

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

**Formulação *ADO* para o Problema
Adjunto de Transporte Unidimensional e
Aplicação em um Problema Inverso de
Reconstrução de Fonte**

por

Cássio Baissvenger Pazinato

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

Profa. Dra. Liliane Basso Barichello
Orientadora

Porto Alegre, Agosto de 2015.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Pazinatto, Cássio Baissvenger

Formulação *ADO* para o Problema Adjunto de Transporte Unidimensional e Aplicação em um Problema Inverso de Reconstrução de Fonte / Cássio Baissvenger Pazinatto.—Porto Alegre: PPGMAP da UFRGS, 2015.

88 p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2015.

Orientadora: Barichello, Liliane Basso

Dissertação: Matemática Aplicada,
Equação Adjunta de Transporte, Problemas Inversos, Método de Ordenadas Discretas Analítico

**Formulação *ADO* para o Problema
Adjunto de Transporte Unidimensional e
Aplicação em um Problema Inverso de
Reconstrução de Fonte**

por

Cássio Baissvenger Pazinato

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: Fenômenos de Transporte

Orientadora: Profa. Dra. Liliane Basso Barichello

Banca examinadora:

Prof. Dra. Alice de Jesus Kozakevicius
PPGI-UFSM

Dra. Camila Becker Picoloto
PPGMAp-UFRGS

Prof. Dr. Helcio Rangel Barreto Orlande
POLI-UFRJ

Prof. Dr. Rudnei Dias da Cunha
IME-UFRGS

Dissertação apresentada e aprovada em
Agosto de 2015.

Prof. Dr. Carlos Hoppen
Coordenador

*“There is grandeur in this view of life,
with its several powers, having been
originally breathed into a few forms
or into one; and that, whilst
this planet has gone cycling on
according to the fixed law of
gravity, from so simple a beginning
endless forms most beautiful and
most wonderful have been, and
are being, evolved.”*

*– Charles Darwin,
On the Origin of Species.*

AGRADECIMENTOS

Gostaria de agradecer aos meus pais, Elvia e Luiz, minha irmã Fernanda, ao Gato, e aos demais familiares por todo amor e carinho dedicados a mim e pelo constante incentivo aos estudos.

Também agradeço à Alice, ao Omar e à Pi, uma segunda família que surgiu ao longo desta jornada, por todo apoio oferecido.

Especiais agradecimentos à Cristina, meu amor, por todo carinho, suporte e, principalmente, paciência.

Sou também grato à professora Liliane, pelo apoio e dedicação que tornaram este trabalho possível.

Agradeço ao PPGMAp e à UFRGS pela infraestrutura oferecida e ao CNPq pela concessão de bolsa.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	viii
LISTA DE TABELAS	xi
LISTA DE SIGLAS E SÍMBOLOS	xiii
RESUMO	xvii
ABSTRACT	xviii
1 INTRODUÇÃO	1
2 A EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE PARTÍCULAS	5
2.1 Fundamentos da Física do Transporte de Nêutrons	5
2.2 Variáveis Independentes	8
2.3 Seções de Choque	9
2.4 A Equação do Transporte de Nêutrons	10
3 O OPERADOR ADJUNTO DE TRANSPORTE	14
3.1 O operador adjunto de transporte	14
3.2 Condições de Contorno para a Equação Adjunta de Transporte	18
3.3 A Equação Adjunta de Transporte	20
4 FORMULAÇÃO ADO PARA A EQUAÇÃO ADJUNTA DE TRANSPORTE	22
4.1 Formulação ADO em meio homogêneo	22
4.2 Soluções Particulares	27
4.2.1 Fontes Constantes	28
4.2.2 Solução Particular via Função de Green	29
4.2.2.1 Relação de ortogonalidade	29

4.2.2.2	Função de Green	31
4.2.2.3	Solução Particular	33
4.3	Formulação ADO em Problemas Multirregiões	34
4.4	Determinação da Solução ADO	36
4.5	Caso particular: transporte isotrópico de partículas	41
5	APLICAÇÕES	45
5.1	Problema Fonte-Detector	46
5.1.1	Resultados Numéricos para o Problema Fonte-Detector	50
5.1.1.1	Espalhamento Isotrópico com Autofunção Analítica: Problema 1	50
5.1.1.2	Espalhamento Isotrópico com Autofunção Analítica: Problema 2	52
5.1.1.3	Espalhamento Anisotrópico: Problema 1	54
5.1.1.4	Espalhamento Anisotrópico: Problema 2	57
5.2	Problema Inverso de Reconstrução de Fontes de Partículas	60
5.2.1	Resultados Numéricos para a Reconstrução de Fontes Isotrópicas de Partículas com Distribuição e Forma Conhecidas	62
5.2.1.1	Problema Teste 1: Reconstrução Sobredeterminada de Fonte Constante	62
5.2.1.2	Problema Teste 2: Reconstrução de Duas Fontes Constantes com Dois Detetores	65
5.2.1.3	Problema Teste 3: Fonte Polinomial	67
5.2.2	Resultados Numéricos para o Reconstrução de Fontes Isotrópicas de Partículas Via Funções Constantes por Partes	69
5.2.2.1	Problema Teste 1: Reconstrução de Fonte Polinomial	70
5.2.2.2	Problema Teste 2: Reconstrução de Fonte Exponencial	71
5.2.3	Regularização de Tikhonov	76
6	CONCLUSÕES	81
	REFERÊNCIAS	82

LISTA DE FIGURAS

4.1	Exemplo de placa em meio heterogêneo.	35
5.1	Exemplo do posicionamento de um detector de partículas d , com seção de choque de absorção σ_d , no intervalo $[a,b] \subseteq [z_{r-1},z_r]$ de uma placa com R regiões.	47
5.2	Problema teste considerando espalhamento isotrópico em 5 regiões. Em (a) são consideradas fontes de partículas $S_1 = 1$ em $[30,35]$ e $S_2 = 2$ em $[57,60]$, assim como um detector com seção de choque de absorção $\sigma_d = 0,1$ em $[45,47]$. O contorno é de vácuo. Para (b), a fonte adjunta é definida como $S^\dagger = 0,1$ em $[45,47]$ e $S^\dagger = 0$ no restante da placa e o contorno é de fluxo emergente nulo. . .	50
5.3	Problema teste considerando espalhamento isotrópico em duas regiões. Em (a) é considerada uma fonte de partículas S_i em $[0,10]$, simulando três instantes fixos, $t = 0,1,5$ anos, do decaimento de uma fonte de $^{60}_{27}\text{Co}$ em raios γ . Um detector com seção de choque de absorção $\sigma_d = 0,5$ é posicionado em $[25,30]$. A condição contorno em $z = 0$ é reflexivo e em $z = 30$ é vácuo. Para (b), a fonte adjunta é definida como $S^\dagger = 0,5$ em $[25,30]$ e $S^\dagger = 0$ no restante da placa. São consideradas condições de contorno reflexivas e de fluxo emergente nulo, em $z = 0$ e $z = 30$, respectivamente.	53
5.4	Problema teste considerando espalhamento isotrópico em três regiões. Na região central, $z \in [2,9]$, a seção de choque de espalhamento é f_0 e assumirá diversos valores, dados de acordo com a tabela 5.7. Em (a) é considerada uma fonte de partículas $S = 1$ em $[1,2]$. Um detector com seção de choque de absorção $\sigma_d = 0,25$ é posicionado em $[9,10]$. As condição contorno em $z = 1$ e em $z = 10$ são dadas pela Eq. (5.18). Para (b), a fonte adjunta é definida como $S^\dagger = 0,25$ em $[1,2]$ e $S^\dagger = 0$ no restante da placa.	58
5.5	Configuração do Problema 1. É considerado um único meio material e espalhamento isotrópico, com $\sigma = 1$ e $f_0 = 0,9$. Dois detectores, d_1 e d_2 com seções de choque de espalhamento $\sigma_{d,1} = 0,25$ e $\sigma_{d,2} = 0,1$, são posicionados em $[10,15]$ e $[25,45]$, respectivamente. A fonte a ser reconstruída é $S = 2$ para $z \in [45,50]$ e $S = 0$ caso contrário.	63

5.6	Configuração do Problema 2. São considerados dois meios materiais com propriedades descritas na figura e espalhamento isotrópico. Dois detectores, d_1 e d_2 com seções de choque de espalhamento $\sigma_{d,1} = \sigma_{d,2} = 0,5$, são posicionados em $[5,8]$ e $[70,75]$, respectivamente. A fonte a ser reconstruída é $S = 2$ para $z \in [35,45]$, $S = 3$ para $z \in [60,65]$ e $S = 0$ caso contrário.	65
5.7	Configuração do Problema 3. É considerado um único meio material e espalhamento isotrópico, com $\sigma = 1$ e $f_0 = 0,8$. Três detectores, d_1 , d_2 e d_3 , com seções de choque de espalhamento $\sigma_{d,1} = \sigma_{d,2} = \sigma_{d,3} = 0,5$, são posicionados em $[1,2]$, $[3,5; 4,5]$ e $[7,8]$, respectivamente. A fonte a ser reconstruída é $S(z) = 1 - 2/5z + 1/25z^2$ para $z \in [0,10]$	67
5.8	Gráfico da fonte polinomial exata e da reconstrução com 8 segmentos uniformes.	70
5.9	Gráfico da fonte polinomial exata e da reconstrução com 16 segmentos uniformes.	71
5.10	Gráficos da fonte exponencial para $k = 1,2,5$	72
5.11	Reconstrução da fonte exponencial com 4 segmentos uniformes. A primeira coluna da esquerda contém a reconstrução da fonte com $k = 1$ para três diferentes perturbações das medidas reais. A coluna central e a da direita são análogas, com $k = 2$ e $k = 5$, respectivamente.	73
5.12	Reconstrução da fonte pico com 16 segmentos uniformes. A primeira coluna da esquerda contém a reconstrução da fonte com $k = 1$ para três diferentes perturbações das medidas reais. A coluna central e da direita são análogas, com $k = 2$ e $k = 5$, respectivamente.	74
5.13	Reconstrução da fonte pico para $k = 1$ com 16 e 21 segmentos não uniformes.	75
5.14	Reconstruções da fonte pico com $k = 1$, para 16 segmentos não uniformes e regularização T_0 com $\alpha = 0,01; 0,05; 0,1; 0,3; 0,5; 0,7$, ordenadas da esquerda para a direita, de cima para baixo. . . .	77
5.15	Reconstruções da fonte pico com $k = 1$, para 16 segmentos não uniformes e regularização T_1 com $\alpha = 0,01; 0,05; 0,1; 0,3; 0,5; 0,7$, ordenadas da esquerda para a direita, de cima para baixo. . . .	78

5.16	Reconstruções da fonte pico com $k = 1$, para 16 segmentos não uniformes e regularização T_2 com $\alpha = 0,01; 0,05; 0,15; 0,3; 0,5; 0,7$, ordenadas da esquerda para a direita, de cima para baixo. . . .	79
------	--	----

LISTA DE TABELAS

5.1	R_j e R_j^\dagger : respostas do detector calculadas através das Eqs. (5.2) e (5.3), respectivamente, quando apenas a j -ésima fonte está ativa. R e R^\dagger : respostas totais. N é o grau da regra de quadratura de Gauss-Legendre utilizada para a variável angular. Os resultados são escalados para 10^{-2}	51
5.2	Respostas do detector R e R^\dagger calculadas através das Eqs. (5.2) e (5.3), respectivamente. É utilizada quadratura de Gauss-Legendre de ordem N para o tratamento da variável angular. Os resultados são escalados para $\times 10^{19}$	53
5.3	R_j e R_j^\dagger : respostas do detector computadas através das Eqs. (5.2) e (5.3) quando apenas a j -ésima fonte está ativa. R e R^\dagger : respostas totais. Resultados para grau 0 de anisotropia. É utilizada quadratura de Gauss-Legendre de ordem N para o tratamento da variável angular. São escalados para $\times 10^{-2}$	55
5.4	R_j e R_j^\dagger : respostas do detector computadas através das Eqs. (5.2) e (5.3) quando apenas a j -ésima fonte está ativa. R e R^\dagger : respostas totais. Resultados para grau 1 de anisotropia. É utilizada quadratura de Gauss-Legendre de ordem N para o tratamento da variável angular. São escalados para $\times 10^{-2}$	55
5.5	R_j e R_j^\dagger : respostas do detector computadas através das Eqs. (5.2) e (5.3) quando apenas a j -ésima fonte está ativa. R e R^\dagger : respostas totais. Resultados para grau 2 de anisotropia. É utilizada quadratura de Gauss-Legendre de ordem N para o tratamento da variável angular. São escalados para $\times 10^{-2}$	56
5.6	R_j e R_j^\dagger : respostas do detector computadas através das Eqs. (5.2) e (5.3) quando apenas a j -ésima fonte está ativa. R e R^\dagger : respostas totais. Os resultados são escalados para 10^{-2} . É utilizada quadratura de Gauss-Legendre de ordem N para o tratamento da variável angular. Resultados para grau 200 de anisotropia. São escalados para $\times 10^{-1}$	57
5.7	Resultados obtidos com regra de quadratura de Gauss-Legendre de ordem N para o tratamento da variável angular. R_N representa a resposta do detector obtida através da Eq. (5.2) utilizando quadratura de ordem N e R_N^\dagger a resposta obtida através da Eq. (5.3) com quadratura de ordem N	59

5.8	Respostas dos detectores para quadraturas de Gauss-Legendre de grau $N = 4,8,16,32$ para o tratamento da variável angular. . . .	64
5.9	Erro relativo para um milhão de perturbações de até 10%, uniformemente geradas em torno das medidas computadas \mathbf{r}_m . . .	64
5.10	Reconstrução da fonte do problema teste.	66
5.11	Erro relativo para um milhão de perturbações de até 10% uniformemente geradas em torno das medidas computadas \mathbf{r}_m	66
5.12	Valores obtidos para os coeficientes da expansão da base em polinômio de grau 2. O erro relativo é calculado com relação à Eq. 5.43	68
5.13	Erro relativo para um milhão de perturbações de até 10% uniformemente geradas em torno das medidas computadas \mathbf{r}_m	68
5.14	Erro relativo da reconstrução da fonte exponencial para a divisão da região em 4 segmentos.	73
5.15	Erro relativo para a divisão em 16 segmentos da região.	74
5.16	Erro relativo para a reconstrução com matriz de Tikhonov T_0 . .	77
5.17	Erro relativo para a reconstrução com matriz de Tikhonov T_1 . .	79
5.18	Erro relativo para a reconstrução com matriz de Tikhonov T_2 . .	80

LISTA DE SIGLAS E SÍMBOLOS

Lista de Siglas

ADO Analytical Discrete Ordinates

Lista de Símbolos

E energia cinética

m massa da partícula

\mathbf{x} vetor posição no \mathbb{R}^3 , $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$

\mathbf{v} vetor velocidade no \mathbb{R}^3 , $\mathbf{v} = (v_1, v_2, v_3)$

v magnitude do vetor velocidade, $v = |\mathbf{v}|_2$

ϕ ângulo azimutal, $0 \leq \phi < 2\pi$

θ ângulo polar, $0 \leq \theta \leq \pi$

μ cosseno do ângulo polar

$\boldsymbol{\Omega}$ vetor unitário na direção da velocidade, $\boldsymbol{\Omega} = \mathbf{v}/v$, $\boldsymbol{\Omega} = (\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3)$

t tempo

σ seção de choque macroscópica total

σ_k seção de choque macroscópica da reação de tipo k

$f(\mathbf{x}; \boldsymbol{\Omega}', E' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E)$ função de transferência de partículas em \mathbf{x} com direção $\boldsymbol{\Omega}'$ e energia E' para a direção $\boldsymbol{\Omega}$ com energia E

N densidade de partículas no espaço de fase, citada apenas no capítulo 2

N	grau da regra de quadratura utilizada, citada a partir do capítulo 4
R	número de regiões consideradas
μ_1, \dots, μ_N	nós da regra de quadratura de ordem N
w_1, \dots, w_N	pesos da regra de quadratura de ordem N
ψ	fluxo angular de partículas
ψ_r	restrição de ψ em $[z_{r-1}, z_r]$
$\Psi_{r,+}$	vetor do fluxo angular de partículas nas direções μ_1, \dots, μ_N em $[z_{r-1}, z_r]$
$\Psi_{r,-}$	vetor do fluxo angular de partículas nas direções $-\mu_1, \dots, -\mu_N$ em $[z_{r-1}, z_r]$
ψ^\dagger	fluxo angular adjunto de partículas
ψ_r^\dagger	restrição de ψ^\dagger em $[z_{r-1}, z_r]$
$\Psi_{r,+}^\dagger$	vetor do fluxo angular adjunto de partículas nas direções μ_1, \dots, μ_N em $[z_{r-1}, z_r]$
$\Psi_{r,-}^\dagger$	vetor do fluxo angular adjunto de partículas nas direções $-\mu_1, \dots, -\mu_N$ em $[z_{r-1}, z_r]$
ν	constante de separação
ϕ^ν	fluxo angular de partículas autofunção associada à ν
$\Phi_{r,+}^\nu$	vetor das autofunções associadas à ν nas direções μ_1, \dots, μ_N em $[z_{r-1}, z_r]$
$\Phi_{r,-}^\nu$	vetor das autofunções associadas à ν nas direções $-\mu_1, -\dots, -\mu_N$ em $[z_{r-1}, z_r]$
P_l	l -ésimo polinômio de Legendre

f_l	coeficiente do l -ésimo polinômio de Legendre na expansão do termo de espalhamento
L	grau de anisotropia do problema
g_1, g_2	fluxo incidente de partículas na fronteira
ρ_1^s, ρ_2^s	coeficiente de reflexão especular
ρ_d^s, ρ_2^d	coeficiente de reflexão difusa
\mathcal{L}	operador de transporte
\mathcal{L}^\dagger	operador adjunto ao operador de transporte

RESUMO

Neste trabalho, o problema adjunto de transporte de partículas neutras unidimensional é pela primeira vez resolvido pelo Método de Ordenadas Discretas Analítico (ADO). A solução é derivada para problemas monoenergéticos em meios heterogêneos, considerando geometria plana infinita, com simetria azimutal, grau arbitrário de anisotropia e condições de contorno gerais. No caso especial de espalhamento isotrópico, é obtida pelo Método ADO uma solução em termos de autofunções explícitas, bem como um problema de autovalores na forma de perturbação de matriz diagonal. A solução ADO é verificada através de comparações com soluções presentes na literatura, mostrando exatidão superior. A solução é também testada através da abordagem do problema fonte-detector, a qual permite estabelecer uma análise comparativa dos resultados para a resposta de detectores posicionados no interior do domínio. Adicionalmente, a formulação é aplicada em um problema inverso de reconstrução de fontes isotrópicas de partículas, baseado na formulação fonte-detector, para problemas de transporte com geometria e materiais conhecidos. Finalmente, como o problema inverso é mal posto, é abordada a técnica de regularização de Tikhonov, uma modificação no processo de cálculo do problema inverso original, que torna o método de inversão menos sensível a ruídos nas medições.

ABSTRACT

In this study, the one-dimensional adjoint particle transport problem is solved for the first time using the Analytical Discrete Ordinates Method (ADO). Monoenergetic problems in heterogeneous slabs with azimuthal symmetry, arbitrary degree of anisotropy and general boundary conditions are taken in consideration. In the particular case of isotropic scattering, the ADO provides a solution in terms of explicit eigenfunctions, as well as with an eigenvalue problem in the form of a rank-1 update of a diagonal matrix. The ADO solution for the adjoint equation is verified against solutions presented in the literature, showing to be more accurate. The solution is also tested through source-detector problem approach, which allows for a comparative analysis of the results to be established by computing the response of the detectors inside the domain. In addition, the ADO solution to the adjoint equation is applied in an inverse problem of isotropic source reconstruction, based on the source-detector problem, in domains with known geometry and materials. Finally, since the inverse problem is ill posed, the Tikhonov's regularization technique, a modification in the process of computing the inverse problem solution is applied in order to deal with noisy data.

1 INTRODUÇÃO

A equação de transporte é uma versão linear da equação originalmente derivada por Ludwig Boltzmann para tratar fenômenos em dinâmica de gases rarefeitos [17] e posteriormente aplicada em problemas de transferência radiativa [21, 47] e transporte de partículas neutras [14, 28, 41]. Essa equação é usada como modelo matemático relevante em diversas linhas de pesquisa, como segurança e detecção de transporte de materiais nucleares [44, 46], análises tomográficas [3, 4, 34, 37, 38, 39], prospecção de petróleo [6, 7, 57], dosagem de tratamentos radioterápicos [53, 62], entre outros.

Como dados de interesse para as aplicações citadas estão as estimativas de fluxo de partículas ou a intensidade de radiação, a composição dos materiais nos quais o transporte ocorre, e a estimativa das fontes de partícula ou radiação, questões que oscilam entre problemas diretos e inversos. Estes últimos são conhecidos por serem geralmente mal postos no sentido de pequenas variações nos dados de entrada apresentarem grandes variações nos resultados [48, 50, 60].

A formulação adjunta da equação de transporte surge como uma ferramenta matemática que auxilia na resolução de diversos dos problemas anteriormente citados. Na teoria de reatores nucleares, está constantemente relacionada com problemas de criticalidade e segurança nuclear [14, 28, 55], e a sua solução é frequentemente interpretada como a *função importância* da contribuição de cada partícula para um detector. Por outro lado, tem sido aplicada, muitas vezes, conjuntamente com a própria equação de transporte em processos iterativos de minimização [16, 29, 49], onde é utilizada no cálculo de gradientes, presentes em técnicas de estimativa de parâmetros. Ainda é ferramenta importante em problemas inversos como a detecção de materiais nucleares [46], a reconstrução de imagens nas áreas de tomografia óptica [30, 31, 36] e tomografia de nêutrons [58], a obtenção de seções de

choque de absorção e espalhamento [26, 27] e a reconstrução de fontes de radiação [35, 61]. Do ponto de vista matemático, foram demonstradas por Choulli e Stefanov [22] a existência e a unicidade do problema da identificação do núcleo de espalhamento e da seção de choque macroscópica total em problemas n -dimensionais, $n \geq 2$, via medições de fronteira. Ainda considerando medidas de fronteira, resultados de estabilidade foram apresentados por Rolci *et al.* [54] em domínios convexos limitados em dimensão dois e três. Para o problema estacionário, resultados de unicidade foram também apresentados por Choulli e Stefanov em [23]. Em geometria plana infinita com condições de contorno reflexivas e espalhamento isotrópico, a equação adjunta de transporte foi resolvida pelo método da função espectral de Green por Militão *et al.* [45] e pelo método analítico das ordenadas discretas por Pazinato *et al.* [51].

Neste trabalho, o método de Ordenadas Discretas Analítico (ADO, do inglês *Analytical Discrete Ordinates*), desenvolvido por Barichello e Siewert [10, 12] para a solução da equação de transporte, é aplicado para a equação adjunta de transporte monoenergética em problemas multirregiões em geometria plana infinita, com espalhamento anisotrópico e condições de contorno gerais, uma formulação ainda não encontrada na literatura. Sendo uma modificação recente do método de ordenadas discretas proposto por Chandrasekhar para a resolução de problemas em transferência radiativa [21], o método ADO mantém a característica de possuir soluções analíticas com respeito à variável espacial e possui, entre suas principais vantagens, o uso de problemas de autovalores de ordem reduzida para a determinação das constantes de separação da hipótese de solução, em contraste com a obtenção das raízes de polinômios, como no método clássico de ordenadas discretas. Além disso, o método ADO possibilita o uso de esquemas arbitrários de quadratura, fato que tornou viável a sua utilização em problemas de transferência de gases rarefeitos [56], bem como aplicações em microfluidos [52] e em modelos com polarização em transferência radiativa [11]. Ademais, as modificações propostas pelo método ADO permitiram aplicações em problemas multidimensionais por meio da utilização de

métodos nodais [59]. Outra contribuição da formulação ADO na solução de problemas de transporte de partículas está na forma conveniente da escrita das exponenciais na solução, estas de maneira deslocada, de forma a evitar possíveis problemas numéricos de *overflow* [10, 15, 32].

A fim de testar a metodologia desenvolvida para a equação adjunta de transporte e apresentar uma primeira aplicação, é desenvolvido o problema fonte-detector [19, 35, 43], o qual oferece uma alternativa baseada na equação adjunta de transporte para o cálculo da resposta obtida por detectores internos a fontes de partículas internas e de fronteira. Como vantagem desta formulação baseada na equação adjunta está a dependência explícita da resposta do detector, através de um produto interno, nas fontes internas e de fronteira, o que evita a necessidade de se obter novamente a solução da equação caso as fontes sejam alteradas. Esta abordagem também representa ganhos em problemas inversos da teoria de transporte [35] dependentes das respostas de detectores, os quais são frequentemente resolvidos por métodos iterativos de minimização que dependem da reavaliação da equação de transporte em cada passo de sua execução. Aqui, motivado pelo problema da reconstrução de fontes de partículas, é apresentada uma estratégia para a reconstrução de fontes internas isotrópicas baseada na aplicação fonte-detector para problemas com geometria e materiais conhecidos, nos moldes apresentados por Hykes e Azmy [35].

Dessa forma, no capítulo 2, são apresentados os fundamentos da física de nêutrons e a dedução da equação de transporte. A equação adjunta da equação de transporte e a relação entre ambas são detalhadas no capítulo 3. No capítulo 4, são obtidas a formulação ADO para a equação adjunta de transporte e as soluções particulares. Nesse mesmo capítulo, são relatadas algumas considerações sobre o sistema de equações a ser determinado. Dedicar-se o capítulo 5 a apresentar duas aplicações da equação adjunta de transporte: o problema fonte-detector e a reconstrução de fontes isotrópicas. Resultados numéricos referentes a essas aplicações também são

abordados no capítulo 5. Finalmente, os comentários finais e possíveis extensões para modelos mais gerais são apresentados no capítulo 6.

2 A EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE PARTÍCULAS

Neste capítulo, é derivada a equação de transporte de partículas no contexto do transporte de nêutrons. Inicialmente são abordadas as grandezas físicas do problema, as variáveis independentes e o conceito de seções de choque. Na sequência, é deduzida a equação de transporte através de princípios de conservação. Por fim, são apresentadas simplificações do modelo.

2.1 Fundamentos da Física do Transporte de Nêutrons

Uma série de hipóteses sobre a forma de interação entre partículas, núcleos e o meio material onde as partículas viajam são necessárias para a derivação da equação de transporte [43]: (a) as partículas são consideradas pontuais; (b) descrevem uma trajetória retilínea entre colisões; (c) a interação entre as partículas é negligenciável; (d) as colisões são instantâneas, exceto para fissão; (e) as propriedades do meio material são isotrópicas e independentes do tempo; (f) apenas o valor esperado ou médio da densidade de partículas é considerado. Entre as possíveis formas de interação nucleares, as colisões entre núcleos e/ou partículas nucleares, e a desintegração espontânea de núcleos são dois dos mais importantes tipos de reações nucleares [28].

