 & -1.51851618 \times 10^{-36} \\ 0 & 0 & -3.88888889 \end{bmatrix},$

- $\frac{d}{ds} \text{Adj}(\mathbf{S}_3(0)) \mathbf{V} = \begin{pmatrix} 0.40253824 \\ 1.35695614 \\ -0.76761031 \end{pmatrix}$

- $\frac{d}{ds} \det(\mathbf{S}_3(0)) = 0.$

Logo,

$$\text{Adj}(\mathbf{S}_4(0)) = \begin{bmatrix} 3.21792. \times 10^{-40} & -1.57313 & -0.741582 & 0.402538 \\ 0 & -3.88889 & 0 & 1.35696 \\ 0 & 0 & -3.88889 & -0.76761 \\ 0 & 0 & 0 & -6.43584. \times 10^{-40} \end{bmatrix}.$$

Agora, usando as fórmulas (3.13), (3.14) e (3.15) temos:

$$\mathbf{P}_1 = \frac{\text{Adj}(\mathbf{S}_N(s_1))}{\frac{d}{ds} \det(\mathbf{S}_N)|_{s=s_1}} = \begin{bmatrix} 1.0000000000 & -0.40451992 & -0.19069252 & -0.13801311 \\ 0 & 0. \times 10^{-37} & 0. \times 10^{-37} & 0. \times 10^{-37} \\ 0 & 0 & 0. \times 10^{-36} & 0. \times 10^{-37} \\ 0 & 0 & 0 & 0. \times 10^{-37} \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{P}_2 = \frac{\text{Adj}(\mathbf{S}_N(s_2))}{\frac{d}{ds} \det(\mathbf{S}_N)|_{s=s_2}} = \begin{bmatrix} 0. \times 10^{-37} & 0. \times 10^{-37} & 0. \times 10^{-37} & 0.24152295 \\ 0 & 0. \times 10^{-37} & 0. \times 10^{-37} & 0.34893158 \\ 0 & 0 & 0. \times 10^{-37} & -0.19738551 \\ 0 & 0 & 0 & 1.00000000 \end{bmatrix}$$

$$\mathbf{A}_1 = \frac{\text{Adj}(\mathbf{S}_4(0))}{(0-t_{11})(0-t_{44})} = \begin{bmatrix} 1.3 \times 10^{-80} & -6.6 \times 10^{-41} & 0.58170345 & 0.11481983 \\ 0 & -1.6 \times 10^{-40} & 1.4380094 & 0.28384222 \\ 0 & 0 & -1.6 \times 10^{-40} & -3.2 \times 10^{-41} \\ 0 & 0 & 0 & -1.3 \times 10^{-80} \end{bmatrix}$$

$$\begin{aligned} \mathbf{A}_2 &= \frac{1}{(0-t_{11})(0-t_{44})} \left(\frac{d}{ds} \text{Adj}(\mathbf{S}_4(0)) - \text{Adj}(\mathbf{S}_4(0)) \left(\frac{1}{0-t_{11}} + \frac{1}{0-t_{44}} \right) \right) \\ &= \begin{bmatrix} -8.2746565 \times 10^{-41} & 0.40451992 & 0.19069252 & -0.10350983 \\ 0 & 1.0000000000 & 0. \times 10^{-36} & -0.34893158 \\ 0 & 0 & 1.0000000000 & 0.19738551 \\ 0 & 0 & 0 & 1.6549313 \times 10^{-40} \end{bmatrix}. \end{aligned}$$

Desta forma a função $\mathbf{B}(x)$ é dada por:

$$\mathbf{B}(x) = \mathbf{U}(\mathbf{P}_1 e^{s_1 x} + \mathbf{P}_2 e^{s_2 x} + \mathbf{A}_1 x + \mathbf{A}_2) \mathbf{U}^T. \quad (3.19)$$

Agora, para encontrarmos a parte desconhecida do vetor fluxo angular em $x = 0$, observamos que

$$\Psi_2(0) = B_{22}^{-1}(1) (\Psi_2(1) - B_{21}(1)\Psi_1(0)) = \begin{bmatrix} 0.57614733 \\ 0.37606635 \end{bmatrix} \quad (3.20)$$

onde,

$$B_{21}(1) = \begin{bmatrix} -1.1839455 & -1.4518441 \\ -0.0074326385 & 0.046527089 \end{bmatrix} \quad (3.21)$$

$$B_{22}^{-1}(1) = \begin{bmatrix} 0.2215862770 & 0.2022663968 \\ 0.1497106698 & 0.4742229801 \end{bmatrix}. \quad (3.22)$$

Desta forma o fluxo angular de partículas em $x = 0$ é dado por:

$$\Psi(0) = \begin{bmatrix} 1 \\ 1 \\ 0.57614733 \\ 0.37606635 \end{bmatrix}. \quad (3.23)$$