As *colisões* são caracterizadas pelo choque entre nêutrons e núcleos, geralmente seguidas pela absorção ou pela emissão de energia e outras partículas nucleares [28]. A energia liberada (ou necessária) para a reação é dada pela relação de *equivalência de massa-energia* de Einstein

$$E = mc^2, \tag{2.1}$$

onde m é a variação de massa das partículas antes e depois da colisão e c é a velocidade da luz no meio. Nessas reações, uma dada partícula é geralmente considerada como um projétil que atinge outra partícula-alvo. Por exemplo, se um núcleo n_1 é atingido por uma partícula p_1 , da reação resultam um novo núcleo n_2 e outras partículas expelidas p_2 , tem-se

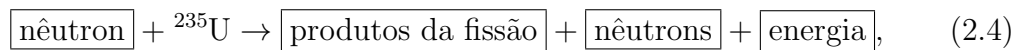


Nesta reação, (2.2), a energia resultante é dada por

$$E = [(m_A + m_b) - (m_c + m_D)]c^2. \quad (2.3)$$

Nos casos onde $E > 0$, a reação é dita *exotérmica*, isto é, com liberação de energia. Se $E < 0$, a reação é do tipo *endotérmica*, ou seja, necessita de energia para ocorrer. Dentre as colisões de interesse entre nêutrons e núcleos estão a fissão nuclear, a captura radioativa e o espalhamento [14, 28].

A *fissão nuclear* é um processo no qual um núcleo pesado, como o ^{235}U , divide-se em dois núcleos menores, liberando energia e outras partículas nucleares. A taxa com a qual a fissão espontânea ocorre é muito lenta, e a fim de sobrepujar essa lentidão e tornar esse processo viável para as aplicações, como em um reator nuclear, a reação é induzida através de uma partícula neutra, um nêutron, bombardeada em um núcleo maior com a esperança de quebrá-lo [28]. A fissão nuclear é tipicamente uma reação do tipo



onde a maior parte dos nêutrons resultantes surge instantaneamente no local da fissão, sem preferências de direção. Entretanto, existe uma pequena parcela de nêutrons, cerca de 1% [28], que surge pelo decaimento de alguns subprodutos instáveis da fissão, os chamados nêutrons atrasados (*delayed neutrons*), os quais são liberados entre 0,1 e 60 segundos após a reação de fissão [14, 19, 28].

A *captura radioativa*, ou absorção, é uma reação exotérmica na qual um nêutron incidente é absorvido pelo núcleo-alvo, deixando-o em um estado excitado. O núcleo excitado, n , eventualmente decai para o seu modo inicial, frequentemente emitindo raios γ , denotado (n,γ) [28, 41]. Como exemplo, o ouro quando irradiado com nêutrons sofre uma reação do tipo



Um outro tipo de colisão é o *espalhamento*, o qual pode ser elástico, (n,n) , ou inelástico, (n,n') . No espalhamento elástico, o nêutron atinge o núcleo e é desviado sem alterar o estado do núcleo [41]. Quando ocorre espalhamento inelástico, o núcleo é deixado em um estado excitado, o qual decai após a emissão de raios γ [28, 41].

As reações nucleares de *desintegração espontânea* ocorrem geralmente em núcleos instáveis e são muitas vezes acompanhadas pela emissão de energia e partículas subatômicas [28]. O processo de desintegração é o chamado *decaimento radioativo*. Observações experimentais indicam que a probabilidade do núcleo decair em um dado intervalo de tempo é constante, independente da idade ou ambiente no qual o núcleo se encontra. Logo, o decaimento radioativo obedece a uma lei do tipo

$$\frac{dN}{dt}(t) = -\lambda N(t), \quad (2.6)$$

onde $N(t)$ é o número de núcleos originais restantes no instante de tempo t , e λ é a *constante de decaimento radioativo* e é inerente ao núcleo [28]. É válido destacar que o decaimento é frequentemente mais complexo que o apresentado pela Eq. (2.6), podendo depender de termos-fonte ou de decaimentos em cadeia, em que um tipo de núcleo decai em outro tipo [28], cada um com sua própria constante de decaimento, originando um sistema acoplado de equações diferenciais ordinárias.

Entre os tipos mais comuns de decaimento encontrados na natureza estão: o decaimento α , no qual o núcleo original emite um núcleo de hélio ${}^4_2\text{He}$; o

decaimento β , o qual corresponde à conversão de um nêutron em um próton e na possível emissão de um neutrino e de um elétron; o decaimento γ , que é a transição de um núcleo para um estado de menor excitação, acompanhado pela emissão de um fóton. Em reatores nucleares, muitos núcleos instáveis não encontrados na natureza são produzidos a partir da fissão nuclear, podendo apresentar decaimentos distintos dos citados anteriormente, como é o caso do ${}^{87}_{36}\text{Kr}$ que pode decair emitindo um nêutron [28].

Existem outros processos que devem ser considerados em algumas situações, como as reações do tipo (n,α) , (n,p) , $(n,2n)$ e $(n,3n)$, nas quais o nêutron absorvido provoca a emissão de partículas α , prótons, 2 nêutrons e 3 nêutrons, respectivamente [41].

2.2 Variáveis Independentes

O transporte tridimensional de partículas neutras é caracterizado pelo espaço de fase, este composto por sete variáveis independentes: a posição $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3)$ da partícula, sua velocidade $\mathbf{v} = (v_1, v_2, v_3)$ e o instante de tempo t a ser considerado [14, 19, 28]. É natural substituir as três variáveis da velocidade pela energia cinética

$$E = \frac{mv^2}{2}, \quad (2.7)$$

onde $v = |\mathbf{v}|_2$ é a magnitude do vetor velocidade e m é a massa da partícula, e pelas variáveis em coordenadas esféricas que definem $\mathbf{\Omega} = \mathbf{v}/v = (\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3)$,

$$\Omega_1 = \sqrt{1 - \mu^2} \cos \phi, \quad \Omega_2 = \sqrt{1 - \mu^2} \sin \phi, \quad \Omega_3 = \mu, \quad (2.8)$$

onde $\mu = \cos \theta$, θ é o ângulo polar, $0 \leq \theta \leq \pi$, e ϕ , $0 \leq \phi < 2\pi$, é o ângulo azimutal.

Do cálculo elementar [24], tem-se o elemento de integração na esfera unitária $d\mathbf{\Omega} = d\mu d\phi$. Como exemplo, se f é função de $\mathbf{\Omega}$, então

$$\int_{4\pi} f(\mathbf{\Omega}) d\mathbf{\Omega} = \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 f(\mu, \phi) d\mu d\phi, \quad (2.9)$$

onde o 4π na região de integração significa que a integral está sendo calculada na superfície da esfera unitária. Nota-se que a área da esfera unitária é dada quando $f(\Omega) = 1$, de onde decorre

$$\int_{4\pi} d\Omega = \int_0^{2\pi} \int_{-1}^1 d\mu d\phi = 4\pi, \quad (2.10)$$

uma justificativa para a notação 4π na região de integração.

2.3 Seções de Choque

A seção de choque (macroscópica) total, $\sigma(\mathbf{x}, E)$ (em cm^{-1}), é a probabilidade de uma partícula neutra colidir com um núcleo por unidade de distância percorrida. São consideradas apenas a posição, \mathbf{x} , e a energia cinética, E , pois em poucas situações há dependência relevante da direção, Ω , e do tempo, t , [14]. A seção de choque total é a soma da totalidade das seções de choque parciais, englobando todos os tipos de colisões entre partículas neutras e núcleos: espalhamento elástico, σ_n , e inelástico, $\sigma_{n'}$, captura radioativa, σ_γ , fissão, σ_f , etc.

Além das seções de choque, é preciso descrever a probabilidade de nêutrons emergentes de uma colisão assumirem determinada direção ou energia [14]. Esta é a *seção de choque diferencial* (ou *duplamente diferencial*, por causa da direção e energia) e é geralmente expressa como uma relação do tipo

$$\sigma_k(\mathbf{x}, E') f_k(\mathbf{x}; \Omega', E' \rightarrow \Omega, E), \quad (2.11)$$

onde σ_k é a seção de choque de uma reação do tipo k para partículas neutras com energia cinética E' , e $f_k(\mathbf{x}; \Omega', E' \rightarrow \Omega, E) d\Omega dE$ representa a probabilidade de emergirem nêutrons em $d\Omega dE$ em torno de (Ω, E) caso um nêutron com direção Ω' e energia E' sofra uma colisão do tipo k . Cada função f_k é devidamente normalizada quando integrada em todas as direções Ω e energias E [14, 19, 28, 43]. Por fim, a probabilidade total de, após haver colisão em (Ω', E') , emergirem nêutrons em $d\Omega dE$

em torno de $(\mathbf{\Omega}, E)$ é dada por $f(\mathbf{x}; \mathbf{\Omega}', E' \rightarrow \mathbf{\Omega}, E)d\mathbf{\Omega}dE$, definida de acordo com

$$\sigma(\mathbf{x}, E')f(\mathbf{x}; \mathbf{\Omega}', E' \rightarrow \mathbf{\Omega}, E) = \sum_k \sigma_k(\mathbf{x}, E')f_k(\mathbf{x}; \mathbf{\Omega}', E' \rightarrow \mathbf{\Omega}, E). \quad (2.12)$$

2.4 A Equação do Transporte de Nêutrons

Nesta seção, é deduzida a equação de transporte de nêutrons, considerando-se meio não multiplicativo. Seja $N(\mathbf{x}, \mathbf{\Omega}, E, t)$ a densidade de nêutrons no espaço de fase. Então, o número provável de nêutrons no instante de tempo t em um elemento de volume dV com energia dE em torno de E e direção $d\mathbf{\Omega}$ em torno de $\mathbf{\Omega}$ é dado por

$$N(\mathbf{x}, \mathbf{\Omega}, E, t)dVd\mathbf{\Omega}dE. \quad (2.13)$$

É possível supor que todos os nêutrons que sofrerem colisões em um intervalo de tempo Δt deixam $dVd\mathbf{\Omega}dE$, enquanto os nêutrons que não sofrerem colisão permanecem em $dVd\mathbf{\Omega}dE$ [14]. A distância percorrida por um dado nêutron à primeira ordem no tempo é $v\Delta t$. Logo, no instante $t + \Delta t$, o número de partículas em $dVd\mathbf{\Omega}dE$ é dado por

$$\begin{aligned} N(\mathbf{x} + \mathbf{\Omega}v\Delta t, \mathbf{\Omega}, E, t + \Delta t)dVd\mathbf{\Omega}dE = & \boxed{\text{não colidiram}} \\ & + \boxed{\text{vieram de fora de } dVd\mathbf{\Omega}dE} + \boxed{\text{fontes}}. \end{aligned} \quad (2.14)$$

A probabilidade de o nêutron sofrer colisão é dada por $\sigma(\mathbf{x}, E)v\Delta t$. Logo, o número de partículas remanescentes em $dVd\mathbf{\Omega}dE$ é

$$\boxed{\text{não colidiram}} = N(\mathbf{x}, \mathbf{\Omega}, E, t)(1 - \sigma(\mathbf{x}, E)v\Delta t)dVd\mathbf{\Omega}dE. \quad (2.15)$$

Outros nêutrons podem entrar em $dVd\mathbf{\Omega}dE$ através de colisões

$$\begin{aligned} \boxed{\text{vieram de fora de } dVd\mathbf{\Omega}dE} = & \\ \left[\int_0^\infty \int_{4\pi} \sigma(\mathbf{x}, E')f(\mathbf{x}, \mathbf{\Omega}', E' \rightarrow \mathbf{\Omega}, E)v'N(\mathbf{x}, \mathbf{\Omega}', E', t)d\mathbf{\Omega}'dE' \right] & dVd\mathbf{\Omega}dE\Delta t, \end{aligned} \quad (2.16)$$

ou através de fontes internas de partículas em $dV d\Omega dE$

$$S(\mathbf{x}, \Omega, E, t) dV d\Omega dE \Delta t. \quad (2.17)$$

Assim, ao eliminar $dV d\Omega dE$, é obtida

$$\begin{aligned} N(\mathbf{x} + \Omega v \Delta t, \Omega, E, t + \Delta t) = & \\ & N(\mathbf{x}, \Omega, E, t)(1 - \sigma(\mathbf{x}, E)v\Delta t) \\ & + \int_0^\infty \int_{4\pi} \sigma(\mathbf{x}, E') f(\mathbf{x}, \Omega', E' \rightarrow \Omega, E) v' N(\mathbf{x}, \Omega', E', t) d\Omega' dE' \Delta t \\ & + S(\mathbf{x}, \Omega, E, t) \Delta t. \end{aligned} \quad (2.18)$$

Ambos os lados da equação são divididos por Δt e é tomado o limite $\Delta t \rightarrow 0$,

$$\frac{dN}{dt} + \sigma v N(\mathbf{x}, \Omega, E, t) = \int_0^\infty \int_{4\pi} \sigma' f v' N(\mathbf{x}, \Omega', E', t) d\Omega' dE' + S(\mathbf{x}, \Omega, E, t), \quad (2.19)$$

onde $\sigma' = \sigma(\mathbf{x}, E')$ e $f = f(\mathbf{x}, \Omega', E' \rightarrow \Omega, E)$, e dN/dt é a derivada material de N .

Do cálculo vetorial, [24],

$$\frac{dN}{dt}(\mathbf{x}, \Omega, E, t) = \frac{\partial N}{\partial t}(\mathbf{x}, \Omega, E, t) + v \Omega \cdot \nabla N(\mathbf{x}, \Omega, E, t), \quad (2.20)$$

de onde decorre que

$$\begin{aligned} \frac{\partial N}{\partial t}(\mathbf{x}, \Omega, E, t) + v \Omega \cdot \nabla N(\mathbf{x}, \Omega, E, t) + \sigma v N(\mathbf{x}, \Omega, E, t) \\ = \int_0^\infty \int_{4\pi} \sigma' f v' N(\mathbf{x}, \Omega', E', t) d\Omega' dE' + S(\mathbf{x}, \Omega, E, t), \end{aligned} \quad (2.21)$$

Alternativamente, a equação pode ser escrita em termos do *fluxo angular de nêutrons*, este definido por

$$\psi(\mathbf{x}, \Omega, E, t) = v N(\mathbf{x}, \Omega, E, t), \quad (2.22)$$

o que resulta em

$$\begin{aligned} \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \psi(\mathbf{x}, \Omega, E, t) + \Omega \cdot \nabla \psi(\mathbf{x}, \Omega, E, t) + \sigma \psi(\mathbf{x}, \Omega, E, t) \\ = \int_0^\infty \int_{4\pi} \sigma' f \psi(\mathbf{x}, \Omega', E', t) d\Omega' dE' + S(\mathbf{x}, \Omega, E, t). \end{aligned} \quad (2.23)$$

Nos problemas considerados no presente trabalho, o interesse está centrado no caso estacionário, no qual não há dependência no tempo. Logo, a equação de transporte assume a forma

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, E) + \sigma \psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, E) \\ = \int_0^\infty \int_{4\pi} \sigma' f \psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}', E') d\boldsymbol{\Omega}' dE' + S(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, E). \end{aligned} \quad (2.24)$$

Se todas as seções de choque forem independentes da energia ou, equivalentemente, todas as partículas neutras tiverem a mesma energia, então a equação de transporte pode ser escrita como em [14, 19, 43]

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma \psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}) = \int_{4\pi} \sigma' f \psi(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' + S(\mathbf{x}, \boldsymbol{\Omega}, E). \quad (2.25)$$

Quanto à geometria do problema, somente são considerados problemas em geometria plana infinita (*slab-geometry*), com simetria azimutal, onde a equação de transporte assume a forma [14, 19]

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi(z, \mu) + \sigma(z) \psi(z, \mu) = 2\pi \int_{-1}^1 \sigma(z) f(z, \mu' \rightarrow \mu) \psi(z, \mu') d\mu' + S(z, \mu), \quad (2.26)$$

para $z \in [z_0, z_R]$, onde $\mu = \cos \theta$, com θ o ângulo polar relativo à normal do eixo z .

Por fim, em problemas determinísticos, o termo de espalhamento é frequentemente expresso como uma expansão truncada em polinômios de Legendre da forma [14, 19]

$$\sigma(z) f(z, \mu' \rightarrow \mu) = \frac{1}{4\pi} \sum_{l=0}^L f_l(z) P_l(\mu') P_l(\mu), \quad (2.27)$$

onde $P_l(\mu)$ é o l -ésimo polinômio de Legendre [1] e L , a ordem da expansão, é o grau de anisotropia do espalhamento. A equação de transporte assume a forma

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi(z, \mu) + \sigma(z) \psi(z, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l(z) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi(z, \mu') d\mu' + S(z, \mu), \quad (2.28)$$

onde as informações sobre o modelo de espalhamento são descritas pelos pesos da expansão em polinômios de Legendre $f_l(z)$, $l = 1, \dots, L$. No caso especial onde

$L = 0$, o espalhamento é dito isotrópico, isto é, sem preferência de direções, e $f_0(z)$ é simplesmente a seção de choque de espalhamento.

A equação de transporte é frequentemente resolvida em regiões compostas por mais de um material e, na interface entre esses materiais, as funções $\sigma(z)$ e $f_l(z)$ são provavelmente descontínuas [14]. Entretanto, o número de nêutrons não pode ser alterado por simplesmente cruzar a interface entre dois materiais com diferentes propriedades. Desta forma, é imposta a continuidade do fluxo angular através de uma condição de salto nas interfaces entre diferentes materiais.

Uma maneira genérica de expressar as condições de contorno para a grandeza angular em transporte de partículas, como na Eq. (2.28), é através da imposição de restrições nas direções incidentes da fronteira. Neste trabalho, são consideradas

$$\psi(z_0, \mu) = g_1(\mu) + \rho_1^s \psi(z_0, -\mu) + 2\rho_1^d \int_0^1 \mu' \psi(z_0, -\mu') d\mu' \quad (2.29)$$

e

$$\psi(z_R, -\mu) = g_2(\mu) + \rho_2^s \psi(z_R, \mu) + 2\rho_2^d \int_0^1 \mu' \psi(z_R, \mu') d\mu' \quad (2.30)$$

para $\mu \in (0, 1]$, onde g_1 e g_2 são conhecidas e representam o fluxo angular incidente nas fronteiras, ρ_1^s e ρ_2^s são os coeficientes de reflexão especular, e ρ_1^d e ρ_2^d são os coeficientes de reflexão difusa. Para nêutrons, em geral é considerada apenas a reflexão especular com $\rho_1^s = \rho_2^s = 1$ [28], entretanto, para efeitos de obtenção de uma formulação mais geral, é considerada aqui a forma completa dada pelas Eqs. (2.29) e (2.30).

É destacado que neste trabalho, as seções de choque e os coeficientes de espalhamento são considerados constantes em um mesmo material. No próximo capítulo, será derivada a equação adjunta de transporte com base na Eq. (2.28) e serão discutidas as condições de contorno a serem utilizadas nas aplicações da equação adjunta.

3 O OPERADOR ADJUNTO DE TRANSPORTE

Neste capítulo, é deduzida a equação adjunta de transporte a partir da equação de transporte, Eq. (2.28), derivada no capítulo 2. A relação entre estas duas equações será de grande importância para as aplicações do capítulo 5.

3.1 O operador adjunto de transporte

A equação de transporte monoenergética em geometria plana infinita com espalhamento anisotrópico e simetria azimutal, deduzida no capítulo 2 e discutida em maior profundidade em [14, 19, 28, 41], pode ser escrita como

$$\mathcal{L}\psi = S, \quad (3.1)$$

onde ψ é o fluxo angular de nêutrons, $S = S(z, \mu)$ é um termo fonte e \mathcal{L} é o operador de transporte definido por

$$\mathcal{L}\psi(z, \mu) \equiv \mu \frac{\partial}{\partial z} \psi(z, \mu) + \sigma(z)\psi(z, \mu) - \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l(z) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi(z, \mu') d\mu', \quad (3.2)$$

onde $z \in (z_0, z_R)$, $\mu \in [-1, 1]$, σ é seção de choque macroscópica total, L é o grau de anisotropia, P_l é o l -ésimo polinômio de Legendre, e f_l , $l = 0, \dots, L$, são os coeficientes da expansão do termo de espalhamento em polinômios de Legendre.

Dado um operador linear \mathcal{L} e um par de funções ψ e ψ^\dagger , integráveis e suficientemente suaves para que as operações façam sentido, com condições de contorno apropriadas, o operador adjunto de \mathcal{L} é definido como o operador \mathcal{L}^\dagger tal que

$$\langle \mathcal{L}\psi, \psi^\dagger \rangle = \langle \psi, \mathcal{L}^\dagger \psi^\dagger \rangle, \quad (3.3)$$

onde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ é o produto interno definido no espaço de fase por

$$\langle f, g \rangle = \int_{z_0}^{z_R} \int_{-1}^1 f(z, \mu) g(z, \mu) d\mu dz. \quad (3.4)$$

A Eq. (3.3) apresenta uma heurística para a obtenção do operador adjunto: tome $\mathcal{L}\psi$ e multiplique por ψ^\dagger ; integre em $z \in (z_0, z_R)$ e $\mu \in (-1, 1)$ de maneira a obter $\langle \mathcal{L}\psi, \psi^\dagger \rangle$; faça as operações necessárias, no caso integração por partes e mudanças na ordem de integração, de maneira a obter $\langle \psi, \mathcal{L}^\dagger \psi^\dagger \rangle$, onde ψ está livre; $\mathcal{L}^\dagger \psi^\dagger$ define o operador adjunto de \mathcal{L} .

Como o operador de transporte \mathcal{L} , definido na Eq. (3.2), é linear, o mesmo será reescrito para facilitar a notação como

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2 - \mathcal{L}_3, \quad (3.5)$$

onde \mathcal{L}_1 é tal que

$$\mathcal{L}_1 \psi(z, \mu) = \mu \frac{\partial}{\partial z} \psi(z, \mu), \quad (3.6)$$

\mathcal{L}_2 é definido por

$$\mathcal{L}_2 \psi(z, \mu) = \sigma \psi(z, \mu), \quad (3.7)$$

e, por fim, \mathcal{L}_3 é da forma

$$\mathcal{L}_3 \psi(z, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi(z, \mu') d\mu'. \quad (3.8)$$

A ideia é obter os operadores adjuntos de \mathcal{L}_1 , \mathcal{L}_2 e \mathcal{L}_3 , de maneira a formular o operador adjunto de \mathcal{L} através da bilinearidade do produto interno definido na Eq. (3.4).

Para a obtenção de \mathcal{L}_1^\dagger , são realizadas trocas na ordem de integração e integração por partes [25]

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{L}_1 \psi, \psi^\dagger \rangle &\equiv \int_{z_0}^{z_R} \int_{-1}^1 \left[\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi(z, \mu) \right] \psi^\dagger(z, \mu) d\mu dz \\ &= \int_{-1}^1 \int_{z_0}^{z_R} \frac{\partial}{\partial z} \psi(z, \mu) [\mu \psi^\dagger(z, \mu)] dz d\mu \\ &= \int_{-1}^1 \left[\mu \psi(z, \mu) \psi^\dagger(z, \mu) \Big|_{z=z_0}^{z_R} - \int_{z_0}^{z_R} \psi(z, \mu) \left[\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi^\dagger(z, \mu) \right] dz \right] d\mu \quad (3.9) \\ &= \int_{-1}^1 \mu \psi(z, \mu) \psi^\dagger(z, \mu) \Big|_{z=z_0}^{z_R} d\mu + \int_{z_0}^{z_R} \int_{-1}^1 \psi(z, \mu) \left[-\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi^\dagger(z, \mu) \right] d\mu dz \\ &\equiv P[\psi, \psi^\dagger] + \langle \psi, \mathcal{L}_1^\dagger \psi^\dagger \rangle \end{aligned}$$

onde $P[\psi, \psi^\dagger]$ é tal que

$$P[\psi, \psi^\dagger] \equiv \int_{-1}^1 \mu [\psi(z_R, \mu) \psi^\dagger(z_R, \mu) - \psi(z_0, \mu) \psi^\dagger(z_0, \mu)] d\mu. \quad (3.10)$$

e depende de informações das condições de contorno de ψ e ψ^\dagger . Esse termo será discutido na seção 3.2. Desta forma, o operador adjunto de \mathcal{L}_1 , Eq. (3.6), é definido por

$$\mathcal{L}_1^\dagger \psi^\dagger(z, \mu) \equiv -\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi^\dagger(z, \mu). \quad (3.11)$$

O operador \mathcal{L}_2^\dagger é idêntico ao operador \mathcal{L}_2 , e para se verificar isto basta alterar a ordem do produto dentro da integral

$$\begin{aligned} \langle \mathcal{L}_2 \psi, \psi^\dagger \rangle &\equiv \int_{z_0}^{z_R} \int_{-1}^1 [\sigma \psi(z, \mu)] \psi^\dagger(z, \mu) d\mu dz \\ &= \int_{z_0}^{z_R} \int_{-1}^1 \psi(z, \mu) [\sigma \psi^\dagger(z, \mu)] d\mu dz \\ &\equiv \langle \psi, \mathcal{L}_2^\dagger \psi^\dagger \rangle. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Logo, o operador adjunto de \mathcal{L}_2 , Eq. (3.7), é dado por

$$\mathcal{L}_2^\dagger \psi^\dagger(z, \mu) \equiv \sigma \psi^\dagger(z, \mu) \equiv \mathcal{L}_2 \psi^\dagger(z, \mu). \quad (3.13)$$

Finalmente, para que o operador \mathcal{L}_3^\dagger seja obtido, é aplicada a troca na ordem de integração de maneira a escrever

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{L}_3 \psi, \psi^\dagger \rangle &\equiv \int_{z_0}^{z_R} \int_{-1}^1 \left[\frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi(z, \mu') d\mu' \right] \psi^\dagger(z, \mu) d\mu dz \\
&= \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l \int_{z_0}^{z_R} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 P_l(\mu) \left[P_l(\mu') \psi(z, \mu') \right] \psi^\dagger(z, \mu) d\mu' d\mu dz \\
&= \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l \int_{z_0}^{z_R} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \psi(z, \mu') P_l(\mu') \left[P_l(\mu) \psi^\dagger(z, \mu) \right] d\mu' d\mu dz \\
&= \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l \int_{z_0}^{z_R} \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 \psi(z, \mu') P_l(\mu') \left[P_l(\mu) \psi^\dagger(z, \mu) \right] d\mu d\mu' dz \quad (3.14) \\
&= \int_{z_0}^{z_R} \int_{-1}^1 \psi(z, \mu') \left[\frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l P_l(\mu') \int_{-1}^1 P_l(\mu) \psi^\dagger(z, \mu) d\mu \right] d\mu' dz \\
&= \int_{z_0}^{z_R} \int_{-1}^1 \psi(z, \mu) \left[\frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi^\dagger(z, \mu') d\mu' \right] d\mu dz \\
&\equiv \langle \psi, \mathcal{L}_3^\dagger \psi^\dagger \rangle,
\end{aligned}$$

onde as variáveis mudas μ e μ' têm seus rótulos alternados na última igualdade. O operador \mathcal{L}_3^\dagger adjunto de \mathcal{L}_3 , Eq. (3.8), é definido como

$$\mathcal{L}_3^\dagger \psi^\dagger(z, \mu) \equiv \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi^\dagger(z, \mu') d\mu'. \quad (3.15)$$

Vale destacar que $\mathcal{L}_3 = \mathcal{L}_3^\dagger$ e essa é relação válida apenas para o caso monoenergético [19]. Por fim, pela bilinearidade do produto interno definido na Eq. (3.4), é obtido

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{L} \psi, \psi^\dagger \rangle &= \langle (\mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2 - \mathcal{L}_3) \psi, \psi^\dagger \rangle = \langle \mathcal{L}_1 \psi + \mathcal{L}_2 \psi - \mathcal{L}_3 \psi, \psi^\dagger \rangle \\
&= \langle \mathcal{L}_1 \psi, \psi^\dagger \rangle + \langle \mathcal{L}_2 \psi, \psi^\dagger \rangle - \langle \mathcal{L}_3 \psi, \psi^\dagger \rangle \\
&= P[\psi, \psi^\dagger] + \langle \psi, \mathcal{L}_1^\dagger \psi^\dagger \rangle + \langle \psi, \mathcal{L}_2^\dagger \psi^\dagger \rangle - \langle \psi, \mathcal{L}_3^\dagger \psi^\dagger \rangle \\
&= P[\psi, \psi^\dagger] + \langle \psi, \mathcal{L}_1^\dagger \psi^\dagger + \mathcal{L}_2^\dagger \psi^\dagger - \mathcal{L}_3^\dagger \psi^\dagger \rangle \quad (3.16) \\
&= P[\psi, \psi^\dagger] + \langle \psi, (\mathcal{L}_1^\dagger + \mathcal{L}_2^\dagger - \mathcal{L}_3^\dagger) \psi^\dagger \rangle \\
&= P[\psi, \psi^\dagger] + \langle \psi, \mathcal{L}^\dagger \psi^\dagger \rangle,
\end{aligned}$$

definindo o operador \mathcal{L}^\dagger por

$$\mathcal{L}^\dagger \psi^\dagger(z, \mu) \equiv -\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi^\dagger(z, \mu) + \sigma \psi^\dagger(z, \mu) - \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi^\dagger(z, \mu') d\mu', \quad (3.17)$$

onde ψ^\dagger é chamado de fluxo angular adjunto. Destaca-se que a relação estabelecida na Eq. (3.16) difere daquela buscada na Eq. (3.3), uma vez que o termo $P[\psi, \psi^\dagger]$, definido na Eq. (3.10) não é necessariamente nulo.