Agora podemos calcular o fluxo angular de partículas em cada ponto da placa. Por exemplo, o fluxo angular em $x = 0.5$ e em $x = 1$ é dado por

$$\Psi(0.5) = \mathbf{B}(0.5)\Psi(0) = \begin{bmatrix} 0.82950849 \\ 0.68822669 \\ 0.31177331 \\ 0.17049151 \end{bmatrix} \quad (3.24)$$

$$\mathbf{\Psi}(1) = \mathbf{B}(1)\mathbf{\Psi}(0) = \begin{bmatrix} 0.62393365 \\ 0.42385267 \\ 0. \times 10^{-34} \\ 0. \times 10^{-34} \end{bmatrix}. \quad (3.25)$$

4 RESULTADOS NUMÉRICOS

Este capítulo é destinado para comprovar a eficácia do recursivo associado à decomposição de Schur apresentado no capítulo 3, quando a matriz \mathbf{A} é não diagonalizável, isto é, quando $c = 1$. Para isto, fazemos uma comparação numérica entre uma seqüência de soluções de problemas com $c \rightarrow 1^-$ e a solução obtida pelo método de Schur.

4.1 Diagonalização x Schur

Primeiramente, para mostrar a eficiência do método recursivo de inversão da matriz LTS_N para nosso problema, faremos uma comparação entre os resultados obtidos pelo método proposto com os resultados obtidos pelo método da diagonalização para uma seqüência de problemas nos quais $c \rightarrow 1^-$. As tabelas a seguir, mostram os resultados obtidos para o fluxo escalar de partículas definido como

$$\phi(x) = \int_{-1}^1 \psi(x, \mu') d\mu'. \quad (4.1)$$

Inicialmente consideraremos o problema em uma placa plana de espessura 10mfp, sem fonte de energia interna, considerando $N = 40$ e com condições de contorno dadas por $\Psi(0) = e^{5\mu}$ se $\mu > 0$ e $\Psi(10) = 0$ se $\mu < 0$.

$N = 40$	Cálculo do fluxo escalar $\phi(x)$		
<i>Diagonalização</i> $c \rightarrow 1$	$x = 0.0$	$x = 5.0$	$x = 10.0$
0.9	51.34780897	5.53224781	0.18548298
0.99	65.50425830	35.78563069	3.13120558
0.999	69.48355274	51.76743590	5.15870712
0.9999	69.99299430	54.02127584	5.45664366
0.99999	70.04547065	54.25586008	5.48779002
0.999999	70.05073419	54.27941421	5.49091875
0.9999999	70.05126070	54.28177059	5.49123177
0.99999999	70.05131335	54.28200624	5.49126307
0.999999999	70.05131862	54.28202980	5.49126620
0.9999999999	70.05131915	54.28203215	5.49126651
0.99999999999	70.05131920	54.28203239	5.49126654
0.999999999999	70.05131921	54.28203242	5.49126655
Schur com $c = 1$	70.05131921	54.28203242	5.49126655

Tabela 4.1: Fluxo escalar $\phi(x)$, $Q(x) = 0$, $x_0 = 10$, $\Psi(0) = e^{5\mu}$ e $\Psi(10) = 0$

Analisando detalhadamente a tabela acima, vemos que os resultados obtidos quando $c = 0.999999999999$ são idênticos ao método recursivo em nove algarismos significativos, o que é de grande valia.

Dando seguimento à nossa simulação, consideramos a mesma espessura de placa $x_0 = 10$ e a mesma ordem de quadratura $N = 40$; porém, alteramos nossas condições de contorno para $\Psi(0) = 1$ se $\mu > 0$ e $\Psi(10) = 0$ se $\mu < 0$ e nossa fonte para $Q(x) = e^{-x}$. Seguem os resultados obtidos.

$N = 40$	Cálculo do fluxo escalar $\phi(x)$		
<i>Diagonalização</i> $c \rightarrow 1$	$x = 0.0$	$x = 5.0$	$x = 10.0$
0.9	3.40806693	0.68722550	0.02380219
0.99	4.74382445	4.00787329	0.35256251
0.999	5.14647380	5.73823995	0.57394716
0.9999	5.19862594	5.98190107	0.60637650
0.99999	5.20400483	6.00725798	0.60976554
0.999999	5.20454442	6.00980398	0.61010596
0.9999999	5.20459839	6.01005868	0.61014002
0.99999999	5.20460379	6.01008415	0.61014343
0.999999999	5.20460433	6.01008670	0.61014377
0.9999999999	5.20460438	6.01008696	0.61014380
0.99999999999	5.20460439	6.01008698	0.61014380
0.999999999999	5.20460439	6.01008698	0.61014381
Schur com $c = 1$	5.20460439	6.01008698	0.61014381

Tabela 4.2: Fluxo escalar $\phi(x)$, $Q(x) = e^{-x}$, $x_0 = 10$, $\Psi(0) = 1$ e $\Psi(10) = 0$

Testamos ainda este método aumentando-se a ordem de quadratura e verificamos que o método em questão converge com muita rapidez, independentemente da fonte utilizada. Nas tabelas seguintes, observe a convergência da solução.