3.2 Condições de Contorno para a Equação Adjunta de Transporte

O termo $P[\psi, \psi^\dagger]$, definido na Eq. (3.10) da seção 3.1, depende apenas de informações do contorno de ψ e ψ^\dagger . Inicialmente, $P[\psi, \psi^\dagger]$ é escrito como

$$\begin{aligned} P[\psi, \psi^\dagger] &= \int_{-1}^1 \mu \psi(z, \mu) \psi^\dagger(z, \mu) \Big|_{z=z_0}^{z_R} d\mu \\ &= \int_0^1 \mu \psi(z, \mu) \psi^\dagger(z, \mu) \Big|_{z=z_0}^{z_R} d\mu + \int_{-1}^0 \mu \psi(z, \mu) \psi^\dagger(z, \mu) \Big|_{z=0}^{z_0} d\mu \\ &= \int_0^1 \mu \psi(z, \mu) \psi^\dagger(z, \mu) \Big|_{z=z_0}^{z_R} d\mu - \int_0^1 \mu \psi(z, -\mu) \psi^\dagger(z, -\mu) \Big|_{z=z_0}^{z_R} d\mu. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Através das condições de contorno definidas nas Eqs. (2.29) e (2.30), a primeira parcela da soma na Eq. (3.18) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} &\int_0^1 \mu \psi(z, \mu) \psi^\dagger(z, \mu) \Big|_{z=z_0}^{z_R} d\mu \\ &= \int_0^1 \mu [\psi(z_R, \mu) \psi^\dagger(z_R, \mu) - \psi(z_0, \mu) \psi^\dagger(z_0, \mu)] d\mu \\ &= \int_0^1 \mu \psi(z_R, \mu) \psi^\dagger(z_R, \mu) d\mu \\ &\quad - \int_0^1 \mu g_1(\mu) \psi^\dagger(z_0, \mu) d\mu \\ &\quad - \rho_1^s \int_0^1 \mu \psi(z_0, -\mu) \psi^\dagger(z_0, \mu) d\mu \\ &\quad - 2\rho_1^d \int_0^1 \mu \left[\int_{-1}^1 \mu' \psi(z_0, -\mu') d\mu' \right] \psi^\dagger(z_0, \mu) d\mu, \end{aligned} \quad (3.19)$$

enquanto a segunda parcela na soma na Eq. (3.18) é reescrita como

$$\begin{aligned}
& - \int_0^1 \mu \psi(z, -\mu) \psi^\dagger(z, -\mu) \Big|_{z=z_0}^{z_R} d\mu \\
& = \int_0^1 \mu [\psi(z_0, -\mu) \psi^\dagger(z_0, -\mu) - \psi(z_R, -\mu) \psi^\dagger(z_R, -\mu)] d\mu \\
& = \int_0^1 \mu \psi(z_0, -\mu) \psi^\dagger(z_0, -\mu) d\mu \\
& - \int_0^1 \mu g_2(\mu) \psi^\dagger(z_R, -\mu) d\mu \\
& - \rho_2^s \int_0^1 \mu \psi(z_R, \mu) \psi^\dagger(z_R, -\mu) d\mu \\
& - 2\rho_2^d \int_0^1 \mu \left[\int_{-1}^1 \mu' \psi(z_R, \mu') d\mu' \right] \psi^\dagger(z_R, -\mu) d\mu.
\end{aligned} \tag{3.20}$$

Antecedendo as aplicações a serem vistas no capítulo 5, uma escolha adequada para as condições de contorno de ψ^\dagger é fundamental para a simplificação das Eqs. (3.19) e (3.20). Para tal fim, suponha que ψ^\dagger obedeça

$$\begin{aligned}
\psi^\dagger(z_0, -\mu) & = \rho_1^s \psi^\dagger(z_0, \mu) + 2\rho_1^d \int_0^1 \mu' \psi^\dagger(z_0, \mu') d\mu', \\
\psi^\dagger(z_R, \mu) & = \rho_2^s \psi^\dagger(z_R, -\mu) + 2\rho_2^d \int_0^1 \mu' \psi^\dagger(z_R, -\mu') d\mu',
\end{aligned} \tag{3.21}$$

onde $\mu \in (0,1]$ e as constantes ρ_i^s, ρ_i^d , com $i = 1,2$, são as mesmas das condições de contorno do problema de transporte definidas nas Eqs. (2.29) e (2.30). Desta forma, a Eq. (3.19) é reescrita como

$$\begin{aligned}
& \int_0^1 \mu \psi(z, \mu) \psi^\dagger(z, \mu) \Big|_{z=z_0}^{z_R} d\mu \\
& = \rho_2^s \int_0^1 \mu \psi(z_R, \mu) \psi^\dagger(z_R, -\mu) d\mu \\
& + 2\rho_2^d \int_0^1 \mu \psi(z_R, \mu) \left[\int_{-1}^1 \mu' \psi^\dagger(z_R, -\mu') d\mu' \right] d\mu \\
& - \int_0^1 \mu g_1(\mu) \psi^\dagger(z_0, \mu) d\mu \\
& - \rho_1^s \int_0^1 \mu \psi(z_0, -\mu) \psi^\dagger(z_0, \mu) d\mu \\
& - 2\rho_1^d \int_0^1 \mu \left[\int_{-1}^1 \mu' \psi(z_0, -\mu') d\mu' \right] \psi^\dagger(z_0, \mu) d\mu,
\end{aligned} \tag{3.22}$$

e a Eq. (3.20) como

$$\begin{aligned}
& - \int_0^1 \mu \psi(z, -\mu) \psi^\dagger(z, -\mu) \Big|_{z=z_0}^{z_R} d\mu \\
& = \rho_1^s \int_0^1 \mu \psi(z_0, -\mu) \psi^\dagger(z_0, \mu) d\mu \\
& + 2\rho_1^d \int_0^1 \mu \left[\int_{-1}^1 \mu' \psi^\dagger(z_0, \mu') d\mu' \right] \psi(z_0, -\mu) d\mu \\
& - \int_0^1 \mu g_2(\mu) \psi^\dagger(z_R, -\mu) d\mu \\
& - \rho_2^s \int_0^1 \mu \psi(z_R, \mu) \psi^\dagger(z_R, -\mu) d\mu \\
& - 2\rho_2^d \int_0^1 \mu \left[\int_{-1}^1 \mu' \psi(z_R, \mu') d\mu' \right] \psi^\dagger(z_R, -\mu) d\mu.
\end{aligned} \tag{3.23}$$

Alterando a ordem das integrais nas Eqs. (3.22) e (3.23), alternando os rótulos das variáveis μ e μ' e substituindo na Eq. (3.18), é obtida uma nova expressão para a Eq. (3.10)

$$\begin{aligned}
P[\psi, \psi^\dagger] & \equiv \int_{-1}^1 \mu \psi(z, \mu) \psi^\dagger(z, \mu) \Big|_{z=z_0}^{z_R} d\mu = \\
& - \int_0^1 \mu [g_1(\mu) \psi^\dagger(z_0, \mu) + g_2(\mu) \psi^\dagger(z_R, -\mu)] d\mu \equiv P[g_1, g_2, \psi^\dagger].
\end{aligned} \tag{3.24}$$

Salienta-se que as condições de contorno para a equação adjunta definidas na Eq. (3.21) não possuem sentido físico, sendo artifícios matemáticos.

3.3 A Equação Adjunta de Transporte

Por fim, a equação adjunta de transporte é dada por

$$-\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi^\dagger(z, \mu) + \sigma(z) \psi^\dagger(z, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l(z) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi^\dagger(z, \mu') d\mu' + S^\dagger(z, \mu), \tag{3.25}$$

com termo fonte onde $S^\dagger = S^\dagger(z, \mu)$, onde $z \in (z_0, z_R)$, $\mu \in [-1, 1]$, σ é a seção de choque macroscópica total, L é o grau de anisotropia, P_l é o l -ésimo polinômio

de Legende, e f_l , com $l = 0, \dots, L$, são os coeficientes da expansão do termo de espalhamento em polinômios de Legende. As condições contorno são as definidas na Eq. (3.21)

$$\begin{aligned}\psi^\dagger(z_0, -\mu) &= \rho_1^s \psi^\dagger(z_0, \mu) + \rho_1^d \int_0^1 \mu' \psi^\dagger(z_0, \mu') d\mu', \\ \psi^\dagger(z_R, \mu) &= \rho_2^s \psi^\dagger(z_R, -\mu) + \rho_2^d \int_0^1 \mu' \psi^\dagger(z_R, -\mu') d\mu',\end{aligned}$$

com ρ_i^s e ρ_i^d , $i = 1, 2$, os coeficientes de reflexão especular e difusa, respectivamente. Ademais, o fluxo angular, ψ , e o fluxo angular adjunto, ψ^\dagger , obedecem a relação

$$\langle \mathcal{L}\psi, \psi^\dagger \rangle = P[g_1, g_2, \psi^\dagger] + \langle \psi, \mathcal{L}^\dagger \psi^\dagger \rangle,$$

com

$$P[g_1, g_2, \psi^\dagger] = \int_0^1 \mu [g_1(\mu) \psi^\dagger(z_0, \mu) + g_2(\mu) \psi^\dagger(z_R, -\mu)] d\mu,$$

relação fundamental para as aplicações que serão apresentadas no capítulo 5.

No próximo capítulo será derivado um método numérico para a obtenção de soluções da equação adjunta de transporte, Eq. (3.25), através do formalismo do método Analítico das Ordenadas Discretas (ADO) [8, 12]. Serão considerados problemas multirregiões e termos-fonte gerais através da formulação em funções de Green em meio infinito, nos moldes de [9, 20].

4 FORMULAÇÃO ADO PARA A EQUAÇÃO ADJUNTA DE TRANSPORTE

O método Analítico das Ordenadas Discretas (ADO) foi originalmente proposto por Barichello e Siewert [10, 12] para a resolução de problemas de transporte unidimensionais. Neste capítulo, a formulação ADO será desenvolvida para a equação adjunta de transporte.

4.1 Formulação ADO em meio homogêneo

Considera-se a equação adjunta de transporte definida pela Eq. (3.25) com condições de contorno dadas pela Eq. (3.21). Neste trabalho, a seção de choque macroscópica total, σ , é constante, bem como os coeficientes f_l da expansão em polinômios de Legendre do termo de espalhamento. Como o problema é linear, serão inicialmente consideradas apenas soluções para a equação homogênea, isto é, com $S^\dagger = 0$.

O formalismo clássico proposto pelo método das ordenadas discretas visa aproximar o termo integral da Eq. (3.25) por uma regra de quadratura no intervalo $[-1,1]$ e gerar um sistema de equações ordinárias discretizando a variável angular nas direções propostas pela regra de quadratura. O sistema obtido é finalmente resolvido, por exemplo, por algum método numérico, como diferenças finitas [14]. Diferentemente, no método ADO, o primeiro passo é reescrever o termo integral da Eq. (3.25) de maneira a ser obtida

$$\begin{aligned} -\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi^\dagger(z, \mu) + \sigma \psi^\dagger(z, \mu) \\ = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l P_l(\mu) \int_0^1 P_l(\mu') [\psi^\dagger(z, \mu') + (-1)^l \psi^\dagger(z, -\mu')] d\mu', \end{aligned} \quad (4.1)$$

onde é utilizada a identidade $P_l(-\mu) = (-1)^l P_l(\mu)$ dos polinômios de Legendre [1].

Seja (w_k, μ_k) , $k = 1, \dots, N$, pesos e nós de uma regra de quadratura arbitrária definida no intervalo $[0,1]$. Como exemplo, Gauss-Legendre [18] mapeado do intervalo $[-1,1]$ para o intervalo $[0,1]$. O termo integral da Eq. (4.1) é aproximado pela regra de quadratura

$$\begin{aligned} -\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi^\dagger(z, \mu) + \sigma \psi^\dagger(z, \mu) \\ = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l P_l(\mu) \sum_{k=1}^N w_k P_l(\mu_k) [\psi^\dagger(z, \mu_k) + (-1)^l \psi^\dagger(z, -\mu_k)], \end{aligned} \quad (4.2)$$

e a equação é avaliada nas direções $\mu = \pm \mu_i$, $i = 1, \dots, N$, dando origem a um sistema de $2N$ equações diferenciais ordinárias

$$\begin{aligned} -\mu_i \frac{d}{dz} \psi^\dagger(z, \mu_i) + \sigma \psi^\dagger(z, \mu_i) \\ = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l P_l(\mu_i) \sum_{k=1}^N w_k P_l(\mu_k) [\psi^\dagger(z, \mu_k) + (-1)^l \psi^\dagger(z, -\mu_k)], \end{aligned} \quad (4.3)$$

e

$$\begin{aligned} \mu_i \frac{d}{dz} \psi^\dagger(z, -\mu_i) + \sigma \psi^\dagger(z, -\mu_i) \\ = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l P_l(\mu_i) \sum_{k=1}^N w_k P_l(\mu_k) [(-1)^l \psi^\dagger(z, \mu_k) + \psi^\dagger(z, -\mu_k)], \end{aligned} \quad (4.4)$$

para $i = 1, \dots, N$.

Supõe-se soluções exponenciais da forma

$$\psi^\dagger(z, \mu_i) = \phi^\nu(\mu_i) e^{-z/\nu}, \quad (4.5)$$

e

$$\psi^\dagger(z, -\mu_i) = \phi^\nu(-\mu_i) e^{-z/\nu}, \quad (4.6)$$

para $i = 1, \dots, N$, com ν constante arbitrária. Ao substituir as Eqs. (4.5) e (4.6) nas Eqs. (4.3) e (4.4), respectivamente, é obtido o sistema de $2N$ equações diferenciais ordinárias

$$\begin{aligned} -\mu_i \frac{d}{dz} [\phi^\nu(\mu_i) e^{-z/\nu}] + \sigma \phi^\nu(\mu_i) e^{-z/\nu} \\ = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l P_l(\mu_i) \sum_{k=1}^N w_k P_l(\mu_k) [\phi^\nu(\mu_k) + (-1)^l \phi^\nu(-\mu_k)] e^{-z/\nu}, \end{aligned} \quad (4.7)$$

e

$$\begin{aligned} \mu_i \frac{d}{dz} [\phi^\nu(-\mu_i) e^{-z/\nu}] + \sigma \phi^\nu(-\mu_i) e^{-z/\nu} \\ = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l P_l(\mu_i) \sum_{k=1}^N w_k P_l(\mu_k) [(-1)^l \phi^\nu(\mu_k) + \phi^\nu(-\mu_k)] e^{-z/\nu}, \end{aligned} \quad (4.8)$$

para $i = 1, \dots, N$. O sistema é simplificado resolvendo a derivada em z e dividindo ambos os lados da equação por $e^{-z/\nu} > 0$, resultando no sistema de $2N$ equações algébricas

$$\left(\sigma + \frac{\mu_i}{\nu} \right) \phi^\nu(\mu_i) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l P_l(\mu_i) \sum_{k=1}^N w_k P_l(\mu_k) [\phi^\nu(\mu_k) + (-1)^l \phi^\nu(-\mu_k)], \quad (4.9)$$

e

$$\left(\sigma - \frac{\mu_i}{\nu} \right) \phi^\nu(-\mu_i) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l P_l(\mu_i) \sum_{k=1}^N w_k P_l(\mu_k) [\phi^\nu(-\mu_k) + (-1)^l \phi^\nu(\mu_k)], \quad (4.10)$$

para $i = 1, \dots, N$

O objetivo é determinar um conjunto de constantes de separação ν a fim de escrever a solução da equação adjunta como uma combinação linear de autofunções $\phi^\nu(\mu_i)$, $i = 1, \dots, N$. Para isso, será deduzido a seguir um problema de autovalores com base nas Eqs. (4.9) e (4.10). São introduzidos os vetores do \mathbb{R}^N

$$\Phi_+^\nu = [\phi^\nu(\mu_1) \cdots \phi^\nu(\mu_N)]^T, \quad (4.11)$$

$$\Phi_-^\nu = [\phi^\nu(-\mu_1) \cdots \phi^\nu(-\mu_N)]^T, \quad (4.12)$$

e

$$\Pi_l = [P_l(\mu_1) \cdots P_l(\mu_N)]^T, \quad (4.13)$$

onde x^T denota a operação de transposição de um vetor $x \in \mathbb{R}^N$, e as matrizes do $\mathbb{R}^{N \times N}$

$$\mathcal{M} = \text{diag}(\mu_1, \dots, \mu_N), \quad (4.14)$$

e

$$\mathcal{W} = \text{diag}(w_1, \dots, w_N). \quad (4.15)$$

A partir das Eqs. (4.11)-(4.15), o sistema de equações algébricas definido pelas Eqs. (4.9) e (4.10) pode ser reescrito de maneira vetorial como

$$\left(\sigma I + \frac{1}{\nu} \mathcal{M}\right) \Phi_+^\nu = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l \Pi_l \Pi_l^T \mathcal{W} [\Phi_+^\nu + (-1)^l \Phi_-^\nu], \quad (4.16)$$

e

$$\left(\sigma I - \frac{1}{\nu} \mathcal{M}\right) \Phi_-^\nu = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l \Pi_l \Pi_l^T \mathcal{W} [\Phi_-^\nu + (-1)^l \Phi_+^\nu], \quad (4.17)$$

onde I denota a matriz identidade do $\mathbb{R}^{N \times N}$. São definidos os vetores do \mathbb{R}^N da soma, U^ν , e da diferença, V^ν , dos vetores definidos nas Eqs. (4.11) e (4.12) por

$$U^\nu = \Phi_+^\nu + \Phi_-^\nu, \quad (4.18)$$

e

$$V^\nu = \Phi_+^\nu - \Phi_-^\nu, \quad (4.19)$$

de maneira a obter, quando somadas as Eqs. (4.16) e (4.17),

$$\left(\sigma I - \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l \Pi_l \Pi_l^T \mathcal{W} [1 + (-1)^l]\right) U^\nu = -\frac{1}{\nu} \mathcal{M} V^\nu, \quad (4.20)$$

e, quando subtraídas,

$$\left(\sigma I - \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l \Pi_l \Pi_l^T \mathcal{W} [1 - (-1)^l]\right) V^\nu = -\frac{1}{\nu} \mathcal{M} U^\nu. \quad (4.21)$$

Definindo as matrizes \mathcal{A} e \mathcal{B} do $\mathbb{R}^{N \times N}$

$$\mathcal{A} = \left(\sigma I - \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l \Pi_l \Pi_l^T \mathcal{W} [1 + (-1)^l]\right) \mathcal{M}^{-1}, \quad (4.22)$$

e

$$\mathcal{B} = \left(\sigma I - \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l \Pi_l \Pi_l^T \mathcal{W} [1 - (-1)^l]\right) \mathcal{M}^{-1}, \quad (4.23)$$

e, a partir das Eqs. (4.20) e (4.21), são obtidos os problemas de autovalores

$$\mathcal{A} \mathcal{X}^\nu = -\frac{1}{\nu} \mathcal{Z}^\nu, \quad (4.24)$$

e

$$\mathcal{B}\mathcal{Z}^\nu = -\frac{1}{\nu}\mathcal{X}^\nu, \quad (4.25)$$

onde os vetores \mathcal{X}^ν e \mathcal{Z}^ν do \mathbb{R}^N são definidos por

$$\mathcal{X}^\nu = \mathcal{M}U^\nu, \quad (4.26)$$

e

$$\mathcal{Z}^\nu = \mathcal{M}V^\nu. \quad (4.27)$$

Através das Eq. (4.24) e (4.25) é possível obter um problema de autovalores de ordem N para \mathcal{X}^ν :

$$-\frac{1}{\nu}\mathcal{X}^\nu = \mathcal{B}\mathcal{Z}^\nu = \mathcal{B}(-\nu\mathcal{A}\mathcal{X}^\nu) = -\nu(\mathcal{B}\mathcal{A})\mathcal{X}^\nu, \quad (4.28)$$

ou

$$(\mathcal{B}\mathcal{A})\mathcal{X}^\nu = \frac{1}{\nu^2}\mathcal{X}^\nu. \quad (4.29)$$

Ao somar \mathcal{X}^ν na Eq. (4.24), é obtida

$$(I - \nu\mathcal{A})\mathcal{X}^\nu = \mathcal{X}^\nu - \nu\mathcal{A}\mathcal{X}^\nu = \mathcal{X}^\nu + \mathcal{Z}^\nu = 2\mathcal{M}\Phi_+^\nu, \quad (4.30)$$

ou

$$\Phi_+^\nu = \frac{1}{2}\mathcal{M}^{-1}(I - \nu\mathcal{A})\mathcal{X}^\nu. \quad (4.31)$$

De maneira semelhante, ao subtrair \mathcal{X}^ν na Eq. (4.24), é obtida

$$\Phi_-^\nu = \frac{1}{2}\mathcal{M}^{-1}(I + \nu\mathcal{A})\mathcal{X}^\nu. \quad (4.32)$$

Nota-se que as Eqs. (4.31) e (4.32) obedecem a uma relação do tipo

$$\Phi_+^{-\nu} = \frac{1}{2}\mathcal{M}^{-1}(I - (-\nu)\mathcal{A})\mathcal{X}^\nu = \frac{1}{2}\mathcal{M}^{-1}(I + \nu\mathcal{A})\mathcal{X}^\nu = \Phi_-^\nu, \quad (4.33)$$

uma vez que ν e $-\nu$ satisfazem a Eq. (4.29). A Eq. (4.33) será conveniente para que a forma final da solução ADO para a equação adjunta de transporte seja escrita.

Por fim, supondo-se que o problema de autovalores da Eq. (4.29) tenha sido resolvido e que tenham sido obtidos N autovalores $1/\nu_1^2, \dots, 1/\nu_N^2$. Então são obtidas $\pm\nu_1, \dots, \pm\nu_N$, $2N$ constantes de separação, associadas as $2N$ autofunções $\Phi_+^{\nu_1}, \dots, \Phi_+^{\nu_N}$ e $\Phi_-^{\nu_1}, \dots, \Phi_-^{\nu_N}$. Desta maneira, a solução ADO da equação adjunta de transporte, Eq. (3.25), com termo fonte nulo é dada por

$$\Psi_+^\dagger(z) = \sum_{j=1}^N [A_j \Phi_+^{\nu_j} e^{-z/\nu_j} + B_j \Phi_-^{\nu_j} e^{(z_0-z)/\nu_j}], \quad (4.34)$$

e

$$\Psi_-^\dagger(z) = \sum_{j=1}^N [A_j \Phi_-^{\nu_j} e^{-z/\nu_j} + B_j \Phi_+^{\nu_j} e^{-(z_0-z)/\nu_j}], \quad (4.35)$$

onde os vetores Ψ_+^\dagger e Ψ_-^\dagger do \mathbb{R}^N são definidos de acordo com

$$\Psi_+^\dagger(z) = [\psi^\dagger(z, \mu_1) \cdots \psi^\dagger(z, \mu_n)]^T, \quad (4.36)$$

e

$$\Psi_-^\dagger(z) = [\psi^\dagger(z, -\mu_1) \cdots \psi^\dagger(z, -\mu_n)]^T. \quad (4.37)$$

Destaca-se que a fim de eliminar o risco *overflow* na avaliação numérica das exponenciais nas Eqs. (4.34) e (4.35), as mesmas são escritas de maneira deslocada [10]. As constantes A_j, B_j , $j = 1, \dots, N$ das Eqs. (4.34) e (4.35) são obtidas através das condições de contorno dadas pela Eq. (3.21). A forma final do sistema será discutida na seção 4.4.

4.2 Soluções Particulares

Dada a linearidade da equação adjunta de transporte, Eq. (3.25), sempre que a mesma for não homogênea, isto é, $S^\dagger \neq 0$, a solução da equação será dada pela solução da versão homogênea da equação de transporte, definida pelas Eqs. (4.34) e (4.35), acrescida de uma solução particular. Em outras palavras, supondo-se que ψ^P seja tal que

$$L^\dagger \psi^P = S^\dagger, \quad (4.38)$$

com condições de contorno apropriadas. Então, definidos

$$\Psi_+^P(z) = [\psi^P(z, \mu_1) \cdots \psi^P(z, \mu_n)]^T, \quad (4.39)$$

e

$$\Psi_-^P(z) = [\psi^P(z, -\mu_1) \cdots \psi^P(z, -\mu_n)]^T, \quad (4.40)$$

vetores do \mathbb{R}^N , a solução ADO da equação de transporte não homogênea é dada pelas equações

$$\Psi_+^\dagger(z) = \sum_{j=1}^N [A_j \Phi_+^{\nu_j} e^{-z/\nu_j} + B_j \Phi_-^{\nu_j} e^{(z_0-z)/\nu_j}] + \Psi_+^P(z), \quad (4.41)$$

e

$$\Psi_-^\dagger(z) = \sum_{j=1}^N [A_j \Phi_-^{\nu_j} e^{-z/\nu_j} + B_j \Phi_+^{\nu_j} e^{-(z_0-z)/\nu_j}] + \Psi_-^P(z), \quad (4.42)$$

onde, como na seção 4.1, as constantes A_j, B_j , $j = 1, \dots, N$ são determinadas a partir das condições de contorno da equação de transporte.

4.2.1 Fontes Constantes

Para o caso especial onde S^\dagger é constante, existe uma solução particular simples dada por

$$\psi^p = \frac{S^\dagger}{\sigma[1 - f_0/\sigma]}. \quad (4.43)$$

A fim de verificar a Eq. (4.43), basta supor uma solução ψ^p constante da Eq. (3.25). Desta forma, decorre por substituição direta

$$\begin{aligned} \sigma\psi^p &= \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi^p d\mu' + S^\dagger \\ &= \psi^p \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') d\mu' + S^\dagger = f_0\psi^p + S^\dagger, \end{aligned} \quad (4.44)$$

pois, pelas propriedades de ortogonalidade dos polinômios de Legendre [1],

$$\int_{-1}^1 P_l(\mu') d\mu' = \int_{-1}^1 P_0(\mu') P_l(\mu') d\mu' = 2\delta_{0,l}. \quad (4.45)$$

O resultado é obtido ao isolar ψ_p^\dagger na Eq. (4.44). Fica evidente pela Eq. (4.43) a exigência

$$f_0 \neq \sigma, \quad (4.46)$$

não sendo válida a solução para os casos nos quais a igualdade é verificada. Para esses casos, existe uma outra abordagem baseada nas funções de Green em meio infinito, a ser discutida a seguir.