Cálculo do fluxo escalar $\phi(x)$					
	$c = 1$				$c = 0.9999999$
x	$N = 10$	$N = 40$	$N = 70$	$N = 100$	$N = 100$
0.0	1.51549069	1.51623752	1.51627492	1.51628412	1.51628400
0.1	1.39676338	1.38910711	1.38908617	1.38913029	1.38913013
0.2	1.29017878	1.28571691	1.28576504	1.28575328	1.28575311
0.3	1.19046011	1.18837128	1.18835121	1.18834507	1.18834489
0.4	1.09442683	1.09363933	1.09362215	1.09362003	1.09361985
0.5	0.99999999	0.99999999	1.00000000	1.00000000	0.99999982
0.6	0.90557316	0.90636067	0.90637785	0.90637997	0.90637979
0.7	0.80953989	0.81162872	0.81164879	0.81165493	0.81165477
0.8	0.70982122	0.71428309	0.71423496	0.71424671	0.71424657
0.9	0.60323662	0.61089289	0.61091383	0.61086971	0.61086959
1.0	0.48450932	0.48376248	0.48372507	0.48371588	0.48371578

Tabela 4.3: Fluxo escalar $\phi(x)$, $Q(x) = 0$, $x_0 = 1$, $\Psi(0) = 1$ e $\Psi(1) = 0$

Cálculo do fluxo escalar $\phi(x)$					
	$c = 1$				$c = 0.9999999$
x	$N = 10$	$N = 40$	$N = 70$	$N = 100$	$N = 100$
0.0	5.19358567	5.20460439	5.20508084	5.20519789	5.20519723
0.1	8.54385652	8.55841347	8.55911805	8.55929134	8.55928967
0.2	8.61461636	8.62936838	8.62999860	8.63015345	8.63011511
0.3	7.93469206	7.94776616	7.94833276	7.94847197	7.94846923
0.4	7.00940561	7.02106230	7.02156706	7.02169108	7.02168819
0.5	5.99983801	6.01008699	6.01053031	6.01063923	6.01063640
0.6	4.96056458	4.96940212	4.96978411	4.96987795	4.96987535
0.7	3.91039489	3.91782273	3.91814343	3.91822221	3.91822000
0.8	2.85491845	2.86095645	2.86121597	2.86127972	2.86127803
0.9	1.79038678	1.79481523	1.79501433	1.79506325	1.79506215
1.0	0.6093293	0.61014381	0.61017921	0.61018790	0.61018753

Tabela 4.4: Fluxo escalar $\phi(x)$, $Q(x) = e^{-x}$, $x_0 = 1$, $\Psi(0) = 1$ e $\Psi(1) = 0$

O computador utilizado nos cálculos apresentados nesta dissertação, tem as seguintes características: HP Intel(R), CPU T2500, 2.00 GHz (Core Duo) e 1.00 Gb de memória RAM. E, a implementação dos algoritmos foi realizada em linguagem de programação Intel Fortran- 90.

A seguir, exploramos a performance de nossa simulação, registrando o tempo computacional, em segundos, utilizado. Consideramos, a título de exemplificação, o seguinte problema: placa de espessura $x_0 = 10$, ordem de quadratura $N = 100$, condições de contorno para $\Psi(0) = 1$ se $\mu > 0$ e $\Psi(10) = 0$ se $\mu < 0$ e fonte $Q(x) = 0$. Segue os resultados obtidos.

N	Cálculo do fluxo escalar $\phi(x)$			Tempo computacional
	$x = 0.0$	$x = 5.0$	$x = 10.0$	segundos
10	0.949428327978341	0.4999999999999995	$5.057167202165185 \times 10^{-2}$	0.0000000
30	0.949445813541627	0.4999999999999993	$5.055418645836150 \times 10^{-2}$	6.2500000×10^{-2}
50	0.949447141144080	0.5000000000000000	$5.055285885592073 \times 10^{-2}$	0.2343750
70	0.949447503374794	0.5000000000000000	$5.055249662520579 \times 10^{-2}$	0.5625000
90	0.949447651808242	0.4999999999999997	$5.055234819175289 \times 10^{-2}$	1.406250
100	0.949447694905901	0.4999999999999991	$5.055230509408352 \times 10^{-2}$	2.093750

Tabela 4.5: Fluxo escalar $\phi(x)$, $Q(x) = 0$, $x_0 = 10$, $\Psi(0) = 1$ e $\Psi(10) = 0$

Cabe observar, que a escolha da fonte externa de partículas não causa modificações relevantes no tempo computacional, pois este, é diretamente ligado à quantidade de inversões matriciais presentes no problema.

4.2 Aplicação na física

Nesta seção mostraremos uma aplicação do método LTS_N em um problema físico. Para tanto, aplicamos este método na resolução de um problema de transferência de calor radiativa com $c = 1$ e fonte de energia interna em uma placa plana com fronteiras negras em $\tau = 0$ e $\tau = \tau_0$. No trabalho de [Vargas et al., 2007],

este problema foi resolvido considerando uma seqüência de valores $c \rightarrow 1$. Aqui, usamos o método recursivo associado à decomposição de Schur que apresentamos no capítulo 3.

Iniciamos apresentando a transformação de Özisik [Ozisik, 1973]. Consideremos a equação de conservação de energia no estado estacionário:

$$\frac{d}{d\tau}q^r(\tau) = \frac{g(\tau)}{\beta} \quad (4.2)$$

onde τ é a variável ótica, $0 \leq \tau \leq \tau_0$, $g(\tau)$ é a fonte de energia interna e β é o coeficiente de extinção. Por outro lado, sabemos que o fluxo radiativo se relaciona com a intensidade de radiação $I(\tau, \mu)$ pela equação:

$$q^r(\tau) = 2\pi \int_{-1}^1 I(\tau, \mu)\mu d\mu \quad (4.3)$$

Consideremos a equação de transferência radiativa num plano paralelo com simetria azimutal para a radiação:

$$\mu \frac{\partial I(\tau, \mu)}{\partial \tau} + I(\tau, \mu) = (1 - c) \frac{n^2 \sigma T^4(\tau)}{\pi} + \frac{c}{2} \int_{-1}^1 I(\tau, \mu') d\mu', \quad (4.4)$$

onde $0 \leq \tau \leq \tau_0$, $-1 \leq \mu \leq 1$, n é o índice de refração, c é o albedo e σ é a constante de Stefan-Boltzmann ($\sigma = 5,67 \cdot 10^{-8} \frac{W}{m^2 K^4}$). Consideraremos para fronteiras negras as seguintes condições:

$$\begin{aligned} I(0, \mu) &= \frac{n^2 \sigma T_1^4(0)}{\pi} \equiv f_1, \quad \mu > 0 \\ I(\tau_0, \mu) &= \frac{n^2 \sigma T_2^4(\tau_0)}{\pi} \equiv f_2, \quad \mu < 0, \end{aligned} \quad (4.5)$$

onde T_1 e T_2 são respectivamente as temperaturas constantes em $\tau = 0$ e $\tau = \tau_0$.

Aplicando $2\pi \int_{-1}^1 d\mu$ na equação de transferência radiativa, temos:

$$2\pi \int_{-1}^1 \left(\frac{\partial I(\tau, \mu)}{\partial \tau} \mu + I(\tau, \mu) \right) d\mu = 2\pi \int_{-1}^1 \left((1-c) \frac{n^2 \sigma T^4(\tau)}{\pi} + \frac{c}{2} \int_{-1}^1 I(\tau, \mu') d\mu' \right) d\mu$$

$$2\pi \int_{-1}^1 \frac{\partial I(\tau, \mu)}{\partial \tau} \mu d\mu + 2\pi \int_{-1}^1 I(\tau, \mu) d\mu = 2\pi \int_{-1}^1 (1-c) \frac{n^2 \sigma T^4(\tau)}{\pi} d\mu + 2\pi \int_{-1}^1 \left(\frac{c}{2} \int_{-1}^1 I(\tau, \mu') d\mu' \right) d\mu.$$

Agora, utilizando a equação de conservação de energia (4.2) e a equação (4.3), obtemos:

$$\frac{g(\tau)}{4\pi\beta} + \frac{1}{2} \int_{-1}^1 I(\tau, \mu') d\mu' = \frac{n^2 \sigma T^4(\tau)}{\pi}. \quad (4.6)$$

Observe que nós transformamos a equação de transferência radiativa, numa forma apropriada para $c = 1$. Substituindo esta equação em 4.4, nós eliminamos o termo que envolvia temperatura e encontramos:

$$\mu \frac{\partial I(\tau, \mu)}{\partial \tau} + I(\tau, \mu) = \frac{g(\tau)}{4\pi\beta} + \frac{1}{2} \int_{-1}^1 I(\tau, \mu') d\mu', \quad (4.7)$$

onde $0 \leq \tau \leq \tau_0$, $-1 \leq \mu \leq 1$. As condições de fronteira são:

$$I(0, \mu) = f_1, \quad \mu > 0 \quad (4.8)$$

$$I(\tau_0, \mu) = f_2, \quad \mu < 0.$$

Observamos que a equação encontrada é uma equação de transferência radiativa com $c = 1$ e fonte não-homogênea. Esta equação, segundo [Vargas et al., 2007], já foi resolvida pela técnica de expansão modo-normal por [Kriese and Siewert, 1970], [Ferziger e Simons, 1966] e [Beach et al., 1971], [Özisik, 1973].