4.2.2 Solução Particular via Função de Green

Para termos-fonte não constantes, a solução particular proposta pela Eq. (4.43) não é válida, sendo necessária uma abordagem mais geral para a obtenção de uma solução particular. A solução particular através da função de Green em meio infinito para aproximações via método de ordenadas discretas foi proposta por Barichello *et al.* [9] e também é válida para a equação adjunta de transporte, conforme será demonstrado.

4.2.2.1 Relação de ortogonalidade

Antes da determinação da solução particular por meio da função de Green em meio infinito, será necessária a construção de uma relação de ortogonalidade para as autofunções no intervalo $[-1,1]$. Por simplicidade, considera-se $(\hat{w}_k, \hat{\mu}_k)$, $k = 1, \dots, \hat{N}$, pesos e nós de uma regra de quadratura arbitrária do intervalo $[-1,1]$. Tome, por exemplo, $\hat{N} = 2N$ e nós

$$\hat{\mu}_1 = \mu_1, \dots, \hat{\mu}_{\hat{N}/2} = \mu_N, \hat{\mu}_{\hat{N}/2+1} = -\mu_1, \dots, \hat{\mu}_{\hat{N}} = -\mu_N, \quad (4.47)$$

com pesos

$$\hat{w}_1 = w_1, \dots, \hat{w}_{\hat{N}/2} = w_N, \hat{w}_{\hat{N}/2+1} = w_1, \dots, \hat{w}_{\hat{N}} = w_N, \quad (4.48)$$

onde (w_k, μ_k) , $k = 1, \dots, N$ são os pesos e nós da regra de quadratura anteriormente definida na seção 4.1. De maneira semelhante como na seção 4.1, é obtido um

sistema de equações para as autofunções

$$\left(\sigma + \frac{\hat{\mu}_i}{\nu}\right)\phi^\nu(\hat{\mu}_i) = \sum_{l=0}^L f_l P_l(\hat{\mu}_i) \sum_{n=1}^{\hat{N}} \hat{w}_n P_l(\hat{\mu}_n) \phi^\nu(\hat{\mu}_n), \quad (4.49)$$

para $i = 1, \dots, \hat{N}$. Supondo-se que tenham sido obtidas constantes de separação ν_j , para $j = 1, \dots, \hat{N}$, com $\nu_j \neq \nu_k$ para $j \neq k$. A Eq. (4.49) é multiplicada por $\hat{w}_i \phi^{\nu_k}(\mu_i)$ e somada em i de maneira a obter-se

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{\hat{N}} \hat{w}_i \phi^{\nu_k}(\mu_i) \left(\sigma + \frac{\hat{\mu}_i}{\nu_j}\right) \phi^{\nu_j}(\hat{\mu}_i) \\ = \sum_{l=0}^L f_l \sum_{i=1}^{\hat{N}} \hat{w}_i P_l(\hat{\mu}_i) \phi^{\nu_k}(\mu_i) \sum_{n=1}^{\hat{N}} \hat{w}_n P_l(\hat{\mu}_n) \phi^{\nu_j}(\hat{\mu}_n), \end{aligned} \quad (4.50)$$

a qual fora avaliada em $\nu = \nu_j$. De forma análoga, a Eq. (4.49) é avaliada em $\nu = \nu_k$, multiplicada por $\hat{w}_i \phi^{\nu_j}(\mu_i)$ e somada em i , de forma a ser obtida

$$\begin{aligned} \sum_{i=1}^{\hat{N}} \hat{w}_i \phi^{\nu_j}(\mu_i) \left(\sigma + \frac{\hat{\mu}_i}{\nu_k}\right) \phi^{\nu_k}(\hat{\mu}_i) \\ = \sum_{l=0}^L f_l \sum_{i=1}^{\hat{N}} \hat{w}_i P_l(\hat{\mu}_i) \phi^{\nu_j}(\mu_i) \sum_{n=1}^{\hat{N}} \hat{w}_n P_l(\hat{\mu}_n) \phi^{\nu_k}(\hat{\mu}_n). \end{aligned} \quad (4.51)$$

Ao subtrair a Eq. (4.51) da Eq. (4.50), é obtida

$$\sum_{i=1}^{\hat{N}} w_i \hat{\mu}_i \left(\frac{1}{\nu_j} - \frac{1}{\nu_k}\right) \phi^{\nu_j}(\hat{\mu}_i) \phi^{\nu_k}(\hat{\mu}_i) = 0, \quad (4.52)$$

ou,

$$(\nu_k - \nu_j) \sum_{i=1}^{\hat{N}} w_i \hat{\mu}_i \phi^{\nu_j}(\hat{\mu}_i) \phi^{\nu_k}(\hat{\mu}_i) = 0. \quad (4.53)$$

Como, por hipótese, as constantes de separação não são idênticas, obtém-se a relação de ortogonalidade

$$\sum_{i=1}^{\hat{N}} w_i \hat{\mu}_i \phi^{\nu_j}(\hat{\mu}_i) \phi^{\nu_k}(\hat{\mu}_i) = 0 \quad (4.54)$$

para $j \neq k$.

4.2.2.2 Função de Green

A função de Green é definida como a solução da equação

$$\begin{aligned}
 -\hat{\mu}_i \frac{d}{dz} G(z, \hat{\mu}_i; \tau, \hat{\mu}_\alpha) + \sigma G(z, \hat{\mu}_i; \tau, \hat{\mu}_\alpha) \\
 = \sum_{l=0}^L f_l P_l(\hat{\mu}_i) \sum_{k=1}^{\hat{N}} \hat{w}_k P_l(\hat{\mu}_k) G(z, \hat{\mu}_i; \tau, \hat{\mu}_\alpha) + \delta(z - \tau) \delta_{i,\alpha},
 \end{aligned} \tag{4.55}$$

onde $G(z, \hat{\mu}_i; \tau, \hat{\mu}_\alpha)$ é o fluxo angular em $(z, \hat{\mu}_i)$ de partículas vindas de $\tau \in (0, z_0)$ da direção $\hat{\mu}_\alpha$, $\alpha = 1, \dots, \hat{N}$, $\delta(z - \tau)$ é a função Delta de Dirac e $\delta_{i,\alpha}$ é a função Delta de Kronecker.

Supondo-se que para algum J , com $1 \leq J \leq \hat{N}$, ν_1, \dots, ν_J sejam as constantes de separação positivas e $-\nu_{J+1}, \dots, -\nu_{\hat{N}}$ as negativas, então a solução da Eq. (4.55) pode ser definida por partes, como em [9],

$$G(z, \hat{\mu}_i; \tau, \hat{\mu}_\alpha) = \sum_{j=1}^J A_{j,\alpha} \phi^{\nu_j}(\hat{\mu}_i) e^{-(z-\tau)/\nu_j} \tag{4.56}$$

para $z > \tau$ e limitada quando $z \rightarrow \infty$, e

$$G(z, \hat{\mu}_i; \tau, \hat{\mu}_\alpha) = - \sum_{j=J+1}^{\hat{N}} B_{j,\alpha} \phi^{-\nu_j}(\hat{\mu}_i) e^{-(\tau-z)/\nu_j} \tag{4.57}$$

para $z < \tau$ e limitada quando $z \rightarrow -\infty$. Pela definição, as Eq. (4.56) e (4.57) possuem um salto quando $z \rightarrow \tau$ e $\hat{\mu}_i = \hat{\mu}_\alpha$. Para lidar com o salto é imposta a condição

$$\hat{\mu}_i \lim_{\epsilon \rightarrow 0} [G(\tau + \epsilon, \hat{\mu}_i; \tau, \hat{\mu}_\alpha) - G(\tau - \epsilon, \hat{\mu}_i; \tau, \hat{\mu}_\alpha)] = \delta_{i,\alpha}, \tag{4.58}$$

para $i = 1, \dots, \hat{N}$, obtida ao integrar a Eq. (4.55) em $z \in (\tau - \epsilon, \tau + \epsilon)$. Para determinar as constantes $(A_{j,\alpha}, B_{j,\alpha})$, as Eq. (4.56) e (4.57) são substituídas na Eq. (4.58) para que seja obtida

$$\hat{\mu}_i \sum_{j=1}^J A_{j,\alpha} \phi^{\nu_j}(\hat{\mu}_i) + \hat{\mu}_i \sum_{j=J+1}^{\hat{N}} B_{j,\alpha} \phi^{-\nu_j}(\hat{\mu}_i) = \delta_{i,\alpha}. \tag{4.59}$$

Considerando as constantes

$$N^{\nu\beta} = \sum_{i=1}^{\hat{N}} \hat{w}_i \hat{\mu}_i [\phi^{\nu\beta}(\hat{\mu}_i)]^2 \quad (4.60)$$

para $\beta = 1, \dots, J$ e

$$N^{-\nu\beta} = \sum_{i=1}^{\hat{N}} \hat{w}_i \hat{\mu}_i [\phi^{-\nu\beta}(\hat{\mu}_i)]^2 \quad (4.61)$$

para $\beta = J+1, \dots, \hat{N}$. A Eq. (4.59) é multiplicada por $\hat{w}_i \phi^{\nu\beta}(\hat{\mu}_i)$, com $\beta = 1, \dots, J$, e somada em $i = 1, \dots, \hat{N}$, para obter-se, após alterar a ordem dos somatórios,

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^J A_{j,\alpha} \sum_{i=1}^{\hat{N}} \hat{w}_i \hat{\mu}_i \phi^{\nu j}(\hat{\mu}_i) \phi^{\nu\beta}(\hat{\mu}_i) \\ + \sum_{j=J+1}^{\hat{N}} B_{j,\alpha} \sum_{i=1}^{\hat{N}} \hat{w}_i \hat{\mu}_i \phi^{-\nu j}(\hat{\mu}_i) \phi^{\nu\beta}(\hat{\mu}_i) = \sum_{i=1}^{\hat{N}} \hat{w}_i \phi^{\nu\beta}(\hat{\mu}_i) \delta_{i,\alpha}, \end{aligned} \quad (4.62)$$

para $\alpha = 1, \dots, \hat{N}$. Pela definição da Delta de Kronecker, o lado direito da Eq. (4.62) se torna

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^J A_{j,\alpha} \sum_{i=1}^{\hat{N}} \hat{w}_i \hat{\mu}_i \phi^{\nu j}(\hat{\mu}_i) \phi^{\nu\beta}(\hat{\mu}_i) \\ + \sum_{j=J+1}^{\hat{N}} B_{j,\alpha} \sum_{i=1}^{\hat{N}} \hat{w}_i \hat{\mu}_i \phi^{-\nu j}(\hat{\mu}_i) \phi^{\nu\beta}(\hat{\mu}_i) = \hat{w}_\alpha \phi^{\nu\beta}(\hat{\mu}_\alpha). \end{aligned} \quad (4.63)$$

A relação de ortogonalidade da Eq. (4.54) se aplica no lado esquerdo da Eq. (4.63), de forma a ser obtida a equação

$$A_{\beta,\alpha} \sum_{i=1}^{\hat{N}} \hat{w}_i \hat{\mu}_i [\phi^{\nu\beta}(\hat{\mu}_i)]^2 = \hat{w}_\alpha \phi^{\nu\beta}(\hat{\mu}_\alpha), \quad (4.64)$$

ou, considerando a Eq. (4.60),

$$A_{\beta,\alpha} = \frac{\hat{w}_\alpha \phi^{\nu\beta}(\hat{\mu}_\alpha)}{N^{\nu\beta}}. \quad (4.65)$$

Analogamente, ao multiplicar a Eq. (4.59) por $\hat{w}_i \phi^{-\nu\beta}(\hat{\mu}_i)$, com $\beta = J+1, \dots, \hat{N}$, e somar em $i = 1, \dots, \hat{N}$, é obtida, pela relação de ortogonalidade da Eq. (4.54),

$$B_{\beta,\alpha} = \frac{\hat{w}_\alpha \phi^{-\nu\beta}(\hat{\mu}_\alpha)}{N^{-\nu\beta}}, \quad (4.66)$$

com $N^{-\nu_\beta}$ definido na Eq. (4.61).

4.2.2.3 Solução Particular

A solução particular para a equação de transporte é finalmente escrita em termos da função de Green como

$$\psi^P(z, \hat{\mu}_i) = \int_{z_0}^{z_R} \sum_{\alpha=1}^{\hat{N}} G(z, \hat{\mu}_i; \tau, \hat{\mu}_\alpha) S^\dagger(\tau, \hat{\mu}_\alpha) d\tau, \quad (4.67)$$

ou, utilizando as Eqs. (4.56) e (4.57),

$$\psi^P(z, \hat{\mu}_i) = \sum_{j=1}^J \mathfrak{A}_j(z) \phi^{\nu_j}(\hat{\mu}_i) + \sum_{j=J+1}^{\hat{N}} \mathfrak{B}_j(z) \phi^{-\nu_j}(\hat{\mu}_i), \quad (4.68)$$

com

$$\mathfrak{A}_j(z) = \int_{z_0}^z \left(\sum_{\alpha=1}^{\hat{N}} A_{j,\alpha} S^\dagger(\tau, \hat{\mu}_\alpha) \right) e^{-(z-\tau)/\nu_j} d\tau, \quad (4.69)$$

e

$$\mathfrak{B}_j(z) = - \int_z^{z_R} \left(\sum_{\alpha=1}^{\hat{N}} B_{j,\alpha} S^\dagger(\tau, \hat{\mu}_\alpha) \right) e^{-(\tau-z)/\nu_j} d\tau. \quad (4.70)$$

No contexto da formulação ADO desenvolvida para a equação adjunta de transporte, a regra de quadratura é de acordo com o exemplo dado pelas Eqs. (4.47) e (4.48). Desta forma, a solução particular de Green para a equação adjunta de transporte, Eq. (4.38), pode ser escrita como

$$\Psi_+^P(z) = \sum_{j=1}^N \left[\mathfrak{A}_j(z) \Phi_+^{\nu_j} + \mathfrak{B}_j(z) \Phi_-^{\nu_j} \right] \quad (4.71)$$

e

$$\Psi_-^P(z) = \sum_{j=1}^N \left[\mathfrak{A}_j(z) \Phi_-^{\nu_j} + \mathfrak{B}_j(z) \Phi_+^{\nu_j} \right], \quad (4.72)$$

onde as constantes $\mathfrak{A}_j, \mathfrak{B}_j$, para $j = 1, \dots, N$, são definidas por

$$\begin{aligned} \mathfrak{A}_j(z) = \frac{1}{N^{\nu_j}} \sum_{\alpha=1}^N w_\alpha \int_{z_0}^z (S(\tau, \mu_\alpha) \phi^{\nu_j}(\mu_\alpha) \\ + S(\tau, -\mu_\alpha) \phi^{\nu_j}(-\mu_\alpha)) e^{-(z-\tau)/\nu_j} d\tau \end{aligned} \quad (4.73)$$

e

$$\begin{aligned} \mathfrak{B}_j(z) = \frac{1}{N^{\nu_j}} \sum_{\alpha=1}^N w_\alpha \int_z^{z_R} (S(\tau, -\mu_\alpha) \phi^{\nu_j}(-\mu_\alpha) \\ + S(\tau, -\mu_\alpha) \phi^{\nu_j}(\mu_\alpha)) e^{-(\tau-z)/\nu_j} d\tau, \end{aligned} \quad (4.74)$$

com

$$N^{\nu_j} = \sum_{i=1}^N w_i \mu_i [\phi^{\nu_j}(\mu_i)^2 - \phi^{\nu_j}(\mu_i)^2]. \quad (4.75)$$

Como foram utilizadas apenas fontes isotrópicas neste trabalho, as Eqs. (4.71) e (4.72) podem ser simplificadas. Se S^\dagger depende apenas da coordenada espacial, então as Eqs. (4.73) e (4.74) podem ser reescritas como

$$\mathfrak{A}_j(z) = \mathcal{C}^{\nu_j} \int_{z_0}^z S(\tau) e^{-(z-\tau)/\nu_j} d\tau \quad (4.76)$$

e

$$\mathfrak{B}_j(z) = \mathcal{C}^{\nu_j} \int_z^{z_R} S(\tau) e^{-(\tau-z)/\nu_j} d\tau, \quad (4.77)$$

onde

$$\mathcal{C}^{\nu_j} = \frac{\sum_{\alpha=1}^N w_\alpha [\phi^{\nu_j}(\mu_\alpha) + \phi^{\nu_j}(-\mu_\alpha)]}{\sum_{i=1}^N w_i \mu_i [\phi^{\nu_j}(\mu_i)^2 - \phi^{\nu_j}(\mu_i)^2]}. \quad (4.78)$$

4.3 Formulação ADO em Problemas Multirregiões

Conforme discutido nos capítulos 2 e 3, se a região de interesse do problema for composta por mais de um material, com diferentes propriedades físicas, é exigida continuidade do fluxo angular adjunto na interface entre estes materiais. Supondo-se que o problema de transporte da placa seja caracterizado por R regiões, $[z_0, z_R] = \bigcup_{r=1}^R [z_{r-1}, z_r]$, estas compostas por distintos materiais, com seção de choque macroscópica total $\sigma = \sigma_r$ e coeficientes da expansão em polinômios de Legendre do termo de espalhamento $f_l = f_{r,l}$, para $z \in [z_{r-1}, z_r]$, conforme a Figura 4.1.

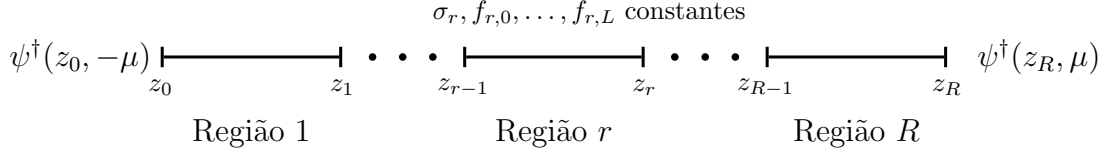


Figura 4.1: Exemplo de placa em meio heterogêneo.

A equação adjunta de transporte em cada região é dada por

$$-\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi_r^\dagger(z, \mu) + \sigma_r \psi_r^\dagger(z, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_{r,l} P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi_r^\dagger(z, \mu') d\mu' + S_r^\dagger(z, \mu), \quad (4.79)$$

para $r = 1, \dots, R$, $z \in [z_{r-1}, z_r]$, onde ψ_r^\dagger e S_r^\dagger são, respectivamente, as restrições do fluxo angular adjunto e do termo fonte em $[z_{r-1}, z_r]$. Além disso, as condições de contorno são definidas apenas na primeira e na última região através de

$$\begin{aligned} \psi_1^\dagger(z_0, -\mu) &= \rho_1^s \psi_1^\dagger(z_0, \mu) + 2\rho_1^d \int_0^1 \mu' \psi_1^\dagger(z_0, \mu') d\mu', \\ \psi_R^\dagger(z_R, \mu) &= \rho_2^s \psi_R^\dagger(z_R, -\mu) + 2\rho_2^d \int_0^1 \mu' \psi_R^\dagger(z_R, -\mu') d\mu', \end{aligned} \quad (4.80)$$

para $\mu \in (0, 1]$, e a continuidade do fluxo angular adjunto entre regiões é imposta através de

$$\psi_r^\dagger(z_r, \mu) = \psi_{r+1}^\dagger(z_r, \mu), \quad (4.81)$$

para $\mu \in [-1, 1]$ e $r = 1, \dots, R-1$.

A formulação ADO desenvolvida na seção 4.1 é aplicada em cada uma das R regiões e a solução ADO obtida para a equação adjunta de transporte, Eq. (4.79), é dada por

$$\Psi_{r,+}^\dagger(z) = \sum_{j=1}^N [A_{r,j} \Phi_+^{\nu_{r,j}} e^{-(z-z_{r-1})/\nu_{r,j}} + B_{r,j} \Phi_-^{\nu_{r,j}} e^{-(z_r-z)/\nu_{r,j}}] + \Psi_{r,+}^P(z), \quad (4.82)$$

e

$$\Psi_{r,-}^\dagger(z) = \sum_{j=1}^N [A_{r,j} \Phi_-^{\nu_{r,j}} e^{-(z-z_{r-1})/\nu_{r,j}} + B_{r,j} \Phi_+^{\nu_{r,j}} e^{-(z_r-z)/\nu_{r,j}}] + \Psi_{r,-}^P(z), \quad (4.83)$$

para $r = 1, \dots, R$ e $z \in [z_{r-1}, z_r]$, onde $\nu_{r,j}$ são as constantes de separação obtidas através do método ADO para cada uma das regiões, $\Phi_+^{\nu_{r,j}}$ e $\Phi_-^{\nu_{r,j}}$ são as respectivas autofunções e $\Psi_{r,+}^P$ e $\Psi_{r,-}^P$ os vetores das soluções particulares. Assim como no problema com uma única região, as exponenciais nas Eqs. (4.82) e (4.83) são escritas de maneira transladada, a fim de evitar *overflow*. As $2RN$ constantes $A_{r,j}$ e $B_{r,j}$ são determinadas através das condições de contorno e continuidade definidas pelas Eqs. (4.80) e (4.81).

4.4 Determinação da Solução ADO

Nesta seção será discutida a obtenção do sistema de equação que determina a solução ADO da equação adjunta de transporte, Eq. (3.25). Serão considerados apenas problemas multirregiões, uma vez que o problema com uma única região é um caso particular. Para uma placa com R regiões, suponha-se que tenha sido utilizado o método ADO com quadratura de ordem N em cada uma das regiões para o tratamento da variável angular. Uma vez obtidas N autofunções, $\Phi_+^{\nu_{r,j}}$ e $\Phi_-^{\nu_{r,j}}$, linearmente independentes, associadas a constantes de separação $\nu_{r,j}$, estas obtidas através da resolução da Eq. (4.29), pode ser determinado um sistema de equações lineares através das Eqs. (4.80) e (4.81) para a obtenção das constantes $A_{r,j}$ e $B_{r,j}$ das Eqs. (4.82) e (4.83).

As condições de contorno da Eq. (4.80) podem ser calculadas nas direções $\mu = \mu_i$ e os termos integrais nelas podem ser aproximados pela regra de quadratura, obtendo-se

$$\begin{aligned} \psi_1^\dagger(z_0, -\mu_i) &= \rho_1^s \psi_1^\dagger(z_0, \mu_i) + 2\rho_1^d \sum_{k=1}^N w_k \mu_k \psi_1^\dagger(z_0, \mu_k), \\ \psi_R^\dagger(z_R, \mu_i) &= \rho_2^s \psi_R^\dagger(z_R, -\mu_i) + 2\rho_2^d \sum_{k=1}^N w_k \mu_k \psi_R^\dagger(z_R, -\mu_k), \end{aligned} \tag{4.84}$$

para $i = 1, \dots, N$. Considerando os vetores do \mathbb{R}^N

$$\mathbf{w} = [w_1 \ \cdots \ w_N]^T, \quad (4.85)$$

dos pesos da regra de quadratura, e

$$\mathbf{1} = [1 \ \cdots \ 1]^T, \quad (4.86)$$

através das definições das Eqs. (4.14), (4.36) e (4.37), a Eq. (4.84) pode ser reescrita como

$$\Psi_{1,-}^\dagger(z_0) = \rho_1^s \Psi_{1,+}^\dagger(z_0) + 2\rho_1^d \mathbf{w}^T \mathcal{M} \Psi_{1,+}^\dagger(z_0) \mathbf{1}, \quad (4.87)$$

e

$$\Psi_{R,+}^\dagger(z_R) = \rho_2^s \Psi_{R,-}^\dagger(z_R) + 2\rho_2^d \mathbf{w}^T \mathcal{M} \Psi_{R,-}^\dagger(z_R) \mathbf{1}. \quad (4.88)$$

Por fim, ao substituírem-se as Eqs. (4.82) e (4.83) nas Eqs. (4.87) e (4.88), são obtidas

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^N \left[\Phi_-^{\nu_{1,j}} - \rho_1^s \Phi_+^{\nu_{1,j}} - 2\rho_1^d (\mathbf{w}^T \mathcal{M} \Phi_+^{\nu_{1,j}}) \mathbf{1} \right] A_{1,j} \\ & + \sum_{j=1}^N \left[\Phi_+^{\nu_{1,j}} - \rho_1^s \Phi_-^{\nu_{1,j}} - 2\rho_1^d (\mathbf{w}^T \mathcal{M} \Phi_-^{\nu_{1,j}}) \mathbf{1} \right] e^{-z_1/\nu_{1,j}} B_{1,j} \\ & = \rho_1^s \Psi_{1,+}^P(z_0) + 2\rho_1^d (\mathbf{w}^T \mathcal{M} \Psi_{1,+}^P(z_0)) - \Psi_{1,-}^P(z_0), \end{aligned} \quad (4.89)$$

e

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^N \left[\Phi_+^{\nu_{R,j}} - \rho_2^s \Phi_-^{\nu_{R,j}} - 2\rho_2^d (\mathbf{w}^T \mathcal{M} \Phi_-^{\nu_{R,j}}) \mathbf{1} \right] e^{-z_{R-1}/\nu_{R,j}} A_{R,j} \\ & + \sum_{j=1}^N \left[\Phi_-^{\nu_{R,j}} - \rho_2^s \Phi_+^{\nu_{R,j}} - 2\rho_2^d (\mathbf{w}^T \mathcal{M} \Phi_+^{\nu_{R,j}}) \mathbf{1} \right] B_{R,j} \\ & = \rho_2^s \Psi_{R,-}^P(z_R) + 2\rho_2^d (\mathbf{w}^T \mathcal{M} \Psi_{R,-}^P(z_R)) - \Psi_{R,+}^P(z_R). \end{aligned} \quad (4.90)$$

Apenas $2N$ equações foram obtidas das condições de contorno. As $2N(R-1)$ equações que faltam serão obtidas das condições de continuidade das interfaces entre as regiões. Inicialmente, para $r = 1, \dots, R-1$, a Eq. (4.81) é calculada nas direções $\mu = \pm\mu_i$, para que sejam obtidas

$$\psi_r^\dagger(z_r, \mu_i) = \psi_{r+1}^\dagger(z_r, \mu_i), \quad (4.91)$$

e

$$\psi_r^\dagger(z_r, -\mu_i) = \psi_{r+1}^\dagger(z_r, -\mu_i), \quad (4.92)$$

para $i = 1, \dots, N$. Ao serem utilizadas as definições das Eqs. (4.36) e (4.37), as Eqs. (4.91) e (4.92) são reescritas vetorialmente como

$$\Psi_{r,+}^\dagger(z_r) = \Psi_{r+1,+}^\dagger(z_r), \quad (4.93)$$

e

$$\Psi_{r,-}^\dagger(z_r) = \Psi_{r+1,-}^\dagger(z_r), \quad (4.94)$$

para $r = 1, \dots, R-1$. Através das soluções estabelecidas pelas Eqs. (4.82) e (4.83), as Eqs. (4.93) e (4.94) assumem a forma

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^N \left[A_{r,j} \Phi_+^{\nu_{r,j}} e^{-(z_r - z_{r-1})/\nu_{r,j}} + B_{r,j} \Phi_-^{\nu_{r,j}} \right] \\ & - \sum_{j=1}^N \left[A_{r+1,j} \Phi_+^{\nu_{r+1,j}} + B_{r+1,j} \Phi_-^{\nu_{r+1,j}} e^{-(z_{r+1} - z_r)/\nu_{r,j}} \right] \\ & = \Psi_{r+1,+}^P(z_r) - \Psi_{r,+}^P(z_r), \end{aligned} \quad (4.95)$$

e

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^N \left[A_{r,j} \Phi_-^{\nu_{r,j}} e^{-(z_r - z_{r-1})/\nu_{r,j}} + B_{r,j} \Phi_+^{\nu_{r,j}} \right] \\ & - \sum_{j=1}^N \left[A_{r+1,j} \Phi_-^{\nu_{r+1,j}} + B_{r+1,j} \Phi_+^{\nu_{r+1,j}} e^{-(z_{r+1} - z_r)/\nu_{r,j}} \right] \\ & = \Psi_{r+1,-}^P(z_r) - \Psi_{r,-}^P(z_r), \end{aligned} \quad (4.96)$$

para $r = 1, \dots, R-1$. O sistema linear estabelecido através das Eqs. (4.89), (4.90), (4.95) e (4.96) é de ordem $2RN$ e é dado por

$$\mathbf{Ax} = \mathbf{b}, \quad (4.97)$$

Os blocos das condições de contorno em $z = z_R$ são

$$\boxed{\mathcal{B}_F^R} = \left[\boxed{\mathcal{F}_3} \parallel \boxed{\mathcal{F}_4} \right], \quad (4.106)$$

com

$$\boxed{\mathcal{F}_3}_j = \left(\Phi_{R,+}^{\nu_j} - \rho_2^s \Phi_{R,-}^{\nu_j} - 2\rho_2^d \mathbf{w}^T \mathcal{M} \Phi_{R,-}^{\nu_j} \mathbf{1} \right) e^{\frac{-z_{R-1}}{\nu_{R,j}}}, \quad (4.107)$$

e

$$\boxed{\mathcal{F}_4}_j = \Phi_{R,-}^{\nu_j} - \rho_2^s \Phi_{R,+}^{\nu_j} - 2\rho_2^d \mathbf{w}^T \mathcal{M} \Phi_{R,+}^{\nu_j} \mathbf{1}. \quad (4.108)$$

Para finalizar, o vetor independente \mathbf{b} do Sistema 4.97 é dado por

$$\mathbf{b} = \begin{pmatrix} \rho_1^s \Psi_{1,+}^P(z_0) + 2\rho_1^d (\mathbf{w}^T \mathcal{M} \Psi_{1,+}^P(z_0)) - \Psi_{1,-}^P(z_0) \\ \vdots \\ \Psi_{r+1,+}^P(z_r) - \Psi_{r,+}^P(z_r) \\ \Psi_{r+1,-}^P(z_r) - \Psi_{r,-}^P(z_r) \\ \vdots \\ \rho_2^s \Psi_{R,-}^P(z_R) + 2\rho_2^d (\mathbf{w}^T \mathcal{M} \Psi_{R,-}^P(z_R)) - \Psi_{R,+}^P(z_R) \end{pmatrix}. \quad (4.109)$$

Os passos para a execução do método ADO para a obtenção da solução da equação adjunta de transporte podem ser resumidos em:

1. Obter de uma regra de quadratura para o semi-intervalo $[0,1]$.
2. Para cada meio material:
 - (a) Calcular as constantes de separação e autovetores através da Eq. (4.29).
 - (b) Calcular as autofunções através das Eqs. (4.31) e (4.32)
 - (c) Caso o termo-fonte seja não nulo no meio material, calcular a solução particular através da Eq. (4.43) se a fonte for constante, ou por meio das Eqs. (4.71) e (4.72), para fontes não constantes.
3. Resolver o sistema da Eq. (4.97), o qual depende das condições de contorno em $z = z_0$ e $z = z_R$ e das condições de continuidade nas interfaces entre meios materiais distintos.

4.5 Caso particular: transporte isotrópico de partículas

No caso em que a probabilidade de espalhamento das partículas é a mesma em todas as direções, dito espalhamento isotrópico, a formulação ADO pode ser particularizada, resultando em autofunções explícitas e em problema simplificado de autovalores. A derivação segue o que foi feito por Pazinato *et al.* [51]. Considera-se a equação isotrópica escrita na forma

$$-\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi^\dagger(z, \mu) + \sigma \psi^\dagger(z, \mu) = \frac{c}{2} \int_{-1}^1 \psi(z, \mu') d\mu', \quad (4.110)$$

sujeita a condições de contorno como as da Eq. (3.21). A formulação ADO para a Eq. (4.110) tem a vantagem de oferecer, sob certas condições, uma forma fechada para as autofunções. O tratamento aqui apresentado será feito apenas para problemas com uma única região, entretanto é extensível para problemas multirregiões da mesma forma como é feito na seção 4.3. Conforme apresentado na seção 4.1, o termo integral da Eq. (4.110) é reescrito de maneira a ser obtida

$$-\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi^\dagger(z, \mu) + \sigma \psi^\dagger(z, \mu) = \frac{c}{2} \int_0^1 [\psi(z, \mu') + \psi^\dagger(z, -\mu')] d\mu'. \quad (4.111)$$

Na sequência, dados (w_k, μ_k) , $k = 1, \dots, N$, pesos e nós de uma regra de quadratura arbitrária no intervalo $[0, 1]$, o termo integral na Eq. (4.111) pode ser aproximado pela regra de quadratura e a variável angular μ pode ser avaliada nas direções $\mu = \mu_i$, de forma a serem obtidas as equações

$$-\mu_i \frac{d}{dz} \psi^\dagger(z, \mu_i) + \sigma \psi^\dagger(z, \mu_i) = \frac{c}{2} \sum_{k=1}^N w_k [\psi^\dagger(z, \mu_k) + \psi^\dagger(z, -\mu_k)], \quad (4.112)$$

e

$$\mu_i \frac{d}{dz} \psi^\dagger(z, -\mu_i) + \sigma \psi^\dagger(z, -\mu_i) = \frac{c}{2} \sum_{k=1}^N w_k [\psi^\dagger(z, \mu_k) + \psi^\dagger(z, -\mu_k)], \quad (4.113)$$

para $i = 1, \dots, N$. Uma vez discretizadas as direções e a regra de quadratura, serão buscadas soluções exponenciais da forma

$$\psi^\dagger(z, \mu_i) = \phi^\nu(\mu_i) e^{-z/\nu}, \quad (4.114)$$

e

$$\psi^\dagger(z, -\mu_i) = \phi^\nu(-\mu_i)e^{-z/\nu}, \quad (4.115)$$

para $i = 1, \dots, N$, onde ν é uma constante de separação arbitrária. Ao serem substituídas as Eqs. (4.114) e (4.115) na Eqs. (4.112) e (4.113), são obtidas, após algumas manipulações algébricas, as equações

$$\left(\sigma + \frac{\mu_i}{\nu}\right) \phi^\nu(\mu_i) = \frac{c}{2} \sum_{k=1}^N w_k [\phi^\nu(\mu_k) + \phi^\nu(-\mu_k)], \quad (4.116)$$

e

$$\left(\sigma - \frac{\mu_i}{\nu}\right) \phi^\nu(-\mu_i) = \frac{c}{2} \sum_{k=1}^N w_k [\phi^\nu(\mu_k) + \phi^\nu(-\mu_k)], \quad (4.117)$$

para $i = 1, \dots, N$. Conforme feito na seção 4.1, são introduzidos os vetores coluna do \mathbb{R}^N

$$\Phi_+^\nu = [\phi^\nu(\mu_1) \cdots \phi^\nu(\mu_N)]^T, \quad (4.118)$$

e

$$\Phi_-^\nu = [\phi^\nu(-\mu_1) \cdots \phi^\nu(-\mu_N)]^T, \quad (4.119)$$

e as matrizes do $\mathbb{R}^{N \times N}$

$$\mathcal{M} = \text{diag}(\mu_1, \dots, \mu_N), \quad (4.120)$$

e

$$\mathcal{W} = (\mathcal{W})_{i,j} = \frac{c}{2} w_j, \quad (4.121)$$

de maneira a reescrever as Eqs. (4.116) e (4.117) como

$$\frac{1}{\nu} \mathcal{M} \Phi_+^\nu = (\mathcal{W} - \sigma I) \Phi_+^\nu + \mathcal{W} \Phi_-^\nu, \quad (4.122)$$

e

$$-\frac{1}{\nu} \mathcal{M} \Phi_-^\nu = (\mathcal{W} - \sigma I) \Phi_-^\nu + \mathcal{W} \Phi_+^\nu, \quad (4.123)$$

onde I é a matriz identidade do $\mathbb{R}^{N \times N}$. Como anteriormente, são definidos os vetores do \mathbb{R}^N

$$U^\nu = \Phi_+^\nu + \Phi_-^\nu \quad (4.124)$$

e

$$V^\nu = \Phi_+^\nu - \Phi_-^\nu, \quad (4.125)$$

de forma a obter-se, quando subtraída a Eq. (4.123) da Eq. (4.122),

$$\frac{1}{\nu} \mathcal{M}U^\nu = -\sigma V^\nu, \quad (4.126)$$

e, quando somadas,

$$\frac{1}{\nu} \mathcal{M}V^\nu = (2\mathcal{W} - \sigma I)U^\nu. \quad (4.127)$$

Finalmente, a Eq. (4.126) pode ser utilizada para eliminar V^ν da Eq. (4.127), resultando no problema de autovalores

$$\frac{1}{(\sigma\nu)^2} \mathcal{M}U^\nu = \left(\mathcal{D} - \frac{2}{\sigma} \mathcal{M}^{-1} \mathcal{W} \mathcal{M}^{-1} \right) \mathcal{M}U^\nu, \quad (4.128)$$

onde \mathcal{D} é o vetor do \mathbb{R}^N definido por

$$\mathcal{D} = \text{diag}(\mu_1^{-2}, \dots, \mu_N^{-2}). \quad (4.129)$$

A Eq. (4.128) já pode ser utilizada para a obtenção de autovalores ν , entretanto pode ser simplificada. Definido o vetor do \mathbb{R}^N

$$\mathcal{T} = \text{diag}(\sqrt{w_1}, \dots, \sqrt{w_N}), \quad (4.130)$$

então a multiplicação da Eq. (4.128) por \mathcal{T} resulta em

$$\left(\mathcal{D} - \frac{c}{\sigma} \mathbf{z} \mathbf{z}^T \right) \mathcal{X}^\nu = \lambda \mathcal{X}^\nu, \quad (4.131)$$

onde \mathcal{X}^ν e \mathbf{z} são vetores do \mathbb{R}^N definidos por

$$\mathcal{X} = \mathcal{T} \mathcal{M}U^\nu \quad (4.132)$$

e

$$\mathbf{z} = \left[(1/\mu_1)w_1^{1/2} \cdots (1/\mu_N)w_1^{1/2} \right]^T, \quad (4.133)$$

e os autovalores λ são tais que

$$\lambda = \frac{1}{(\sigma\nu)^2}. \quad (4.134)$$

Destaca-se que a Eq. (4.131) é uma atualização de posto unitário da matriz diagonal \mathcal{D} . Tal estrutura é explorada para o desenvolvimento de um algoritmo eficiente, conhecido como *divide and conquer*, para a obtenção de autovalores [33]. Neste contexto, o problema se apresenta em uma forma considerada mais simples que um problema de autovalores definido por uma matriz tridiagonal, uma vez que é usual em algoritmos de cálculo de autovalores de matrizes tridiagonais a transformação da matriz na forma dada pela Eq. (4.131) antes da avaliação dos autovalores.

Para a obtenção das autofunções, suponha que um conjunto de $2N$ constantes de separação $\pm\nu_j$, $j = 1, \dots, N$, tenha sido obtido através da Eq. (4.131). Impondo nas Eqs. (4.112) e (4.113) as condições de normalização

$$\sum_{k=1}^N w_k [\phi^{\nu_i}(\mu_k) + \phi^{\nu_i}(-\mu_k)] = 1, \quad (4.135)$$

para $i = 1, \dots, N$, a solução ADO da Eq. (4.110) pode ser definida de acordo com

$$\psi(z, \mu_i) = \sum_{j=1}^N \left[A_j \phi^{\nu_j}(\mu_i) e^{-z\nu_j} + B_j \phi^{\nu_j}(-\mu_i) e^{-(z-z_0)/\nu_j} \right], \quad (4.136)$$

e

$$\psi(z, -\mu_i) = \sum_{j=1}^N \left[A_j \phi^{\nu_j}(-\mu_i) e^{-z\nu_j} + B_j \phi^{\nu_j}(\mu_i) e^{-(z-z_0)/\nu_j} \right], \quad (4.137)$$

onde

$$\phi^{\nu_j}(\mu) = \frac{c}{2} \left(\frac{\nu_j}{\nu_j \sigma + \mu} \right) \quad (4.138)$$

e $z \in [0, z_0]$. Destaca-se que a forma da solução nas Eqs. (4.136) e (4.137) é escolhida para evitar o risco de *overflow* quando os termos exponenciais são numericamente avaliados.

5 APLICAÇÕES

Diversas aplicações práticas em transporte de partículas exigem a estimativa do fluxo de radiação gerado por fontes ou a estimativa das próprias fontes, conforme discutido previamente no capítulo 1. A estimativa de fluxo de partículas resulta da solução de um problema direto e a determinação das fontes de partículas é um problema inverso de reconstrução de fonte. A equação adjunta de transporte, Eq. (3.25), representa uma poderosa ferramenta matemática que auxilia na resolução de tais problemas.

O método ADO para a equação adjunta de transporte, Eq. (3.25), deduzido no capítulo 4, foi implementado em Fortran 2008, utilizando o compilador gfortran 4.9¹, em um computador equipado com um processador Intel Core i5-4670, com frequência de 3,40 GHz, 16 GiB de RAM, rodando a distribuição Linux CentOS 7². As operações de álgebra linear, como a resolução de problemas de autovalores e sistemas lineares, são efetivadas por via das sub-rotinas da LAPACK [2], *DSPEV* e *DGESV*, respectivamente. O problema de minimização da seção 5.2 é resolvido através da implementação de Lawson e Hanson [42] do método de mínimos quadrados não negativos, presente no pacote *npls* na Netlib³, o qual visa obter a solução de problemas de minimização do tipo

$$\operatorname{argmin}_{\mathbf{x} \geq 0} \|\mathbf{Ax} - \mathbf{y}\|_2, \quad (5.1)$$

para alguma matriz A e vetor \mathbf{y} compatíveis, onde $\mathbf{x} \geq 0$ significa que todas as componentes de \mathbf{x} são não negativas.

A verificação do método ADO para a equação adjunta é feita de maneira numérica, através da abordagem fonte-detector a ser apresentada na seção 5.1.

¹Disponível em <https://gcc.gnu.org/wiki/GFortran>

²Disponível em <https://www.centos.org>

³Disponível em <http://www.netlib.org>

Ademais, serão reproduzidos através do método ADO alguns resultados presentes na literatura, como em [45], onde é utilizado o método da função de Green espectral (*Spectral Green's Function*, SGF) [13] para a equação adjunta de transporte.

Por fim, para a aplicação em reconstrução de fontes isotrópicas, a ser apresentada na seção 5.2, são utilizados dados sintéticos obtidos através de perturbações das medidas obtidas através do método ADO para a equação de transporte.

5.1 Problema Fonte-Detector

A estimativa do fluxo de partículas oriundas de fontes internas ou incidentes na fronteira de um meio pode ser dada através da resposta de detectores de partículas posicionados no interior da região de interesse. Supondo-se que o fluxo angular de partículas em uma placa $[z_0, z_R]$ seja modelado através da equação de transporte, Eq. (2.28),

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi(z, \mu) + \sigma \psi(z, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l(z) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi(z, \mu') d\mu' + S(z, \mu)$$

para $\mu \in [-1, 1]$ e $z \in [z_0, z_R]$, com grau de anisotropia L , onde os coeficientes da expansão em polinômios de Legendre do termo de espalhamento f_l e a seção de choque macroscópica total σ são constantes em cada meio material. A equação é sujeita a condições de contorno

$$\begin{aligned} \psi(z_0, \mu) &= g_1(\mu) + \rho_1^s \psi(z_0, -\mu) + 2\rho_1^d \int_0^1 \mu' \psi(z_0, -\mu') d\mu', \\ \psi(z_R, -\mu) &= g_2(\mu) + \rho_2^s \psi(z_R, \mu) + 2\rho_2^d \int_0^1 \mu' \psi(z_R, \mu') d\mu', \end{aligned}$$

para $\mu \in (0, 1]$, com g_1 e g_2 o fluxo incidente na fronteira, ρ_i^s e ρ_i^d , com $i = 1, 2$, os coeficientes de reflexão especular e difusa, respectivamente. Ainda, supondo-se que

um detector de partículas d com seção de choque de absorção σ_d seja posicionado em um intervalo $[a,b]$ no interior da placa, conforme a figura 5.1.

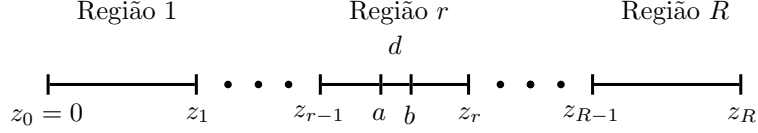


Figura 5.1: Exemplo do posicionamento de um detector de partículas d , com seção de choque de absorção σ_d , no intervalo $[a,b] \subseteq [z_{r-1}, z_r]$ de uma placa com R regiões.

A resposta, ou taxa de absorção de partícula, do detector é então dada por [19, 43]

$$R = \langle \psi, \sigma_d \rangle, \quad (5.2)$$

onde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ é o produto interno definido pela Eq. (3.4).

A expressão apresentada pela Eq. (5.2), embora correta, é ineficiente quando for necessária a obtenção da absorção para fontes distintas, pois culmina na resolução da equação de transporte sempre que as fontes internas ou incidentes na fronteira forem alteradas. A fim de sobrepujar esta limitação, é introduzida uma formulação para a resposta do detector com base no fluxo adjunto de partículas [19, 43]. Suponha que ψ^\dagger seja solução da equação adjunta de transporte, Eq. (3.25),

$$-\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi^\dagger(z, \mu) + \sigma \psi^\dagger(z, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L f_l(z) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi^\dagger(z, \mu') d\mu' + S^\dagger(z, \mu),$$

sujeita a condições de contorno

$$\begin{aligned} \psi^\dagger(z_0, -\mu) &= \rho_1^s \psi^\dagger(z_0, \mu) + 2\rho_1^d \int_0^1 \mu' \psi^\dagger(z_0, \mu') d\mu', \\ \psi^\dagger(z_R, \mu) &= \rho_2^s \psi^\dagger(z_R, -\mu) + 2\rho_2^d \int_0^1 \mu' \psi^\dagger(z_R, -\mu') d\mu'. \end{aligned}$$

Através da relação de dualidade dada pela Eq.(3.16), pode ser obtida a relação

$$R = \langle \psi, \sigma_d \rangle = \langle \psi, \mathcal{L}^\dagger \psi^\dagger \rangle = \langle \mathcal{L} \psi, \psi^\dagger \rangle - P[g_1, g_2, \psi^\dagger] = \langle S, \psi^\dagger \rangle - P[g_1, g_2, \psi^\dagger], \quad (5.3)$$

onde \mathcal{L} e \mathcal{L}^\dagger são os operadores de transporte e o seu respectivo adjunto, definidos pelas Eqs. (3.2) e (3.17). O termo de fronteira $P[g_1, g_2, \psi^\dagger]$ é definido pela Eq. (3.24),

e o termo fonte da equação adjunta de transporte é escolhido como $S^\dagger = \sigma_d$ na primeira igualdade.

A vantagem da Eq. (5.3) diante da Eq. (5.2) está na forma com a qual elas dependem dos termos fonte: a Eq. (5.2) depende indiretamente de S , g_1 e g_2 através de ψ , necessitando de uma nova avaliação da equação de transporte, Eq. (2.28), sempre que fontes distintas forem utilizadas; por outro lado, como ψ^\dagger independe dos termos fonte S , g_1 e g_2 , a Eq. (5.3) depende apenas diretamente dos termos fonte, requerendo uma única avaliação da Eq. (3.25).

No contexto do método ADO, supondo-se que tenha sido utilizada uma regra de quadratura (w_i, μ_i) , $i = 1, \dots, N$, para o tratamento de termo integral e a discretização da variável angular da equação adjunta de transporte, Eq. (3.25), esta definida em R regiões, conforme visto na seção 4.3. Além disso, toma-se $(w_{r,k}, z_{r,k})$, $k = 1 \dots, N_r$, regra de quadratura para a região $[z_r, z_{r+1}]$, $r = 1, \dots, R$. Então, a resposta do detector é calculada através de

$$\begin{aligned}
R &= \langle S, \psi^\dagger \rangle - P[\psi^\dagger, g_1, g_2] \\
&= \int_0^{z_0} \int_{-1}^1 \psi^\dagger(x, \mu) S(z, \mu) d\mu dz - \int_0^1 \mu [g_1(\mu) \psi^\dagger(0, \mu) + g_2(\mu) \psi^\dagger(z_0, -\mu)] d\mu \\
&= \sum_{r=1}^R \sum_{k=1}^{N_r} \sum_{j=1}^N w_{r,k} \left[A_{r,j} \phi_{r,j}^A(z_{r,k}) e^{-(z_{r,k} - z_r)/\nu_{r,j}} + B_{r,j} \phi_{r,j}^B(z_{r,k}) e^{-(z_{r+1} - z_{r,k})/\nu_{r,j}} \right] \\
&+ \sum_{r=1}^R \sum_{k=1}^{N_r} \sum_{i=1}^N w_{r,k} w_i \left[S(z_{r,k}, \mu_i) \psi^p(z_{r,k}, \mu_i) + S(z_{r,k}, -\mu_i) \psi^p(z_{r,k}, -\mu_i) \right] \\
&+ \sum_{i=1}^N w_i \mu_i \left[g_1(\mu_i) \phi_i^1 + g_2(\mu_i) \phi_i^2 \right] \\
&+ \sum_{i=1}^N w_i \mu_i \left[g_1(\mu_i) \psi^p(0, \mu_i) + g_2(\mu_i) \psi^p(z_0, -\mu_i) \right], \tag{5.4}
\end{aligned}$$

onde $\phi_{r,j}^A(z)$, $\phi_{r,j}^B(z)$, ϕ_i^1 e ϕ_i^2 são tais que

$$\phi_{r,j}^A(z) = \sum_{i=1}^N w_i \left[S(z, \mu_i) \phi^{\nu_{r,j}}(\mu_i) + S(z, -\mu_i) \phi^{\nu_{r,j}}(-\mu_i) \right], \tag{5.5}$$

$$\phi_{r,j}^B(z) = \sum_{i=1}^N w_i \left[S(z, \mu_i) \phi^{\nu_{r,j}}(-\mu_i) + S(z, -\mu_i) \phi^{\nu_{r,j}}(\mu_i) \right], \quad (5.6)$$

$$\phi_i^1 = \sum_{j=1}^N \left[A_{1,j} \phi^{\nu_{1,j}}(\mu_i) + B_{1,j} \phi^{\nu_{1,j}}(-\mu_i) e^{-z_1/\nu_{1,j}} \right] \quad (5.7)$$

e

$$\phi_i^2 = \sum_{j=1}^N \left[A_{R,j} \phi^{\nu_{R,j}}(-\mu_i) e^{-(z_0 - z_R)/\nu_{R,j}} + B_{R,j} \phi^{\nu_{R,j}}(\mu_i) \right]. \quad (5.8)$$

Em virtude de neste trabalho serem utilizadas apenas fontes isotrópicas, a expressão para a resposta do detector pode ser simplificada na forma

$$\begin{aligned} R &= \sum_{r=1}^R \sum_{k=1}^{N_r} \sum_{j=1}^N w_{r,k} S(z_{r,k}) \left[A_{r,j} e^{-(z_{r,k} - z_r)/\nu_{r,j}} + B_{r,j} e^{-(z_{r+1} - z_{r,k})/\nu_{r,j}} \right] \phi_{r,j} \\ &+ \sum_{r=1}^R \sum_{k=1}^{N_r} \sum_{i=1}^N w_{r,k} w_i S(z_{r,k}) \left[\psi^p(z_{r,k}, \mu_i) + \psi^p(z_{r,k}, -\mu_i) \right] \\ &+ \sum_{i=1}^N w_i \mu_i \left[g_1(\mu_i) \phi_i^1 + g_2(\mu_i) \phi_i^2 \right] \\ &+ \sum_{i=1}^N w_i \mu_i \left[g_1(\mu_i) \psi^p(0, \mu_i) + g_2(\mu_i) \psi^p(z_0, -\mu_i) \right], \end{aligned} \quad (5.9)$$

onde $\phi_{r,j}$ é tal que

$$\phi_{r,j} = \sum_{i=1}^N w_i \left[\phi^{\nu_{r,j}}(\mu_i) + \phi^{\nu_{r,j}}(-\mu_i) \right]. \quad (5.10)$$

Salienta-se que a regra de quadratura utilizada para o cálculo da integral sobre a variável espacial z , na resposta do detector, não é necessariamente a mesma em cada região do problema, havendo liberdade para a escolha do tipo de quadratura e número de nós utilizados, conforme se mostre necessário para a obtenção de uma boa aproximação.

Neste trabalho, é utilizada a quadratura de Gauss-Legendre para a aproximação das integrais sobre a variável espacial, devidamente remapeada para o intervalo de interesse. Por simplicidade, o número de nós utilizados em cada região é idêntico, tendo sido definido, em cada teste, de maneira a não haver alterações nas respostas do detector diante de refinamentos da regra de quadratura.

5.1.1 Resultados Numéricos para o Problema Fonte-Detector

A verificação do método ADO para a equação adjunta de transporte é feita através da comparação da resposta do detector obtida através das Eqs. (5.2) e (5.3).

Inicialmente é considerado o caso isotrópico da seção 4.5, onde as autofunções são obtidas de maneira explícita. Posteriormente, é considerado o caso geral anisotrópico com autofunções obtidas de maneira numérica.

5.1.1.1 Espalhamento Isotrópico com Autofunção Analítica: Problema 1

Como primeiro problema teste, em [45, 51] é proposto um problema de transporte em meio material heterogêneo, com propriedades físicas descritas na figura 5.2. São consideradas duas fontes isotrópicas interiores: $S_1 = 1$ para $z \in$

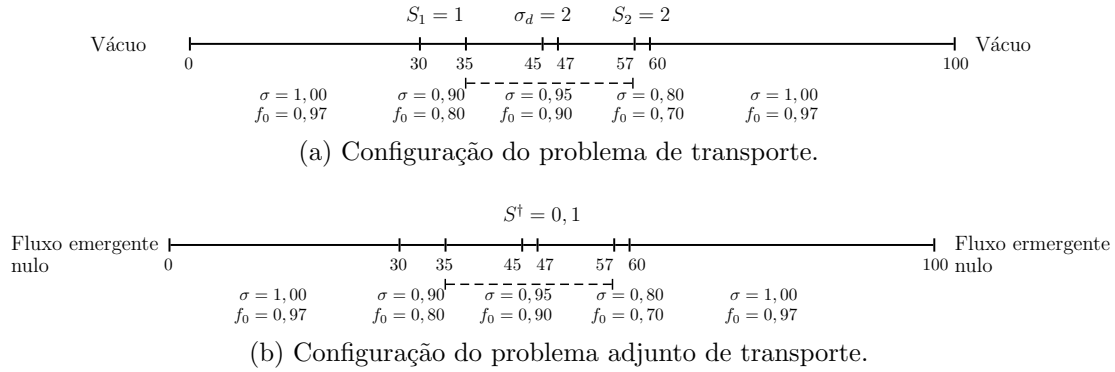


Figura 5.2: Problema teste considerando espalhamento isotrópico em 5 regiões. Em (a) são consideradas fontes de partículas $S_1 = 1$ em $[30,35]$ e $S_2 = 2$ em $[57,60]$, assim como um detector com seção de choque de absorção $\sigma_d = 0,1$ em $[45,47]$. O contorno é de vácuo. Para (b), a fonte adjunta é definida como $S^\dagger = 0,1$ em $[45,47]$ e $S^\dagger = 0$ no restante da placa e o contorno é de fluxo emergente nulo.