A equação (4.7), juntamente com as condições de fronteira, está pronta para ser resolvida pelo método LTS_N , a aproximação S_N para esta equação é dada por:

$$\mu_k \frac{\partial I_k(\tau)}{\partial \tau} + I_k(\tau) = Q(\tau) + \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \omega_i I_i(\tau), \quad \text{com } k = 1, 2, \dots, N \quad (4.9)$$

$$I_k(0) = f_1, \quad k = 1, 2, \dots, \frac{N}{2}$$

$$I_{N-k-1}(\tau_0) = f_2, \quad k = 1, 2, \dots, \frac{N}{2},$$

onde $Q(\tau) = \frac{g(\tau)}{4\pi\beta}$ e $I_k(\tau) = I(\tau, \mu_k)$, μ_k são as raízes dos polinômios de Legendre de N-ésimo grau, ω_k são os respectivos pesos da quadratura Gaussiana de ordem N . Desta forma, aplicamos o método LTS_N . Para ilustrar a potencialidade de nossa metodologia, resolvemos o problema de transferência radiativa para obter a densidade de radiação $\rho(\tau)$,

$$\rho(\tau) = \int_{-1}^1 I(\tau, \mu) d\mu \approx \sum_{i=1}^N I_i(\tau) w_i, \quad (4.10)$$

para $N = 300$, assumindo a fonte polinomial $Q(\tau) = \tau^2 + \tau$, condições de fronteira $f_1 = f_2 = 0$ e espessura $\tau_0 = 1$. Comparamos nossos resultados com os apresentados por [Vargas et al., 2007], conforme a tabela abaixo:

Simulação para a densidade de radiação							
	[Vargas et al, 2007] com $c \rightarrow 1$						Schur com $c = 1$
τ/τ_0	0.9	0.99	0.999	0.9999	0.99999	0.999999	1
0.00	0.285500	0.330186	0.335367	0.335894	0.335946	0.335952	0.335952
0.05	0.338651	0.391608	0.397764	0.398389	0.398452	0.398458	0.398459
0.10	0.386120	0.445274	0.452149	0.452847	0.452917	0.452924	0.452925
0.15	0.430224	0.494662	0.502147	0.502908	0.502984	0.502992	0.502992
0.20	0.470262	0.539249	0.547260	0.548074	0.548156	0.548164	0.548165
0.25	0.505464	0.578315	0.586771	0.587630	0.587716	0.587725	0.587726
0.30	0.535160	0.611195	0.620018	0.620914	0.621004	0.621013	0.621014
0.35	0.558808	0.637338	0.646448	0.647374	0.647466	0.647476	0.647477
0.40	0.575992	0.656316	0.665632	0.666579	0.666674	0.666683	0.666684
0.45	0.586419	0.667825	0.677265	0.678224	0.678320	0.678330	0.678336
0.50	0.589914	0.671681	0.681163	0.682126	0.682222	0.682232	0.682233
0.55	0.586419	0.667825	0.677265	0.678224	0.678320	0.678330	0.678331
0.60	0.575992	0.656316	0.665632	0.666579	0.666674	0.666683	0.666684
0.65	0.558808	0.637338	0.646448	0.647374	0.647466	0.647476	0.647477
0.70	0.535160	0.611195	0.620018	0.620914	0.621004	0.621013	0.621014
0.75	0.505464	0.578315	0.586771	0.587630	0.587716	0.587725	0.587726
0.80	0.470262	0.539249	0.547260	0.548074	0.548156	0.548164	0.548165
0.85	0.430224	0.494662	0.502147	0.502908	0.502984	0.502992	0.502992
0.90	0.386120	0.445274	0.452149	0.452847	0.452917	0.452924	0.452925
0.95	0.338651	0.391608	0.397764	0.398389	0.398452	0.398458	0.398459
1.00	0.285600	0.330186	0.335367	0.335894	0.335946	0.335951	0.335952

Tabela 4.6: Densidade radiação, $N = 300$, $Q(\tau) = \tau^2 + \tau$, $f_1 = f_2 = 0$ e $\tau_0 = 1$

Pelos resultados encontrados na tabela acima, vemos que com $c = 0.999999$ temos uma ótima aproximação. Mantendo a mesma ordem de quadratura, apresentamos ainda comparações para a solução da densidade de radiação $\rho(\tau)$ para outros dois problemas. O primeiro problema é caracterizado por $Q(\tau) = f_2 = 0$ e

$f_1 = \frac{1}{2}$ e o segundo, por $Q(\tau) = f_1 = f_2 = \frac{1}{8}$. Nas tabelas a seguir, $\rho_1(\tau)$ e $\rho_2(\tau)$ são a densidade de radiação para os problemas 1 e 2, respectivamente.