$[30,35]$ e $S_2 = 2$ para $z \in [57,60]$, e condições de contorno de vácuo, isto é, o fluxo angular é nulo em todas as direções incidentes na fronteira. Um detector d , com seção de choque de absorção $\sigma_d = 0,1$, é posicionado em $z \in [45,47]$. Para a equação

adjunta, é considerado um termo fonte $S^\dagger = \sigma_d$ em $z \in [45,47]$ e são impostas condições de fluxo angular adjunto nulo nas direções emergentes na fronteira. São definidas as respostas calculadas através do fluxo angular pela formulação dada pela Eq. (5.2)

$$R = \langle \psi, \sigma_d \rangle, \quad R_1 = \langle \psi_1, \sigma_d \rangle, \quad R_2 = \langle \psi_2, \sigma_d \rangle, \quad (5.11)$$

onde, para $j = 1, 2$, ψ_j é o fluxo angular quando apenas a fonte S_j está ativa, ψ é o fluxo angular quando ambas as fontes estão ativas. Por linearidade, fica claro que $R = R_1 + R_2$. Para as respostas com o fluxo angular adjunto através da Eq. (5.3), têm-se

$$R_1^\dagger = \langle \psi^\dagger, S_1 \rangle, \quad R_2^\dagger = \langle \psi^\dagger, S_2 \rangle, \quad R^\dagger = R_1^\dagger + R_2^\dagger. \quad (5.12)$$

Além disso, como são utilizadas condições de contorno de vácuo para a equação de transporte, é esperado, com exceção de erros numéricos,

$$R_1 = R_1^\dagger, \quad R_2 = R_2^\dagger, \quad R = R^\dagger. \quad (5.13)$$

Para os testes, a solução particular utilizada foi a da seção 4.2.1, constante em cada região.

Tabela 5.1: R_j e R_j^\dagger : respostas do detector calculadas através das Eqs. (5.2) e (5.3), respectivamente, quando apenas a j -ésima fonte está ativa. R e R^\dagger : respostas totais. N é o grau da regra de quadratura de Gauss-Legendre utilizada para a variável angular. Os resultados são escalados para 10^{-2} .

N	2	16	20	Militão <i>et al.</i> [45]
R_1	3,71215300	3,71915402	3,71915402	3,72
R_1^\dagger	3,71215300	3,71915402	3,71915402	
R_2	6,61579339	6,62782199	6,62782199	6,63
R_2^\dagger	6,61579338	6,62782199	6,62782199	
R	10,3279464	10,3469760	10,3469760	10,35
R^\dagger	10,3279464	10,3469759	10,3469760	

Os resultados apresentados na tabela 5.1 corroboram uma aproximação de seis casas decimais e concordam com os resultados apresentados em [45], obtidos com uma quadratura de Gauss-Legendre de 32 nós no intervalo $[-1,1]$, equivalente ao ADO com $N = 16$. Destaca-se que cada uma das respostas, R_1 , R_2 e R requerem que a Eq. (3.1) seja resolvida antes que a Eq. (5.2) seja avaliada. Por outro lado, R_1^\dagger , R_2^\dagger e R^\dagger podem ser computados com apenas uma avaliação da Eq. (3.25), cada uma seguida do cálculo da Eq. (5.3). O tempo de execução para os testes ficaram entre 150 e 350 milissegundos.

5.1.1.2 Espalhamento Isotrópico com Autofunção Analítica: Problema 2

Como um segundo problema teste, será considerada outra placa de material heterogêneo, como proposta em [45, 51], onde há interesse em determinar as leituras do detector em $t = 0$, $t = 1$ e $t = 5$ anos após o armazenamento de uma fonte de ${}^{60}_{27}\text{Co}$ na estrutura apresentada na figura 5.3a. É imposta condição de contorno reflexiva em $z = 0$, isto é,

$$\psi(0, \mu) = \psi(0, -\mu), \quad (5.14)$$

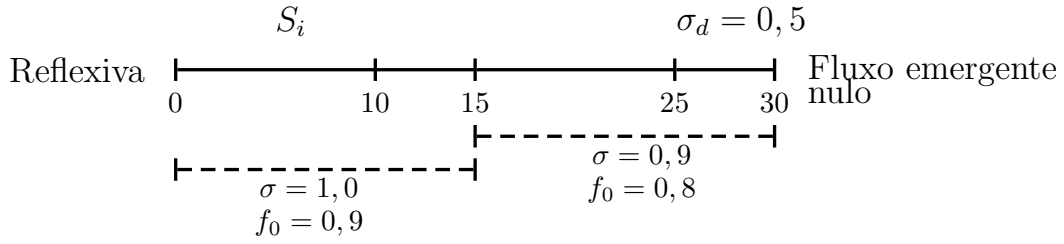
para $\mu > 0$ e condição de vácuo em $z = 30$. Para simular o decaimento, três fontes distintas são consideradas, estas definidas por

$$S_0 = 10^{22}, \quad S_1 = S_0 e^{-\lambda}, \quad S_2 = S_0 e^{-5\lambda}, \quad (5.15)$$

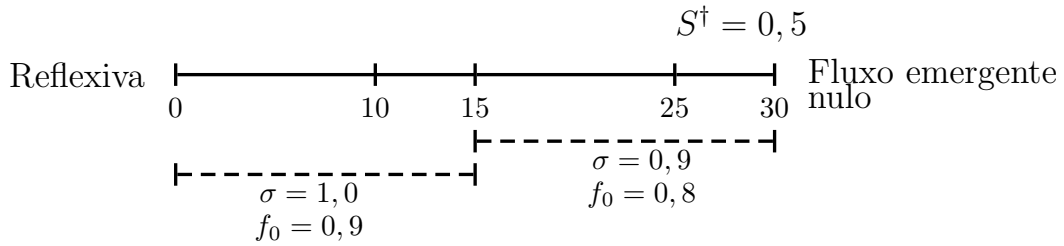
onde $S_0 = 10^{22}$ é aproximadamente 1g de ${}^{60}_{27}\text{Co}$ e $\lambda = 0,13177703$ é a constante de decaimento radioativo, de acordo com [40]. Um detector com seção de choque de absorção $\sigma_d = 0,5$ é posicionado em $z \in [25,30]$. Os resultados são resumidos na tabela 5.2, onde R é a resposta do detector calculada através da Eq. (5.2) e R^\dagger é a resposta calculada através da Eq. (5.3). Novamente, é esperado

$$R = R^\dagger \quad (5.16)$$

por causa da ausência de fluxo incidente na fronteira.



(a) Configuração do problema de transporte.



(b) Configuração do problema adjunto de transporte.

Figura 5.3: Problema teste considerando espalhamento isotrópico em duas regiões. Em (a) é considerada uma fonte de partículas S_i em $[0,10]$, simulando três instantes fixos, $t = 0,1,5$ anos, do decaimento de uma fonte de ${}^{60}_{27}\text{Co}$ em raios γ . Um detector com seção de choque de absorção $\sigma_d = 0,5$ é posicionado em $[25,30]$. A condição contorno em $z = 0$ é reflexivo e em $z = 30$ é vácuo. Para (b), a fonte adjunta é definida como $S^\dagger = 0,5$ em $[25,30]$ e $S^\dagger = 0$ no restante da placa. São consideradas condições de contorno reflexivas e de fluxo emergente nulo, em $z = 0$ e $z = 30$, respectivamente.

Tabela 5.2: Respostas do detector R e R^\dagger calculadas através das Eqs. (5.2) e (5.3), respectivamente. É utilizada quadratura de Gauss-Legendre de ordem N para o tratamento da variável angular. Os resultados são escalados para $\times 10^{19}$.

N	10	30	64	Militão et al, [45]
	S_0			
R	3,97616580	3,97616577	3,97616577	3,976
R^\dagger	3,97616580	3,97616577	3,97616577	3,975
	S_1			
R	3,48525412	3,48525409	3,48525409	3,487
R^\dagger	3,48525412	3,48525409	3,48525409	3,486
	S_2			
R	2,05737899	2,05737898	2,05737898	2,056
R^\dagger	2,05737899	2,05737898	2,05737898	2,055

Os resultados obtidos com $N = 10, 30, 64$ apresentam uma aproximação de até oito casas decimais. Também concordam em até duas casas decimais com aqueles apresentados em [45], onde é utilizada uma quadratura de Gauss-Legendre com 128 nós no intervalo $[-1, 1]$, a qual é equivalente ao $N = 64$ da formulação ADO, embora tais resultados já tenham sido obtidos com $N = 30$. Além do mais, o tempo de execução ficou entre 250 e 400 milissegundos.

5.1.1.3 Espalhamento Anisotrópico: Problema 1

Nesta subseção é utilizada a abordagem geral para problemas anisotrópicos apresentada na seção 4.1. O caso particular isotrópico, $L = 0$, é diferente do apresentado na seção 4.5 pois, neste caso, utiliza autofunções avaliadas numericamente.

Inicialmente é apresentada uma extensão anisotrópica do problema originalmente apresentado em [45, 51] e testado na seção anterior. É novamente considerada a placa heterogênea descrita na figura 5.2, onde as fontes, condições de contorno e detector permanecem os mesmos do teste anterior. Os coeficientes da lei de espalhamento são dados por [8]

$$\gamma_l = \left(\frac{2l+1}{2l-1} \right) \left(\frac{L+1-l}{L+1+l} \right) \gamma_{l-1}, \quad (5.17)$$

para $l \geq 1$ e $\gamma_0 = 1$, e é definido $f_l = f_0 \gamma_l$ nas Eqs. (3.1) e (3.25). Para $L > 1$, verificação dos resultados não é feita através de comparações com dados disponíveis na literatura, apenas por meio da comparação das respostas do detector obtida pelas Eqs. (5.2) e (5.3). Como solução particular, é utilizada a definida na seção 4.2.2, dada através da função de Green.

Tabela 5.3: R_j e R_j^\dagger : respostas do detector computadas através das Eqs. (5.2) e (5.3) quando apenas a j -ésima fonte está ativa. R e R^\dagger : respostas totais. Resultados para grau 0 de anisotropia. É utilizada quadratura de Gauss-Legendre de ordem N para o tratamento da variável angular. São escalados para $\times 10^{-2}$.

N	4	8	16	32
R_1	3,719155727	3,719159139	3,719159234	3,719159237
R_1^\dagger	3,719150509	3,719153921	3,719154016	3,719154018
R_2	6,627796628	6,627826893	6,627827202	6,627827207
R_2^\dagger	6,627791410	6,627821675	6,627821984	6,627821989
R	10,3469471	10,3469808	10,3469812	10,3469812
R^\dagger	10,3469419	10,3469756	10,3469760	10,3469760

A tabela 5.3 indica que o método ADO com autofunção numérica apresentou convergência para 7 casas decimais, e os resultados concordam com aqueles exibidos na tabela 5.1.

Tabela 5.4: R_j e R_j^\dagger : respostas do detector computadas através das Eqs. (5.2) e (5.3) quando apenas a j -ésima fonte está ativa. R e R^\dagger : respostas totais. Resultados para grau 1 de anisotropia. É utilizada quadratura de Gauss-Legendre de ordem N para o tratamento da variável angular. São escalados para $\times 10^{-2}$.

N	4	8	16	32
R_1	7,162014851	7,162022517	7,162022687	7,162022690
R_1^\dagger	7,162014851	7,162022517	7,162022687	7,162022690
R_2	12,3392999	12,3393587	12,3393593	12,3393593
R_2^\dagger	12,3392999	12,3393587	12,3393593	12,3393593
R	19,5013147	19,5013812	19,5013820	19,5013820
R^\dagger	19,5013147	19,5013812	19,5013820	19,5013820

Para o problema linearmente anisotrópico, a tabela 5.4 também mostra que houve convergência de 7 casas decimais.

Tabela 5.5: R_j e R_j^\dagger : respostas do detector computadas através das Eqs. (5.2) e (5.3) quando apenas a j -ésima fonte está ativa. R e R^\dagger : respostas totais. Resultados para grau 2 de anisotropia. É utilizada quadratura de Gauss-Legendre de ordem N para o tratamento da variável angular. São escalados para $\times 10^{-2}$.

N	4	8	16	32
R_1	1,04218142	1,04218271	1,04218274	1,04218274
R_1^\dagger	1,04218142	1,04218271	1,04218274	1,04218274
R_2	1,75175220	1,75176167	1,75176176	1,75176177
R_2^\dagger	1,75175220	1,75176167	1,75176176	1,75176177
R	2,79393362	2,79394439	2,79394450	2,79394451
R^\dagger	2,79393362	2,79394439	2,79394450	2,79394451

Da mesma maneira, para o problema com grau 2 de anisotropia, a tabela 5.5 mostra convergência de 7 casas decimais.

Tabela 5.6: R_j e R_j^\dagger : respostas do detector computadas através das Eqs. (5.2) e (5.3) quando apenas a j -ésima fonte está ativa. R e R^\dagger : respostas totais. Os resultados são escalados para 10^{-2} . É utilizada quadratura de Gauss-Legendre de ordem N para o tratamento da variável angular. Resultados para grau 200 de anisotropia. São escalados para $\times 10^{-1}$.

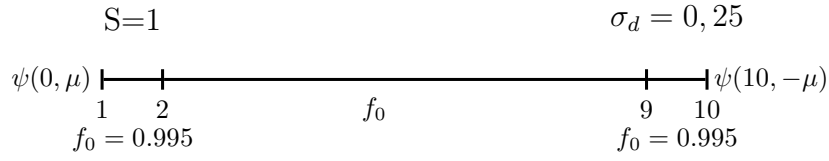
N	20	32	64	128
R_1	3,229450025850	3,229449690137	3,229449690199	3,229449690199
R_1^\dagger	3,229449250196	3,229449690137	3,229449690199	3,229449690200
R_2	4,557180899280	4,557180440372	4,557180440568	4,557180440570
R_2^\dagger	4,557179745639	4,557180440372	4,557180440568	4,557180440572
R	7,786630925131	7,786630130509	7,786630130767	7,786630130769
R^\dagger	7,786628995835	7,786630130509	7,786630130767	7,786630130772

Por fim, para grau 200 de anisotropia, a tabela 5.6 mostra convergência de até 12 casas decimais, entretanto foi necessário elevar o valor de N para que houvesse concordância entre as respostas obtidas com o fluxo de partículas e o fluxo adjunto.

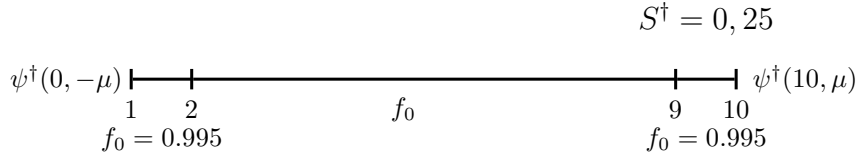
5.1.1.4 Espalhamento Anisotrópico: Problema 2

Como um último problema-teste, considerou-se um problema de transporte em meio de material heterogêneo com espalhamento isotrópico, conforme descrito pela figura 5.4. Para a equação de transporte, são utilizadas as condições de contorno dadas por

$$\begin{aligned}
 \psi(0, \mu) &= 1 + \frac{1}{10} \psi(0, -\mu) + \frac{2}{5} \int_0^1 \mu' \psi(0, -\mu') d\mu', \\
 \psi(10, -\mu) &= \frac{3}{10} \psi(10, \mu) + \frac{4}{5} \int_0^1 \mu' \psi(10, \mu') d\mu',
 \end{aligned} \tag{5.18}$$



(a) Configuração do problema de transporte.



(b) Configuração do problema adjunto de transporte.

Figura 5.4: Problema teste considerando espalhamento isotrópico em três regiões. Na região central, $z \in [2,9]$, a seção de choque de espalhamento é f_0 e assumirá diversos valores, dados de acordo com a tabela 5.7. Em (a) é considerada uma fonte de partículas $S = 1$ em $[1,2]$. Um detector com seção de choque de absorção $\sigma_d = 0,25$ é posicionado em $[9,10]$. As condições contorno em $z = 1$ e em $z = 10$ são dadas pela Eq. (5.18). Para (b), a fonte adjunta é definida como $S^\dagger = 0,25$ em $[1,2]$ e $S^\dagger = 0$ no restante da placa.

para $\mu > 0$, uma fonte interna isotrópica $S = 1$ em $[0,1]$ e um detector D com seção de choque de absorção $\sigma_d = 0.25$ em $[9,10]$. Para a equação adjunta, o termo fonte é definido como $S^\dagger = \sigma_d$ em $[9,10]$. A tabela 5.7 resume os resultados obtidos para diversos valores de seção de choque de espalhamento em $z \in [2,9]$.

Tabela 5.7: Resultados obtidos com regra de quadratura de Gauss-Legendre de ordem N para o tratamento da variável angular. R_N representa a resposta do detector obtida através da Eq. (5.2) utilizando quadratura de ordem N e R_N^\dagger a resposta obtida através da Eq. (5.3) com quadratura de ordem N .

$N \setminus f_0$	0,995	0,99	0,95	0,8
	$\times 10^{-1}$	$\times 10^{-1}$	$\times 10^{-1}$	$\times 10^{-2}$
R_4	7,4445786707	5,795277894483	1,491020662621	1,2340659176617
R_4^\dagger	7,4445786707	5,795277894483	1,491020662621	1,2340659176617
R_8	7,4446197621	5,795332590010	1,491064821289	1,2341551097653
R_8^\dagger	7,4446197621	5,795332590010	1,491064821289	1,2341551097652
R_{16}	7,4446169674	5,795330600667	1,491064457400	1,2341547402765
R_{16}^\dagger	7,4446169673	5,795330600667	1,491064457400	1,2341547402764
R_{32}	7,4446168859	5,795330538642	1,491064440960	1,2341547187342
R_{32}^\dagger	7,4446168859	5,795330538643	1,491064440960	1,2341547187343

Os resultados apresentaram boa aproximação e convergência de até 12 casas decimais.

Em todos os testes apresentados, com diferentes graus de anisotropia e condições de contorno, a formulação ADO aplicada à equação adjunta de transporte apresentou resultados com excelente precisão e rapidez. Em comparação com os resultados presentes em [45], a formulação ADO foi capaz de produzir resultados equivalentes com quadraturas menos refinadas para o tratamento da variável espacial e foi capaz de atingir convergência para um número maior de casas decimais com relação aos apresentados na referência.

5.2 Problema Inverso de Reconstrução de Fontes de Partículas

Como aplicação da equação adjunta de transporte, Eq. (3.25), e da abordagem fonte-detector apresentada na seção 5.1, deseja-se determinar a distribuição de fontes isotrópicas de radiação em situações nas quais a geometria e a composição dos materiais são conhecidos, nos moldes apresentados por Hykes e Azmy [35]. Estes são problemas inversos que têm como objetivo a estimativa da distribuição de fontes internas de partículas através de um processo de minimização no qual a convergência é verificada através da comparação de medidas computadas com medidas previamente conhecidas, oriundas de experimentos nas aplicações práticas. A abordagem fonte-detector simplifica o problema inverso, possibilitando a derivação de um problema matricial de minimização.

Considera-se a equação de transporte, Eq. (3.1), com fonte de partículas isotrópica

$$\mathcal{L}\psi(z, \mu) = S(z) \quad (5.19)$$

para $z \in [z_0, z_R]$ e $\mu \in [-1, 1]$, sujeito a condições de contorno dadas pelas Eqs. (2.29) e (2.30)

$$\psi(z_0, \mu) = g_1(\mu) + \rho_1^s \psi(z_0, -\mu) + 2\rho_1^d \int_0^1 \mu' \psi(z_0, -\mu') d\mu', \quad (5.20)$$

e

$$\psi(z_R, -\mu) = g_2(\mu) + \rho_2^s \psi(z_R, \mu) + 2\rho_2^d \int_0^1 \mu' \psi(z_R, \mu') d\mu', \quad (5.21)$$

para $\mu \in (0, 1]$. Suponha-se a presença de D detectores no interior da placa definida em $[z_0, z_R]$ e conhecido $\mathbf{r}_m \in \mathbb{R}_+^D$, vetor formado pelas medidas das respostas de cada detector, possivelmente obtidas de maneira experimental. O problema de interesse é a determinação (ou aproximação) da fonte S através do modelo de transporte e das medidas dos detectores.

Como a geometria e os materiais do problema são conhecidos, é possível determinar os fluxos angulares adjuntos

$$L^\dagger \psi_i^\dagger = \sigma_{d,i}, \quad (5.22)$$

sujeitos, com $\mu \in (0,1]$, a condições de contorno

$$\psi_i^\dagger(z_0, -\mu) = \rho_1^s \psi_i^\dagger(z_0, \mu) + 2\rho_1^d \int_0^1 \mu' \psi_i^\dagger(z_0, \mu') d\mu', \quad (5.23)$$

e

$$\psi_i^\dagger(z_R, \mu) = \rho_2^s \psi_i^\dagger(z_R, -\mu) + 2\rho_2^d \int_0^1 \mu' \psi_i^\dagger(z_R, -\mu') d\mu', \quad (5.24)$$

para $i \in \{1, \dots, D\}$, onde $\sigma_{d,i}$ são as seções de choque de absorção de cada detector. Supondo-se que uma fonte interna isotrópica $S(z)$ possa ser aproximada por uma função $\tilde{S}(z)$ definida em $z \in [z_0, z_R]$, tal que

$$\tilde{S}(z) = \sum_{b=1}^B s_b a^b(z), \quad (5.25)$$

com $\{a^1(z), \dots, a^B(z)\}$ base de funções, $s_1, \dots, s_B \in \mathbb{R}$ os pesos da combinação linear a serem determinados. Então, a i -ésima resposta do detector é dada por

$$r_i = \langle \psi_i^\dagger, S \rangle = \sum_{j=1}^P s_j \langle \psi_i^\dagger, a^j \rangle = \mathbf{a}_i^T \mathbf{s} - p_i, \quad (5.26)$$

onde $\mathbf{s} \in \mathbb{R}^P$ é o vetor dos pesos, isto é,

$$\mathbf{s} = [s_1 \ \cdots \ s_B]^T, \quad (5.27)$$

$\mathbf{a}_i \in \mathbb{R}^B$ é o vetor formado por

$$\mathbf{a}_i = [\langle \psi_i^\dagger, a^1 \rangle \ \cdots \ \langle \psi_i^\dagger, a^B \rangle]^T \quad (5.28)$$

e

$$p_i = P[g_1, g_2, \psi_i^\dagger]. \quad (5.29)$$

Por fim, são definidos $\mathbf{r}, \mathbf{p} \in \mathbb{R}^D$, os vetores das componentes r_i e p_i calculadas nas Eqs. (5.26) e (5.29), respectivamente, de acordo com

$$\mathbf{r} = [r_1 \ \cdots \ r_D]^T \quad (5.30)$$

e

$$\mathbf{p} = [p_1 \cdots p_D]^T. \quad (5.31)$$

Desta forma, obtém-se

$$\mathbf{r} = A\mathbf{s} - \mathbf{p}, \quad (5.32)$$

onde $A \in \mathbb{R}^{D \times B}$ é definida por

$$A = \begin{bmatrix} \mathbf{a}_1^T \\ \mathbf{a}_2^T \\ \vdots \\ \mathbf{a}_D^T \end{bmatrix}. \quad (5.33)$$

Como feito por Hykes e Azmy em [35], é definido o funcional custo $f : \mathbb{R}^B \rightarrow \mathbb{R}_+$

$$f(\mathbf{s}) = \|\mathbf{r}_m - \mathbf{r}\|_2^2 = \|\mathbf{r}_m - A\mathbf{s} + \mathbf{p}\|_2^2 = \|\mathbf{r}' - A\mathbf{s}\|_2^2, \quad (5.34)$$

onde $\mathbf{r}' = \mathbf{r}_m + \mathbf{p}$ e $\|\cdot\|_2$ é a norma Euclidiana vetorial. Desta forma, a fonte será estimada a partir da minimização da Eq. (5.34)

$$\hat{\mathbf{s}} = \underset{\mathbf{s} \in \mathbb{R}^B}{\operatorname{argmin}} \|\mathbf{r}' - A\mathbf{s}\|_2. \quad (5.35)$$

Caso A seja inversível, é possível determinar $\hat{\mathbf{s}}$ tal que $f(\hat{\mathbf{s}}) = 0$, o que pode ser verificado nos códigos computacionais. Nos demais casos, o problema é tratado como um processo de minimização de mínimos quadrados [42].

5.2.1 Resultados Numéricos para a Reconstrução de Fontes Isotrópicas de Partículas com Distribuição e Forma Conhecidas

5.2.1.1 Problema Teste 1: Reconstrução Sobredeterminada de Fonte Constante

Considera-se o problema de transporte monoenergético e isotrópico a seguir, em meio homogêneo com condições de contorno de vácuo.

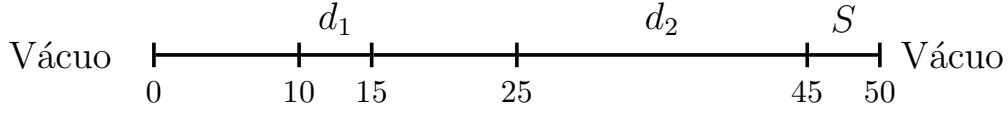


Figura 5.5: Configuração do Problema 1. É considerado um único meio material e espalhamento isotrópico, com $\sigma = 1$ e $f_0 = 0,9$. Dois detectores, d_1 e d_2 com seções de choque de espalhamento $\sigma_{d,1} = 0,25$ e $\sigma_{d,2} = 0,1$, são posicionados em $[10,15]$ e $[25,45]$, respectivamente. A fonte a ser reconstruída é $S = 2$ para $z \in [45,50]$ e $S = 0$ caso contrário.

A seção de choque macroscópica total é $\sigma = 1$ e a seção de choque de espalhamento é dada por $f_0 = 0,9$. Uma fonte interior constante de magnitude $S = 2$ é posicionada em $z \in [45,50]$, e um par de detectores, d_1 e d_2 , com seções de choque de absorção $\sigma_{d,1} = 0.25$ e $\sigma_{d,2} = 0.1$, são colocados em $z \in [10,15]$ e $z \in [25,25]$, respectivamente. Para o problema inverso testado, é admitido o conhecimento prévio da posição da fonte e que a mesma é constante. Em termos da formulação apresentada na seção 5.2, a base utilizada para a fonte será a função $a^1(z) = 1$ quando $z \in [45,50]$ e $a^1(z) = 0$ caso contrário. Desta forma, a fonte buscada é do tipo

$$\tilde{S}(z) = s_1 a^1(z), \quad (5.36)$$

a qual dá origem ao sistema

$$\begin{aligned} r_1 &= \langle \psi_1^\dagger, \tilde{S} \rangle = s_1 \langle \psi_1^\dagger, a^1 \rangle \\ r_2 &= \langle \psi_2^\dagger, \tilde{S} \rangle = s_1 \langle \psi_2^\dagger, a^1 \rangle, \end{aligned} \quad (5.37)$$

ou, como na Eq. (5.32),

$$\mathbf{r} = \begin{bmatrix} \langle \psi_1^\dagger, a^1 \rangle \\ \langle \psi_2^\dagger, a^1 \rangle \end{bmatrix} s_1 \quad (5.38)$$

com $\mathbf{p} = 0$, pois as condições de contorno são de vácuo.