τ/τ_0	$\rho_1(\tau)$		$\rho_2(\tau)$	
	Solução de Case	LTS_{300}	Solução de Case	LTS_{300}
0	0.611433	0.611431	0.321694	0.321693
0.1	0.584385	0.584370	0.332147	0.332159
0.2	0.561901	0.561903	0.337843	0.337840
0.3	0.540750	0.540751	0.341455	0.341452
0.4	0.520239	0.520239	0.343495	0.343493
0.5	0.500000	0.500000	0.344157	0.344155

Tabela 4.7: Simulação para uma placa de espessura ótica $\tau_0 = 0.2$

τ/τ_0	$\rho_1(\tau)$		$\rho_2(\tau)$	
	Solução de Case	LTS_{300}	Solução de Case	LTS_{300}
0	0.758146	0.758146	0.516842	0.516841
0.1	0.694563	0.694564	0.600637	0.600634
0.2	0.642872	0.642873	0.647999	0.647997
0.3	0.594170	0.594170	0.678718	0.678715
0.4	0.546809	0.546809	0.696308	0.696306
0.5	0.500000	0.500000	0.702056	0.702053

Tabela 4.8: Simulação para uma placa de espessura ótica $\tau_0 = 1.0$

τ/τ_0	$\rho_1(\tau)$		$\rho_2(\tau)$	
	Solução de Case	LTS_{300}	Solução de Case	LTS_{300}
0	0.830791	0.830790	0.738729	0.738728
0.1	0.750879	0.750880	0.977575	0.977571
0.2	0.685130	0.685130	1.117785	1.117781
0.3	0.622417	0.622417	1.210721	1.210718
0.4	0.560961	0.560961	1.264618	1.264614
0.5	0.500000	0.500000	1.282332	1.282329

Tabela 4.9: Simulação para uma placa de espessura ótica $\tau_0 = 2.0$

Observando os resultados, podemos concluir que este método é viável e gera uma boa aproximação independentemente da espessura ótica. E ainda, confiamos que obtivemos sucesso na tarefa de mostrar a potencialidade do método LTS_{300} , para o problema de transferência radativa com $c = 1$.

5 CONCLUSÕES

Sabemos que para problemas isotrópicos de transporte com $c = 1$, a matriz LTS_N possui um autovalor com multiplicidade dupla, que não gera um conjunto de autovalores linearmente independentes. Desta forma, o método LTS_N com diagonalização e albedo unitário, perde o caráter analítico. A adaptação do método recursivo de inversão da matriz LTS_N para autovalores repetidos, proposta nesta dissertação, mantém o caráter analítico do método LTS_N . E ainda, os exemplos anteriores mostram que quando $c = 0,999999$ o método LTS_N com diagonalização apresenta resultados similares ao método recursivo. Cumpre observar que neste trabalho adotamos o limite tendendo a unidade pela esquerda de c , como poderia ter sido adotado o limite à direita, pois para este tipo de problema esta escolha é irrelevante, visto que os valores dos limites são iguais. Por outro lado, em problemas de física de reatores, quando $c > 1$, existe uma fonte de fissão embutida no termo integral; e isto requer condições de contorno homogêneas e reflexivas. Este tipo de situação não foi abordada nesta dissertação. Além disto, nestes casos a solução com $c > 1$ não é única, pois depende do nível de potência do reator. Por isto, sugerimos como trabalho futuro, a generalização da solução para problemas anisotrópicos, bem como, o estudo do limite da solução quando consideramos problemas em física de reatores com $c > 1$.

Levando em conta, o caráter analítico inerente a solução por esta metodologia, bem como, o fato de que a solução LTS_N codifica a aproximação S_N de Case para $c = 1$, finalmente estamos convictos que a análise matemática do método LTS_N para uma placa plana estão agora completos no sentido que as características da construção da solução, convergência e aplicação estão agora preenchidas.

Referências Bibliográficas

- [Barichello, 1992] Barichello, L. (1992). *Formulação analítica da solução do problema de ordenadas discretas unidimensional*. Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre: Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica(PROMECA).
- [Barichello et al. (1998)] Barichello, L.B., Garcia, R.D.M., Siewert, C.E., (1998). *A Spherical-Harmonics Solution for Radiative-Transfer Problems with Reflecting Boundaries and Internal Sources*, vol. 60, N. 2, pp. 247-260. Journal Quantative Spectroscopy e Radiative Transfer
- [Barichello e Vilhena, 1993a] Barichello, L. e Vilhena, M. (1993a). *A General Analytical Approach to One Group One Dimensional Transport Equation*, vol. 58, pp. 182–184. Kerntechnik.
- [Barroso, 2000] Barroso, P. (2000). *Cálculo do problema de multigrupo pelo método LTS_N* Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada-PPGMA_p- Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.
- [Beach et al. (1971)] Beach H.L., Özisik, M.N., Siewert, C.E., (1971) *Radiative Transfer in Linearly Anisotropic-Scattering, Conservative and Non-conservative Slabs with reflective Boundaries*. Int. J. Heat Mass Transfer, vol.14, pp 1551-1565.
- [Brancher et al., 1999] Brancher, J., Segatto, C., e Vilhena, M. (1999). *The LTS_N solution for radiative transfer problem without azimuthal symmetry with severe anisotropy.*, vol. 62, pp. 743–753. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, Great Britain.
- [Brancher, 1998] Brancher, J. D. (1998). *Formulação analítica para solução do problema de ordenadas discretas pelo método LTS_N , para valores de N*

grandes. Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul-Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalurgia e Materiais- PPGEM, Porto Alegre.

- [Cardona e Vilhena, 1998] Cardona, A. e Vilhena, M. (1998). *A Comparative Study of Analytical Solutions for Some One-Dimensional Transport Equation Approximations.*, pp. 289–300. Progress in Nuclear Energy.
- [Case, 1960] Case, K. M. (1960). *Elementary Solution of Transport Equation and their Applications.*, vol. 9, pp. 1–23. Annals of Physics.
- [Chandrasekhar, 1950] Chandrasekhar, S. (1950). Radiative transfer. *Dover Publications, Inc.*
- [Duderstadt e Hamilton, 1976] Duderstadt, J. e Hamilton, L. (1976). *Nuclear reactor analysis*. John Wiley & Sons, Inc.
- [Duderstadt e Martin, 1979] Duderstadt, J. e Martin, W. R. (1979). *Transport theory*. John Wiley & Sons, Inc.
- [Ferzinger and Simmons (1966)] Ferzinger, J.H. and Simmons, G.M., (1966). *Application of Cases's method to plane parallel radiative transfer*, vol.9, pp 987. Int. J. Heat Mass Transfer
- [Golub et al., 1989] Golub, G.H., Loan, C.F., 1989. *Matrix Computations*. Johns Hopkins University Press, London.
- [Gonçalez et al. (2007)] Gonçalez, T., Segatto. C.F and Vilhena, M.T., 2007. *A closed form solution for the one-group time-depend transport equation in a slab by the LTS_N method*, Inac 2007, Santos, São Paulo
- [Gonçalves et al. (2000)] Gonçalves, G.A., Segatto. C.F and Vilhena, M.T., 2000. *The LTS_N Particular Solution in a Slab for na Arbitrary Source and Large Quadrature*. pp. 271-276. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer,

- [Gonçalves et al., 2002] Gonçalves, G., Oliveira, G., e Vilhena, M. (2002). *LTS_N solution of the adjoint neutron transport equation with arbitrary source for high order of quadrature in a homogeneous slab*, vol. 29, pp. 561–569. Annals of nuclear energy, USA.
- [Hauser et al.,2005] Hauser, E. B., Pazos, R. P., Vilhena, M. T. (2005) *An error bound estimate and convergence of the Nodal-LTSN solution in a rectangle*,vol. 32, pp. 1146,1156. Annals of Nuclear Energy.
- [Kriese and Siewert (1970)] Kriese, J.T. and Siewert,C.E., (1970). *Radiative Transfer in a Conservative Finite Slab with an Internal Source* Int. J. Heat Mass Transfer.
- [Larsen, 2005] Larsen, E. W.; Vasques, R.; Vilhena, M.T.(2005) *Particle Transport in the 1-D Diffusive Atomic Mix Limit*. Mathematics and Computation, Supercomputing, Reactor Physics and Nuclear and Biological Applications, vol. 1 2005, France. American Nuclear Society, LaGrange Parke, IL. Palais des Papes : Avignon, 2005.
- [Lemos, 2000] Lemos, R. M.(2000) *Solução da equação de transfrência radiativa condutiva em placa plana pelo método da decomposição e LTS₂*. Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.
- [Oliveira, 1993] Oliveira, J. V. P. (1993). *Formulação LTS_N para problema de ordenada discreta com anisotropia*. Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada - Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Brasil.
- [Oliveira et al., 2003] Oliveira, J. V. P., Cardona, A. V., Vilhena, M. T. M. B., e Barros, R. C. (2003). *A Semi-Analytical Numerical Method for Time-Dependent Radiative Transfer Problems in a Slab Geometry with Coherent Isotropic Scattering*, vol. 73, pp. 55–62. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer.

- [Özisik (1973)] Özisik, M.N., 1973. *Radiative Transfer and Interactions with Conduction and Convection*. Wiley, New York.
- [Pazos, 1999] Pazos, R. (1999). *Estudo da convergência em Teoria de transporte de partículas neutras*. Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre.
- [Pazos e Vilhena, 1999a] Pazos, R. e Vilhena, M. (1999a). *Convergence of the LTS_N method: approach of semi-groups.*, vol. 30, pp. 77–86. Progress in nuclear energy.
- [Renz, 1999] Renz, S. P. (1999). *Solução da equação de transferência radiativa dependente do tempo pelos métodos espectral e LTS_N* . Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada-PPGMA_p Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.
- [Rodrigues et al., 2007a] Rodrigues, B.A., Vilhena, M. T., Borges, V. (2007). *A closed-form solution for the two-dimensional Fokker-Planck equation for electron transport in the range of Compton Effect*. Annals of Nuclear Energy, Great Britain.
- [Segatto, 1995] Segatto, C. (1995). *Extensão da formulação LTS_N para problemas de transporte sem simetria azimutal e problemas dependentes do tempo*. Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica(PROMECC), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.
- [Segatto e Vilhena, 1994a] Segatto, C. e Vilhena, M. (1994a). *Extension of the LTS_N formulation for discrete ordinates problem without azimuthal symmetry*, vol. 21, pp. 701–710. Annals of Nuclear Energy, Great Britain.
- [Segatto e Vilhena, 1997] Segatto, C. e Vilhena, M. (1997). *Solução genérica da equação de transporte unidimensional para elevadas ordens de quadratura.*,

vol. 1, pp. 238–242. Anais do XI Encontro Nacional de Física de Reatores e Termohidráulica., Minas Gerais, Brasil.