A fim de serem evitados *crimes inversos* [48], são utilizadas como medidas, \mathbf{r}_m , para o processo de minimização do funcional dado pela Eq. (5.34), perturbações das respostas dos detectores produzidas pelo método ADO aplicado à própria equação de transporte. A tabela 5.8 apresenta as leituras dos detectores para diversos valores de N no problema teste.

Tabela 5.8: Respostas dos detectores para quadraturas de Gauss-Legendre de grau $N = 4, 8, 16, 32$ para o tratamento da variável angular.

N	d_1	d_2
4	$1,0320190543933093 \times 10^{-6}$	3,1970475846099871
8	$1,0320556962903920 \times 10^{-6}$	3,1970576840559954
16	$1,0320556716283001 \times 10^{-6}$	3,1970579704972755
32	$1,0320556711242592 \times 10^{-6}$	3,1970579756626014

Quando escolhidos como medidas \mathbf{r}_m os valores exatos, isto é, r_1 como o valor da coluna D_1 da tabela 5.8 e r_2 como o valor da coluna D_2 da tabela 5.8, é obtido o valor exato, $S = 2$, para a intensidade da fonte para todos os valores de N , entretanto isto se caracteriza como um crime inverso. A ideia é perturbar os valores exatos com o intuito de simular possíveis erros obtidos com as medidas e sair de tal situação. Para esse fim, o vetor de medidas, \mathbf{r}_m , é construído como uma perturbação positiva de até 10% dos valores apresentados nas colunas d_1 e d_2 da tabela 5.8, conforme a Eq. (5.39) a seguir

$$\tilde{\mathbf{r}}_{m,i} = (1 + 0.1 \times \alpha_i) \times \mathbf{r}_{m,i}, \quad (5.39)$$

onde $i = 1, \dots, D$, \mathbf{r}_m é o vetor das medidas exatas, de acordo com a tabela 5.8, $\alpha_i \in [0,1)$ é um número pseudoaleatório uniformemente gerado e $\tilde{\mathbf{r}}_m$ é a medida perturbada, a qual será utilizada nos testes. Para cada valor de N , a reconstrução é executada um milhão de vezes com diferentes números aleatórios e o erro relativo em relação ao valor exato da fonte é calculado.

Tabela 5.9: Erro relativo para um milhão de perturbações de até 10%, uniformemente geradas em torno das medidas computadas \mathbf{r}_m .

N	Mínimo	Média	Máximo	Desvio Padrão
4	$1,3 \times 10^{-7}$	$4,993 \times 10^{-2}$	0,1	0,02885872
8	$1,0 \times 10^{-8}$	$4,997 \times 10^{-2}$	0,1	0,02885872
16	$2,0 \times 10^{-7}$	$4,999 \times 10^{-2}$	0,1	0,02886366
32	$1,0 \times 10^{-8}$	$4,997 \times 10^{-2}$	0,1	0,02885872

Os resultados apresentados na tabela 5.9 sugerem que a aproximação obtida pouco dependeu do valor de N utilizado, isto é, o erro numérico da aproximação dos coeficientes da matriz na Eq. (5.38) pouco influenciou nos resultados, entretanto esse fenômeno é provavelmente devido à boa aproximação apresentada para valores baixos de N para a leitura do detector.

5.2.1.2 Problema Teste 2: Reconstrução de Duas Fontes Constantes com Dois Detectores

Para o próximo teste, considera-se o problema de transporte linearmente anisotrópico em meio heterogêneo descrito pela figura 5.6. Dois detectores são posicionados em $z \in [5,8]$ e $z \in [70,75]$, ambos com seção de choque de absorção $\sigma_d = 0.5$. A fonte S é tal que $S(z) = 2$ para $z \in [35,45]$ e $S(z) = 3$ para $z \in [60,65]$, sendo nula para os demais valores da variável z . As condições de contorno são de vácuo.

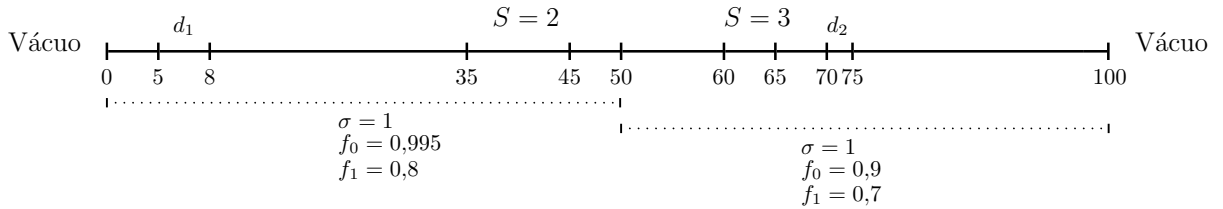


Figura 5.6: Configuração do Problema 2. São considerados dois meios materiais com propriedades descritas na figura e espalhamento isotrópico. Dois detectores, d_1 e d_2 com seções de choque de espalhamento $\sigma_{d,1} = \sigma_{d,2} = 0,5$, são posicionados em $[5,8]$ e $[70,75]$, respectivamente. A fonte a ser reconstruída é $S = 2$ para $z \in [35,45]$, $S = 3$ para $z \in [60,65]$ e $S = 0$ caso contrário.

Para o problema inverso, são consideradas conhecidas as posições nas quais a fonte de partículas é não nula. A base para esta fonte é formada pelas funções constante por partes $a^1(z) = 1$ para $z \in [35,45]$ e nula para os demais valores de z , e $a^2(z) = 1$ para $z \in [60,65]$ e nula para os demais valores de z . Desta forma, a hipótese para a solução é

$$S(z) = s_1 a^1(z) + s_2 a^2(z), \quad (5.40)$$

a qual origina o sistema de equações

$$\begin{aligned} r_1 &= \langle \psi_1^\dagger, S \rangle = s_1 \langle \psi_1^\dagger, a^1 \rangle + s_2 \langle \psi_1^\dagger, a^2 \rangle, \\ r_2 &= \langle \psi_2^\dagger, S \rangle = s_1 \langle \psi_2^\dagger, a^1 \rangle + s_2 \langle \psi_2^\dagger, a^2 \rangle, \end{aligned} \quad (5.41)$$

ou,

$$\mathbf{r} = \begin{bmatrix} \langle \psi_1^\dagger, a^1 \rangle & \langle \psi_1^\dagger, a^2 \rangle \\ \langle \psi_2^\dagger, a^1 \rangle & \langle \psi_2^\dagger, a^2 \rangle \end{bmatrix} \mathbf{s}, \quad (5.42)$$

com s_1 e s_2 os valores que a fonte assume para $z \in [35,45]$ e $z \in [60,65]$, respectivamente.

Para a reconstrução, a matriz da Eq. (5.42) é gerada através do método ADO com $N = 16$. Os valores das medidas utilizados para o teste foram gerados através das respostas obtidas pelo método ADO para a equação de transporte com $N = 4$. Para os valores exatos das medidas, \mathbf{r}_m , a tabela 5.10 a seguir mostra os resultados obtidos.

Tabela 5.10: Reconstrução da fonte do problema teste.

s_1	s_2	Erro Relativo
2,000014	2,999991	$O(10^{-6})$

Após uma perturbação de até 10% ser aplicada às medidas geradas pelo método ADO, conforme a Eq. (5.39), a tabela 5.11 a seguir sintetiza os resultados obtidos para a reconstrução da fonte em termos do erro relativo entre os valores obtidos e os exatos.

Tabela 5.11: Erro relativo para um milhão de perturbações de até 10% uniformemente geradas em torno das medidas computadas \mathbf{r}_m .

Mínimo	Média	Máximo	Desvio Padrão
0,001242	0,028930	0,041950	0,041950

Para um milhão de perturbações das medidas exatas, o valor médio para o erro relativo da fonte reconstruída não ultrapassou 10% em relação as valores exatos.

5.2.1.3 Problema Teste 3: Fonte Polinomial

Como terceiro problema teste, será considerada uma fonte polinomial definida em toda a placa. Considera-se uma placa homogênea e o problema de transporte isotrópico, monoenergético e com condições de contorno de vácuo, conforme a figura 5.7.

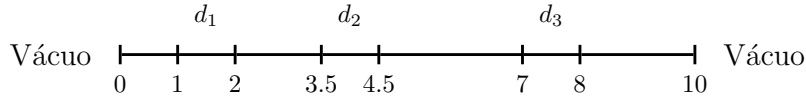


Figura 5.7: Configuração do Problema 3. É considerado um único meio material e espalhamento isotrópico, com $\sigma = 1$ e $f_0 = 0,8$. Três detectores, d_1 , d_2 e d_3 , com seções de choque de espalhamento $\sigma_{d,1} = \sigma_{d,2} = \sigma_{d,3} = 0,5$, são posicionados em $[1,2]$, $[3,5; 4,5]$ e $[7,8]$, respectivamente. A fonte a ser reconstruída é $S(z) = 1 - 2/5z + 1/25z^2$ para $z \in [0,10]$.

A seção de choque total é $\sigma = 1$, e a seção de choque de espalhamento é dada por $f_0 = 0.8$. Uma fonte polinomial é definida na placa de acordo com

$$S(z) = 1 - \frac{2}{5}z + \frac{1}{25}z^2, \quad (5.43)$$

para $z \in [0,10]$. Nota-se que os valores de máximo para esta fonte, $S = 1$, são atingidos em $z = 0$ e $z = 1$, enquanto o mínimo, $S = 0$, é alcançado em $z = 5$.

Para o problema inverso, é assumido que a fonte é dada por um polinômio de grau dois definido para $z \in [0,10]$. Ademais, três detectores, cujas seções de choque de absorção valem $\sigma_d = 0.5$, são posicionados em $z \in [1,2]$, $z \in [3.5,4.5]$ e $z \in [7,8]$. A partir da base $\{1, z, z^2\}$ de polinômios definidos em $z \in [0,10]$, tem-se

$$\begin{aligned} r_1 &= s_1 \langle \psi_1^\dagger, 1 \rangle + s_2 \langle \psi_1^\dagger, z \rangle + s_3 \langle \psi_1^\dagger, z^2 \rangle, \\ r_2 &= s_1 \langle \psi_2^\dagger, 1 \rangle + s_2 \langle \psi_2^\dagger, z \rangle + s_3 \langle \psi_2^\dagger, z^2 \rangle, \\ r_3 &= s_1 \langle \psi_3^\dagger, 1 \rangle + s_2 \langle \psi_3^\dagger, z \rangle + s_3 \langle \psi_3^\dagger, z^2 \rangle, \end{aligned} \quad (5.44)$$

ou,

$$\mathbf{r} = \begin{bmatrix} \langle \psi_1^\dagger, 1 \rangle & \langle \psi_1^\dagger, z \rangle & \langle \psi_1^\dagger, z^2 \rangle, \\ \langle \psi_2^\dagger, 1 \rangle & \langle \psi_2^\dagger, z \rangle & \langle \psi_2^\dagger, z^2 \rangle, \\ \langle \psi_3^\dagger, 1 \rangle & \langle \psi_3^\dagger, z \rangle & \langle \psi_3^\dagger, z^2 \rangle, \end{bmatrix} \mathbf{s}, \quad (5.45)$$

com $\mathbf{r} = [r_1 \ r_2 \ r_3]^T$ e $\mathbf{s} = [s_1 \ s_2 \ s_3]^T$.

A matriz definida na Eq. (5.45) é gerada através do método ADO para a equação adjunta com $N = 32$. Para o mesmo valor de N , quando as medidas são calculadas através do método ADO, a reconstrução da fonte é exata. A tabela 5.12 mostra os resultados obtidos quando é utilizado $N = 4$ no método ADO para o cálculo das medidas.

Tabela 5.12: Valores obtidos para os coeficientes da expansão da base em polinômio de grau 2. O erro relativo é calculado com relação à Eq. 5.43

S_1	S_2	S_3	Erro Relativo
1,0001456459962	-0,40006162937255	0,04000553708149	$O(10^{-4})$

A tabela 5.13 expõe os resultados obtidos para o erro relativo para um milhão de testes com diferentes perturbações de até 10% das medidas exatas \mathbf{r}_m , seguindo a Eq. (5.39).

Tabela 5.13: Erro relativo para um milhão de perturbações de até 10% uniformemente geradas em torno das medidas computadas \mathbf{r}_m .

Mínimo	Média	Máximo	Desvio Padrão
0,00042299110597	0,05481455272535	0,12500523465622	0,02400378621866

O erro máximo obtido foi de cerca de 12,5%, entretanto o desvio padrão do erro relativo indica a proximidade dos resultados da média de 5,48%.

5.2.2 Resultados Numéricos para o Reconstrução de Fontes Isotrópicas de Partículas Via Funções Constantes por Partes

Os problemas-teste até agora propostos assumiram o conhecimento sobre a forma da fonte e é uma abordagem válida sempre que houver conhecimento prévio dessa informação [35]. Entretanto, essa nem sempre é uma informação presente, fazendo-se necessárias aproximações. Suponha-se que não exista conhecimento prévio a respeito da forma do termo-fonte. Neste caso, uma placa definida em $[z_0, z_R]$ pode ser particionada em segmentos e uma base de funções constantes em cada segmento pode ser escolhida. Dado $[z_0, z_R]$ particionado em B segmentos conforme

$$[z_0, z_R] = \bigcup_{b=1}^B [z_{b-1}, z_b], \quad (5.46)$$

onde é definida a base $\{a^1(z), \dots, a^B(z)\}$ de acordo com

$$a^b(z) = \begin{cases} 1, & \text{se } z \in [z_{b-1}, z_b] \\ 0, & \text{caso contrário} \end{cases} \quad (5.47)$$

para $b = 1, \dots, B$. Desta forma, a aproximação da fonte é dada por

$$\tilde{S}(z) = \sum_{b=1}^B s_b a^b(z). \quad (5.48)$$

Se um detector for posicionado em cada segmento, o sistema obtido será dado por

$$r_i = \sum_{b=1}^B s_b \langle \psi_i^\dagger, a^b \rangle - p_i, \quad (5.49)$$

para $i = 1, \dots, D$. Pela construção, fica claro que as funções da base podem ser mais complexas do que constantes, embora tais casos não tenham sido testados no presente trabalho. Em adição, não precisa ser colocado necessariamente um detector em cada segmento, podendo ser desde nenhum até múltiplos detectores por segmento.

5.2.2.1 Problema Teste 1: Reconstrução de Fonte Polinomial

Como teste, considere a equação de transporte isotrópica, definida em uma placa homogênea em $[0,100]$, com condições de contorno de vácuo, seção de choque total $\sigma = 1$ e seção de choque de espalhamento $f_0 = 0.9$. No interior da placa, é definida a fonte polinomial

$$S(z) = -\frac{z(z - 100)}{2500}, \quad (5.50)$$

para $z \in [0,100]$. Para 8 segmentos, a figura 5.8 mostra os resultados obtidos com a reconstrução com medidas exatas e perturbadas. São utilizados 8 detectores, um por segmento, com seção de choque de absorção $\sigma_d = 0.5$.

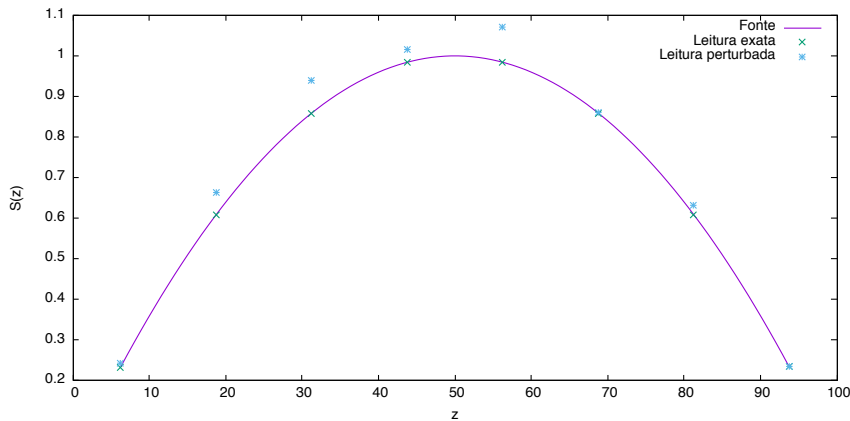


Figura 5.8: Gráfico da fonte polinomial exata e da reconstrução com 8 segmentos uniformes.

A reconstrução através das medidas exatas ficou exatamente sobre o gráfico da fonte original, enquanto erros surgiram na reconstrução baseada nas medidas perturbadas. Para o cálculo do erro, as leituras de cada detector são recalculadas utilizando a aproximação e o erro relativo é avaliado em relação às leituras exatas, para este problema teste, o erro relativo obtido foi de 6,54%. O problema também é resolvido dividindo a região de interesse em 16 segmentos. A figura 5.9 a seguir apresenta os resultados obtidos com a reconstrução.

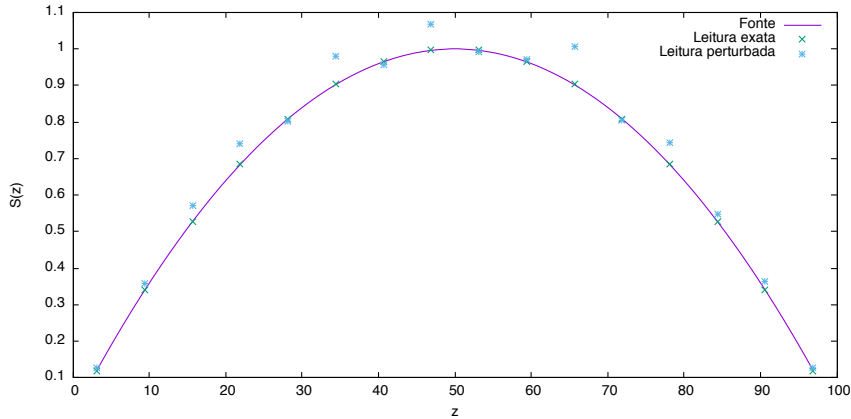


Figura 5.9: Gráfico da fonte polinomial exata e da reconstrução com 16 segmentos uniformes.

O erro relativo entre as leituras exatas obtidas pelos detectores e as obtidas com a reconstrução foi de 5,27%, uma melhora com relação ao uso de 8 segmentos.

5.2.2.2 Problema Teste 2: Reconstrução de Fonte Exponencial

Para o próximo problema-teste, considera-se um problema de transporte isotrópico em meio homogêneo definido em $z \in [0,10]$, com seções de choque total e de espalhamento dadas por, respectivamente, $\sigma = 1$ e $f_0 = 0.9$, condições de contorno de vácuo e fonte interna isotrópica definida por

$$S(z) = e^{-k(z-a)^2}. \quad (5.51)$$

A figura 5.10 a seguir representa o gráfico da fonte S para diversos valores de k .

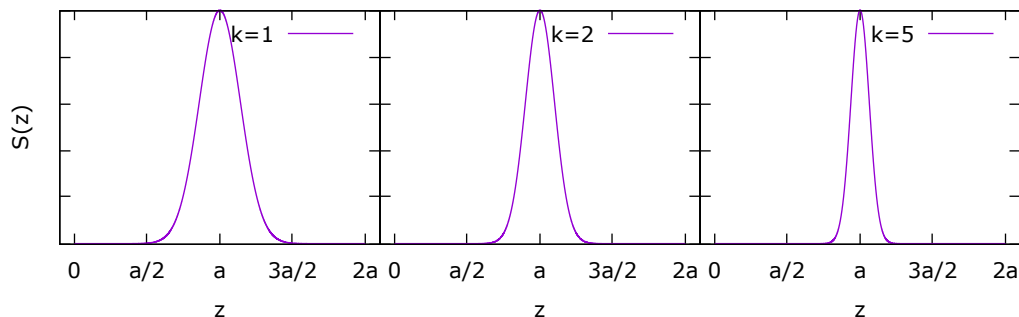


Figura 5.10: Gráficos da fonte exponencial para $k = 1, 2, 5$.

Conforme pode ser visto na figura 5.10, o parâmetro k altera a declividade de $S(z)$, tornando-a mais próxima de um pico unitário no eixo de simetria em $z = a$ à medida que k cresce. Para a reconstrução da fonte, a placa é inicialmente segmentada em 4, e 16 partes de maneira uniforme, conforme a Eq. (5.46), onde cada uma das partes contém um detector. A base escolhida para a aproximação da fonte é constante por partes, dada pela Eq. (5.47). Como no problema anterior, o erro relativo da reconstrução é calculado através da determinação das leituras dos detectores, dadas pela Eq. (5.2), onde o fluxo angular é obtido via a resolução da Eq. (3.1) com o termo-fonte obtido pela reconstrução através de perturbações de 10% das medidas exatas dos detectores. Os testes são executados para $k = 1$, $k = 2$ e $k = 5$, com $a = 5$.

Inicialmente, para 4 segmentos, as reconstruções feitas a partir das medidas exatas e perturbadas dos detectores podem ser vistas na figura 5.11 a seguir. Tanto a reconstrução com valores exatos quanto com valores perturbados se assemelham à forma do gráfico da fonte original, porém a tabela 5.14 mostra que o erro relativo para a reconstrução é grande. Este é o resultado esperado, pois existem poucas funções-base próximas ao eixo de simetria, local de grande variação da fonte exponencial original.

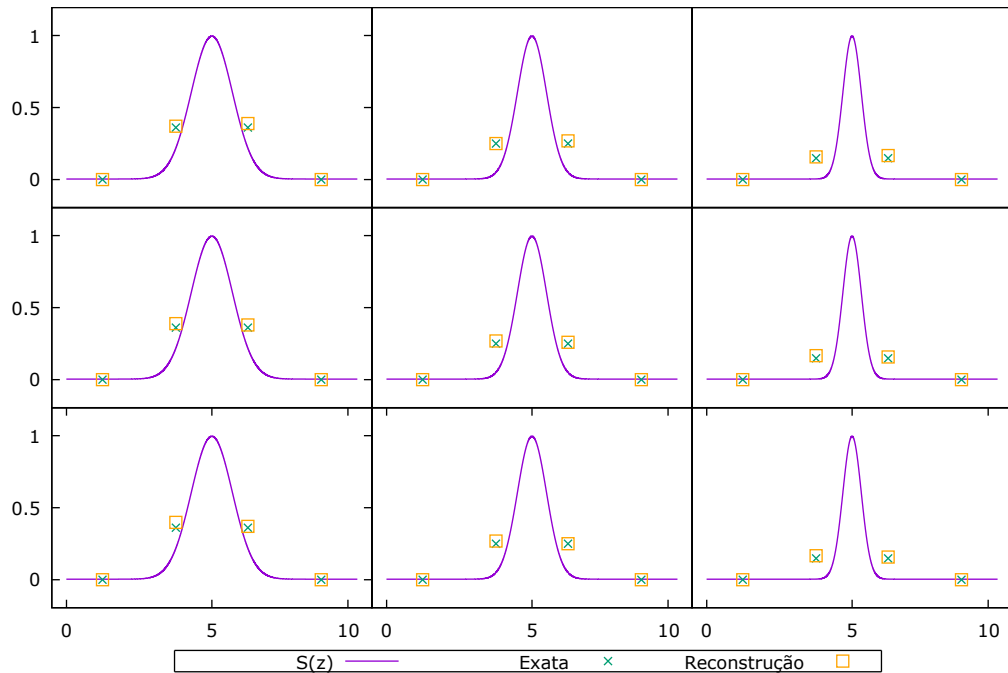


Figura 5.11: Reconstrução da fonte exponencial com 4 segmentos uniformes. A primeira coluna da esquerda contém a reconstrução da fonte com $k = 1$ para três diferentes perturbações das medidas reais. A coluna central e a da direita são análogas, com $k = 2$ e $k = 5$, respectivamente.

Tabela 5.14: Erro relativo da reconstrução da fonte exponencial para a divisão da região em 4 segmentos.

k	1	2	5
Erro [%]	47,42	50,25	50,22

Quando utilizados 16 segmentos, a reconstrução feita por vias das medidas exatas dos detectores se manteve sobre o gráfico da fonte original, conforme mostra a figura 5.12. Por outro lado, a reconstrução feita através de medidas perturbadas sofreu um ligeiro distanciamento da fonte original, principalmente para os casos com $k = 1$ e $k = 2$, onde existem mais funções-base próximas ao eixo de

simetria. Em todos os casos, o erro com a fonte reconstruída se manteve grande, conforme exibido na tabela 5.15.

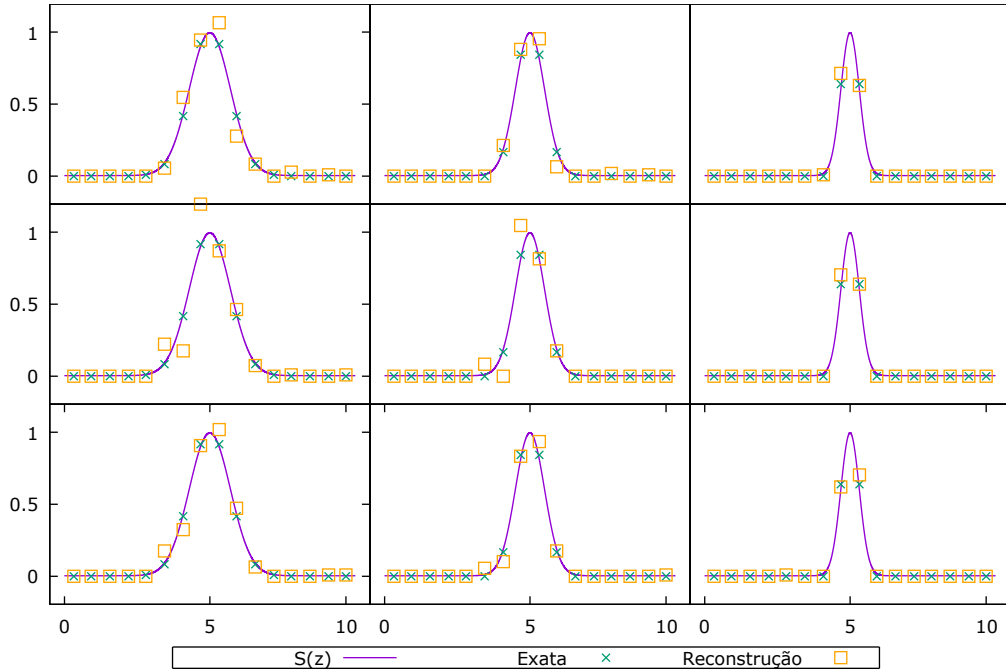


Figura 5.12: Reconstrução da fonte pico com 16 segmentos uniformes. A primeira coluna da esquerda contém a reconstrução da fonte com $k = 1$ para três diferentes perturbações das medidas reais. A coluna central e da direita são análogas, com $k = 2$ e $k = 5$, respectivamente.