[Segatto et al., 1999a] Segatto, C., Vilhena, M., e Brancher, J. (1999a). *The one-dimensional LTS_N formulation for high degree of anisotropy*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer.

[Segatto et al., 1999b] Segatto, C., Vilhena, M., e Gomes, M. (1999b). *The one-dimensional LTS_N solution in a slab with high degree of quadrature*. Annals of Nuclear Energy.

[Segatto e Vilhena, 1994b] Segatto, C. F. e Vilhena, M. T. M. B. (1994b). *Solução da equação de ordenadas discretas dependentes do tempo pelo método LTS_N* Anais VI CGEN-Congresso Geral de Energia Nuclear.

[Simch, 2004] Simch, M. (2004). *Solução LTS_N para problemas de transferência radiativa com polarização em geometria plana*. Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

[Simch et al., 2005] Simch, M. R., Segatto, C. F., e Vilhena, M. T. M. B. (2005). *An analytical solution for the S_N radiative transfer equations with polarization in a slab by the LTS_N method*. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer, In press.

[Tavares, 2000] Tavares, L. (2000). *Cálculo dos parâmetros superficiais de radiação pelo método LTS_N* Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio grande do Sul, Porto Alegre: Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica(PROMECC).

[Trzaska, 1987] Trzaska, Z. (1987). *An efficient algorithm for partial fraction expansion of the linear matrix pencil inverse.*, vol. 324, pp. 465–477. Journal of the Franklin Institute.

- [Vargas et al.,2007] Vargas, R. M. F., Segatto, C e Vilhena, M. T. M.B. (2007). *Solution of the Radiative Heat Transfer Equation with Internal Energy Sources in a Slab by the LTS_N Method*, vol. 105, pp. 1-7. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer.
- [Vargas e Vilhena, 1997] Vargas, R. M. F. e Vilhena, M. T. M. B. (1997). *Analytical Solution of the Discrete Ordinates Problem by the Decomposition Method*, vol. 24, pp. 785–791. Annals of Nuclear Energy.
- [Vargas e Vilhena, 1998] Vargas, R. M. F. e Vilhena, M. T. M. B. (1998). *A closed-form Solution for the One-dimensional Radiative Conduitive Problem by the Decomposition and LTS_N Methods*, vol. 61, pp. 303–308. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer.
- [Vargas e Vilhena, 2004] Vargas, R. M. F. e Vilhena, M. T. M. B. (2004). *Solution of the S_N radiative transfer equation in an inhomogeneous plane parallel atmosphere by decomposition method*, vol. 92, pp. 121-127. Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer.
- [Vasques, 2005] Vasques, Richard. (2005). *A review of particle transport theory in a binary stochastic medium*. newblock Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre: Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada (PPGMap).
- [Vilhena e Barichello, 1991] Vilhena, M. e Barichello, L. (1991). *The LTS_N Method:A new analytical approach to solve the neutron transport equation*, vol. 56, pp. 334–336. Kerntechnik, Germany.
- [Vilhena e Barichello, 1995] Vilhena, M. e Barichello, L. (1995). *An analytical solution for the multigroup slab geometry discrete ordinates problems.*, vol. 24, pp. 1337–1352. Transport Theory and Statistical Physics, USA.
- [Vilhena e Barichello, 1999] Vilhena, M. T. M. B. e Barichello, L. B. (1999). *A Closed-form Solution to the One-dimensional Linear and Nonlinear Radiative Transfer Problem*, vol. 1, pp. 1–17. Hybrid Methods In Engineering.

- [Vilhena e Segatto, 1993] Vilhena, M. T. M. B. e Segatto, C. F. (1993). *Solução da equação de transporte de neutrons e radiação dependente do tempo pelo método LTS_N* XVI CNMAC -Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional - Uberlândia, MG.
- [Zabadal, 1994] Zabadal, J. (1994). *Solução Analítica da Equação de Ordenadas Discretas Multidimensional*. Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica-PROMEC Universidade federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.
- [Zabadal et al., 1993] Zabadal, J., Vilhena, M. T. M. B., e Barichello, L. B. (1993). *Solução da Equação de Ordenada Discreta em Duas Dimensões pelo Método LTS_N* , pp. 90–92. Anais do IX ENFIR-Encontro Nacional de Física de Reatores e Termohidráulica, Caxambu, MG, Brasil.