Tabela 5.15: Erro relativo para a divisão em 16 segmentos da região.

k	1	2	5
Erro [%]	47,76	46,84	47,63

A fim de se obter valores menores para o erro relativo, a ideia é aumentar o número de funções próximas ao eixo de simetria em $z = 5$. É evidente que esse objetivo pode ser atingido através do aumento do número de segmentos no intervalo $[0,10]$, entretanto tal refinamento é desnecessário em todo o intervalo, em virtude

da fonte original ser bem aproximada por poucas funções-base quando longe do eixo de simetria. Desta forma, a utilização de uma segmentação não uniforme parece ser uma melhor estratégia. É considerado o intervalo $[0,10]$ dividido conforme

$$[0,10] = [0; 3,5] \cup [3,5; 6,5] \cup [6,5; 10], \quad (5.52)$$

onde cada um dos subintervalos descritos pela Eq. (5.52) é segmentado de acordo com a Eq. (5.46), com funções base descritas pela Eq. (5.47). A figura 5.13 a seguir apresenta os resultados obtidos pela reconstrução, onde $[0; 3,5] \cup [6,5; 10]$ é uniformemente dividido em 6 segmentos e $[3,5; 6,5]$ é dividido em 6 ou 15 segmentos. Como anteriormente, é feita a utilização das medidas exatas dos detectores e perturbações de até 10% dessas medidas.

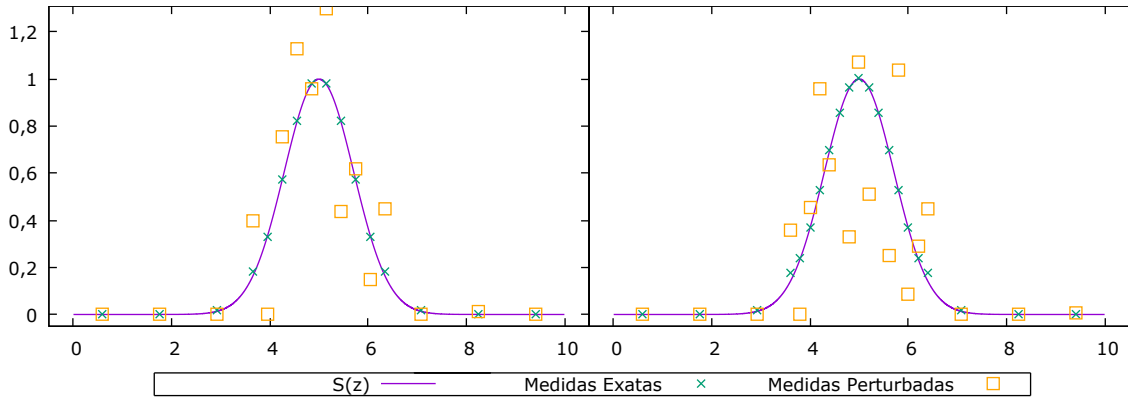


Figura 5.13: Reconstrução da fonte pico para $k = 1$ com 16 e 21 segmentos não uniformes.

A reconstrução feita através das medidas exatas apresentou uma boa aproximação da fonte exata. Todavia, a reconstrução feita com a utilização das medidas perturbadas não foi fiel à fonte exata, apresentando comportamento oscilatório nas proximidades do eixo de simetria do gráfico da fonte. Essa é de fato uma característica comum aos problemas inversos, cuja classe de problemas é, em geral, composta por problemas mal postos [48, 60]: as soluções, quando existentes, não são necessariamente únicas e muitas vezes apresentam grande sensibilidade a

pequenas perturbações dos dados. Em geral, podem haver infinitas soluções para um problema de mínimos quadrados, principalmente na presença de perturbações nos dados, situação em que podem haver diversas soluções tais que o resíduo $\|\mathbf{r}_m - \mathbf{A}\mathbf{s}\|_2$ seja suficientemente pequeno [5].

5.2.3 Regularização de Tikhonov

Com intuito de obter-se um problema melhor condicionado e de se escolher boas soluções para o problema de minimização, é introduzida a clássica regularização de Tikhonov [5, 48, 60] através da alteração do funcional custo dado pela Eq. (5.34)

$$f_\alpha(\mathbf{s}) = \|\mathbf{r}' - \mathbf{A}\mathbf{s}\|_2^2 + \alpha^2 \|\mathbf{T}\mathbf{s}\|_2^2, \quad (5.53)$$

onde α é o parâmetro de regularização e $T \in \mathbb{R}^{Q \times B}$, $Q \geq 1$ inteiro arbitrário, é a matriz de Tikhonov, a qual representa alguma medida de \mathbf{s} a ser definida. É observado que a Eq. (5.34) é recuperada ao fazer-se $\alpha = 0$ na Eq. (5.53). Além disso, não é necessária a alteração do método utilizado para o processo de minimização, uma vez que a Eq. (5.53) é equivalente a

$$f_\alpha(\mathbf{s}) = \left\| \begin{pmatrix} \mathbf{r}' \\ \mathbf{0} \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} \mathbf{A} \\ \alpha \mathbf{T} \end{pmatrix} \mathbf{s} \right\|_2^2 \quad (5.54)$$

para $\alpha > 0$. Entre os exemplos mais comuns de matriz de Tikhonov, estão $T_0 \in \mathbb{R}^{B \times B}$, $T_1 \in \mathbb{R}^{(B-1) \times B}$ e $T_2 \in \mathbb{R}^{(B-2) \times B}$ [5], definidas por $T_0 = I$, a matriz identidade do \mathbb{R}^P ,

$$T_1 = \begin{pmatrix} 1 & -1 & & \\ & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & -1 \end{pmatrix}, \text{ e } T_2 = \begin{pmatrix} 1 & -2 & 1 & & \\ & \ddots & \ddots & \ddots & \\ & & 1 & -2 & 1 \end{pmatrix}, \quad (5.55)$$

entre outros. O processo de minimização com a matriz de Tikhonov T_0 visa obter a solução \mathbf{s} de menor norma. As demais, T_1 e T_2 , são baseadas, a menos de uma constante multiplicativa, em diferenças finitas e visam minimizar $\sum_{j=1}^{P-1} (s_j - s_{j+1})^2$

e $\sum_{j=1}^{P-2} (s_j - 2s_{j+1} + s_{j+2})^2$, respectivamente. A figura 5.14 a seguir apresenta os resultados obtidos com a utilização da matriz de Tikhonov T_0 .

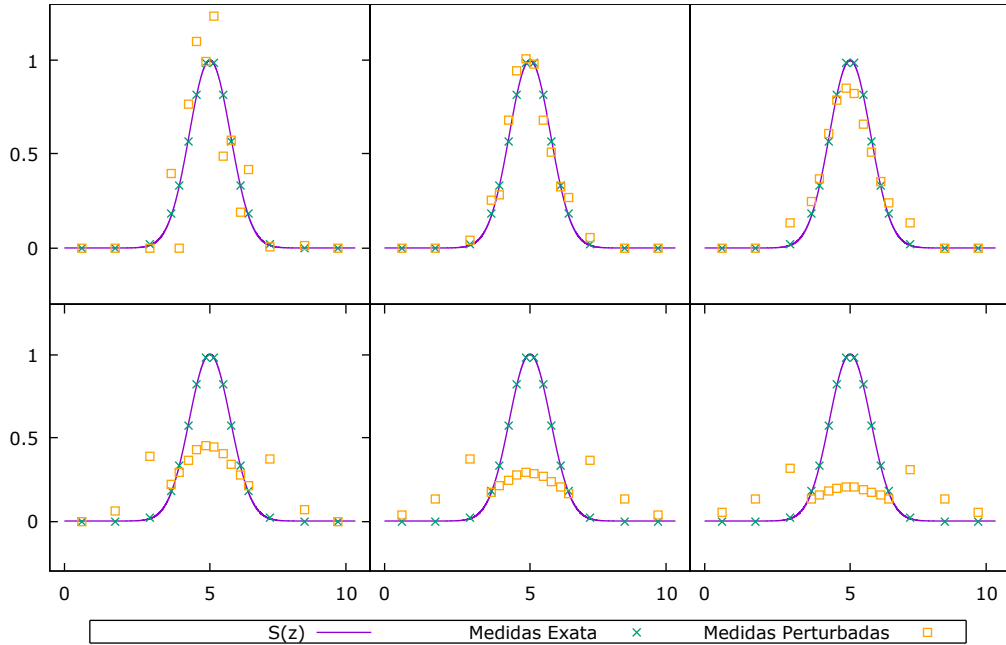


Figura 5.14: Reconstruções da fonte pico com $k = 1$, para 16 segmentos não uniformes e regularização T_0 com $\alpha = 0,01; 0,05; 0,1; 0,3; 0,5; 0,7$, ordenadas da esquerda para a direita, de cima para baixo.

A figura 5.14 indica melhora nos resultados previamente exibidos na figura 5.13 para a reconstrução feita com base nas medidas perturbadas quando utilizados $\alpha = 0,05$ e $\alpha = 0,1$ como parâmetro de regularização. Para os demais valores de α , a regularização penalizou muito a solução, gerando reconstruções não condizentes com a fonte exata. A tabela 5.16 a seguir apresenta os valores obtidos para o erro relativo nos casos onde $\alpha = 0,05$ e $\alpha = 0,1$.

Tabela 5.16: Erro relativo para a reconstrução com matriz de Tikhonov T_0 .

α	0,05	0,1
Erro [%]	5,07	6,30

De acordo com a tabela 5.16, a utilização de 16 segmentos não uniformes aliada à regularização de Tikhonov T_0 foi capaz de reduzir o erro obtido com a reconstrução para 5,07%, com a utilização de $\alpha = 0,05$ como parâmetro de regularização. Esse resultado é muito melhor do que aquele apresentado na tabela 5.15, para o qual o erro relativo foi de 47,76%. A figura 5.15 a seguir apresenta os resultados obtidos com a regularização T_1 .

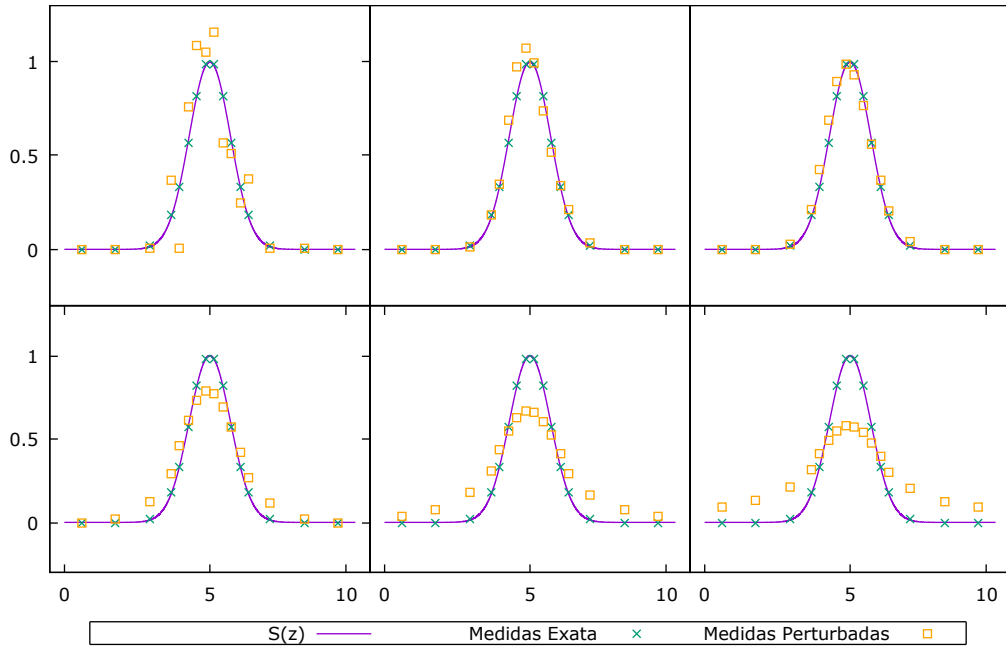


Figura 5.15: Reconstruções da fonte pico com $k = 1$, para 16 segmentos não uniformes e regularização T_1 com $\alpha = 0,01; 0,05; 0,1; 0,3; 0,5; 0,7$, ordenadas da esquerda para a direita, de cima para baixo.

A utilização da matriz de Tikhonov T_1 apresentou bons resultados para a reconstrução. Da mesma forma como na figura 5.14, as escolhas de $\alpha = 0,05$ e $\alpha = 0,1$ como parâmetro de regularização apresentaram as reconstruções mais fiéis à fonte exata. A tabela 5.17 a seguir mostra os erros obtidos para estes valores de α .

Tabela 5.17: Erro relativo para a reconstrução com matriz de Tikhonov T_1 .

α	0,05	0,1
Erro [%]	5,63	5,48

A tabela 5.17 mostra que o erro relativo da reconstrução com respeito à fonte original foi baixo, embora superior ao da tabela 5.16 com $\alpha = 0,05$. Para o mesmo problema, também é utilizada a matriz de Tikhonov T_2 . A figura 5.16 a seguir mostra os resultados obtidos.

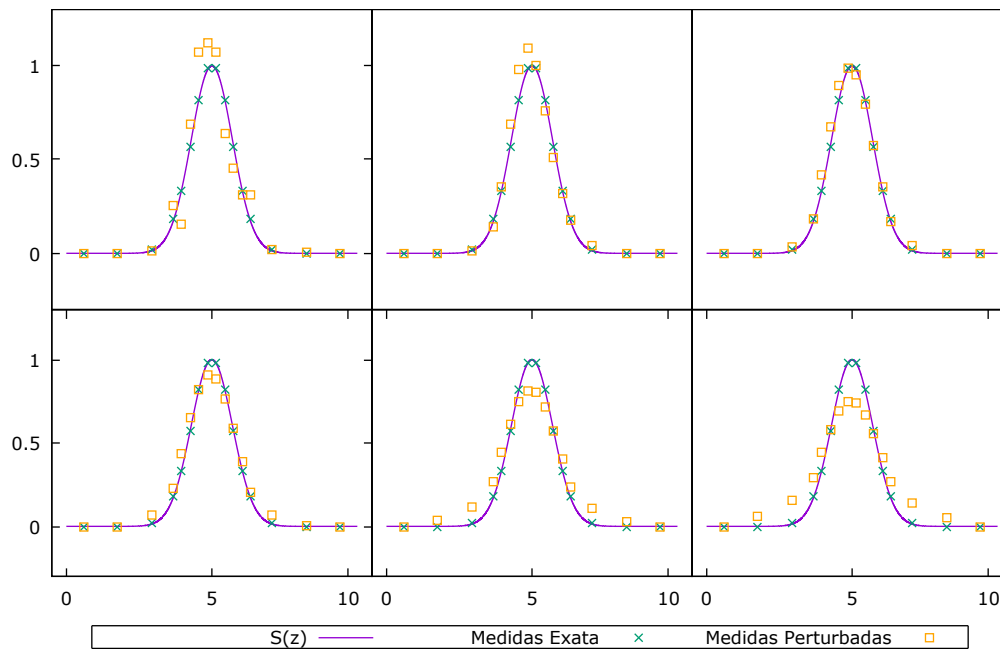


Figura 5.16: Reconstruções da fonte pico com $k = 1$, para 16 segmentos não uniformes e regularização T_2 com $\alpha = 0,01; 0,05; 0,15; 0,3; 0,5; 0,7$, ordenadas da esquerda para a direita, de cima para baixo.

Com a utilização da matriz T_2 para a regularização, os casos onde $\alpha = 0,15$ e $\alpha = 0,3$ foram os que se mostraram mais fiéis à fonte exata. A tabela 5.18 sumariza o erro relativo obtido.

Tabela 5.18: Erro relativo para a reconstrução com matriz de Tikhonov T_2 .

α	0,05	0,1
Erro [%]	5,55	5,96

Outra vez, foram obtidos bons resultados para o erro relativo, embora não tão bons quanto o caso $\alpha = 0,05$ da regularização com a matriz de Tikhonov T_0 .

O problema fonte-detector, discutido na seção 5.1, permitiu caracterizar o problema inverso de reconstrução da fonte isotrópica em meio conhecido como um problema de minimização matricial. Foram facilmente obtidos bons resultados para a reconstrução de fontes simples: constantes e polinomiais. Entretanto, para fontes ligeiramente mais complexas, como a exponencial definida pela Eq. (5.51), foi necessário a aplicação da estratégia de regularização de Tikhonov para a obtenção de resultados satisfatórios. Em adição, uma escolha adequada para as funções-base e, por conseguinte, a partição do intervalo, é fundamental para a resolução do problema, deixando ainda em aberto o uso de aproximações via funções não constantes e estratégias adaptativas para a escolha da segmentação.

6 CONCLUSÕES

Neste trabalho, o formalismo de ordenadas discretas proposto pelo método ADO foi pela primeira vez desenvolvido e aplicado com sucesso para resolver a equação adjunta de transporte monoenergética, em geometria plana infinita, considerando meios de material heterogêneo, espalhamento anisotrópico de grau arbitrário e condições de contorno gerais. Em particular, para o problema com espalhamento isotrópico, foi também derivada uma solução explícita para as autofunções. Além disso, foi apresentada uma solução particular para fontes gerais em termos da função de Green em meio infinito. Soluções conhecidas da equação de transporte e resultados presentes na literatura foram utilizados através do problema fonte-detector para verificação das soluções obtidas com o método ADO para a equação adjunta. De maneira geral, o método ADO para a equação adjunta se mostrou rápido, de fácil implementação e preciso, sendo capaz de reproduzir os resultados de Militão *et al.* [45] com a utilização de um menor número de nós nas regras de quadratura, atrativos importantes para futuras aplicações do método em dimensão espacial superior, um tópico a ser abordado em trabalhos futuros. Em adição, a formulação obtida sugere que a solução ADO para a equação de transporte multigrupo pode ser de auxílio na derivação da equação adjunta de transporte dependente da energia. Através da formulação ADO obtida e da estratégia de regularização de Tikhonov, foi possível a resolução bem sucedida de problemas inversos em reconstrução de fontes isotrópicas para problemas de geometria e materiais conhecidos, permanecendo ainda em aberto a utilização de heurísticas para a escolha de parâmetros de regularização mais adequados, assim como a utilização de outras técnicas de regularização.

REFERÊNCIAS

- [1] ABRAMOWITZ, M., AND STEGUN, I. *Handbook of Mathematical Functions With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*, 3rd ed. United States Department of Commerce, US, 1972.
- [2] ANDERSON, E., BAI, Z., BISCHOF, C., BLACKFORD, S., DEMMEL, J., DONGARRA, J., DU CROZ, J., GREENBAUM, A., HAMMARLING, S., MCKENNEY, A., AND SORENSEN, D. *LAPACK Users' Guide*, third ed. Society for Industrial and Applied Mathematics, Philadelphia, PA, 1999.
- [3] ANIKONOV, D., KOVTANYUK, A., AND PROKHOROV, I. *Transport Equation and Tomography*. VSP, AH Zeist, The Netherlands, 2002.
- [4] ARRIDGE, S. Optical tomography in medical imaging. *Inverse Problems* 15 (1998), R41–R93.
- [5] ASTER, R., BORCHERS, B., AND THURBER, C. *Parameter Estimation and Inverse Problems*. Elsevier, 2013.
- [6] AZMY, Y., AND SARTORI, E. *Nuclear Computational Science: A Century in Review*. Springer, 2010.
- [7] BADRUZZAMAN, A. Computational methods in nuclear geophysics. *Progress in Nuclear Energy* 25 (1991), 265–290.
- [8] BARICHELLO, L. *Explicit Formulations for Inverse Radiative Problems*. CRC Press, 2011.
- [9] BARICHELLO, L., GARCIA, R., AND SIEWERT, C. Particular solutions for the discrete-ordinates method. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* 64 (2000), 219–226.

- [10] BARICHELLO, L., AND SIEWERT, C. A discrete-ordinates solution for a non-grey model with complete frequency redistribution. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* 62 (1999), 665–675.
- [11] BARICHELLO, L., AND SIEWERT, C. A discrete-ordinates solution for a polarization model with complete frequency redistribution. *The Astrophysical Journal* 513 (1999), 370–382.
- [12] BARICHELLO, L., AND SIEWERT, C. A new version of the discrete-ordinates method. *Proceedings of the 2nd International Conference on Computational Heat and Mass Transfer* (2001), 340–347.
- [13] BARROS, R., AND LARSEN, E. A numerical method for one-group slab-geometry discrete ordinates problems with no spatial truncation error. *Nuclear Science and Engineering* 104 (1999), 199–208.
- [14] BELL, G., AND GLASSTONE, S. *Nuclear reactor theory*. Robert E. Krieger Publishing Company, New York, 1979.
- [15] BENASSI, M., COTTA, R., AND SIEWERT, C. The p_n method for radiative transfer problems with reflective boundary conditions. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* 30, 6 (1983), 547–553.
- [16] BLEDSOE, K., AND FAVORITE, J. Using the levenberg-marquardt method for the solution of inverse transport problems with scattering. *Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computation and Supercomputing in Nuclear Applications (M&C + SNA 2007)* (2007).
- [17] BOLTZMANN, L. Weitere studien über das wärmeleichgewicht unter gas molekülen. *Sitzungsberichte Akademie der Wissenschaften*, 60:275376 (1872).
- [18] BURDEN, R., AND J.D., F. *Numerical Analysis*. CENGAGE, 2010.

- [19] CACUCI, D. *Handbook of Nuclear Engineering: Vol. 1: Nuclear Engineering Fundamentals*. Handbook of Nuclear Engineering. Springer, 2010.
- [20] CASE, K., AND ZWEIFEL, P. *Linear Transport Theory*. Addison-Wesley Publishing Company, 1967.
- [21] CHANDRASEKHAR, S. *Radiative Transfer*. Oxford University Press, 1950.
- [22] CHOULLI, M., AND STEFANOV, O. Inverse scattering and inverse boundary problems for the linear boltzmann equation. *Comm. P.D.E.* 21 (1996), 763–785.
- [23] CHOULLI, M., AND STEFANOV, O. An inverse boundary value problem for the stationary transport equation. *Osaka J. Math.* 36 (1998), 87–104.
- [24] COURANT, R. *Differential and Integral Calculus*, vol. 2. Wiley, 1992.
- [25] COURANT, R. *Differential and Integral Calculus*, vol. 1. Wiley, 1992.
- [26] DORN, O. A transport-backtransport method for optical tomography. *Inverse Problems* 14 (1998), 1107–1130.
- [27] DORN, O. Scattering and absorption transport sensitivity functions for optical tomography. *Opt Express* 7 (2000), 492–506.
- [28] DUDERSTADT, J., AND HAMILTON, L. *Nuclear Reactor Analysis*. Wiley, 1976.
- [29] FAVORITE, J., AND SANCHEZ, R. An inverse method for radiation transport. *Radiation Protection Dosimetry* 116 (2005), 482–485.
- [30] GAO, H., AND ZHAO, H. Multilevel bioluminescence tomography based on radiative transfer equation part 1: l1 regularization. *Phys. Med. Biol.* 18 (2010), 1854–1871.

- [31] GAO, H., AND ZHAO, H. Radiative transport-based frequency-domain fluorescent tomography. *Phys. Med. Biol.* 18 (2010), 2894–2912.
- [32] GARCIA, R., AND SIEWERT, C. Palo alto scientific report no g320-3438. *Palo Alto, California* (1982).
- [33] GOLUB, G., AND VAN LOAN, C. *Matrix Computations*, 4th ed. John Hopkins University Press, Baltimore, USA, 2013.
- [34] HUSSEIN, E. *Computed Radiation Imaging*. Elsevier, 2011.
- [35] HYKES, J., AND AZMY, Y. Radiation source reconstruction with known geometry and materials using the adjoint. *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering* (2011).
- [36] JOSHI, A., RASMUSSEN, J., SEVICK-MURACA, E., WAREING, T., AND MCGHEE, J. Radiative transport-based frequency-domain fluorescent tomography. *Phys. Med. Biol.* 53 (2008), 2069–2088.
- [37] KLOSE, A., AND HEILSCHER, A. Optical tomography using the time-independent equation of radiative transfer - part 2: inverse model. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* 72 (2002), 715–732.
- [38] KLOSE, A., AND HEILSCHER, A. Optical tomography with the equation of radiative transfer. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow* 18 (2007), 443–464.
- [39] KLOSE, A., NETZ, U., BEUTHAN, J., AND HEILSCHER, A. Optical tomography using the time- independent equation of radiative transfer - part 1: forward model. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer* 72 (2002), 691–713.
- [40] KNOLL, G. F. *Radiation Detection and Measurement*, 4th ed. Wiley, New York, USA, 2010.

- [41] LAMARSH, J., AND BARATTA, A. *Introduction to Nuclear Engineering*, 3rd ed. Prentice Hall, 2001.
- [42] LAWSON, C., AND HANSON, R. *Solving Least Squares Problems*, 1st ed. SIAM, Philadelphia, 1995.
- [43] LEWIS, E., AND MILLER, W. *Computational Methods of Neutron Transport*. John Wiley & Sons, New York, 1984.
- [44] MCLAUGHLIN, T. D., SJODEN, G. E., AND MANALO, K. L. Detector placement optimization for cargo containers using deterministic adjoint transport examination for snm detection. *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2011) 5* (2011), 8–12.
- [45] MILITÃO, D., ALVES FILHO, H., AND BARROS, R. A numerical method for monoenergetic slab-geometry fixed-source adjoint transport problems in the discrete ordinates formulation with no spatial truncation error. *Int. J. Nuclear Energy Science and Technology 7* (2012), 151–165.
- [46] MILLER, K., AND CHARLTON, W. An inverse transport approach to radiation source location for border security. *Annual Meeting of the European Safeguards Research and Development Association, Aix-en-Provence, France* (2007).
- [47] MODEST, M. *Radiative Heat Transfer*. Academic Press, 2013.
- [48] MOURA NETO, F., AND SILVA NETO, A. *An Introduction to Inverse Problems with Applications*. Springer, 2013.
- [49] NORTON, S. A general nonlinear inverse transport algorithm using forward and adjoint flux computations. *IEEE Transactions on Nuclear Science 44* (1997), 153–162.

- [50] ÖZISIK, M., AND ORLANDE, H. *Inverse Heat Transfer*. Taylor & Francis, 2000.
- [51] PAZINATTO, C., CROMIANSKI, S., BARROS, R., AND BARICHELLO, L. An analytical discrete ordinates solution for one-speed slab geometry adjoint transport problems with isotropic scattering. *ANS MC2015 - Joint International Conference on Mathematics and Computation (M&C), Supercomputing in Nuclear Applications (SNA) and the Monte Carlo (MC) Method* (2015).
- [52] PROLO FILHO, J. A equação de boltzmann e a modelagem de fluidos em micro e macroescalas. *Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-graduação em Matemática Aplicada* (2007).
- [53] REICHERT, J. Abordagens analíticas para problemas de transporte de radiação com dependência espectral. *Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica* (2009).
- [54] ROLCI, C., MOTTA, C., AND ROBERTY, N. Stability estimates for an inverse problem for the linear boltzmann equation. *Rev. Mat. Complut* 19 (2006), 113–132.
- [55] SCHEBEN, F. Iterative methods for criticality computations in neutron transport theory. *University of Bath* (2011).
- [56] SCHERER, C., PROLO FILHO, J., AND BARICHELLO, L. An analytical approach to the unified solution of kinetic equations in rarefied gas dynamics. i. flow problems. *Z. angew. Math. Phys.* 60 (2009), 70–115.
- [57] SCHULZ, D. Métodos analíticos e computacionais em geofísica nuclear. *Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-graduação em Matemática Aplicada* (2014).

- [58] STROBL, M., MANKE, I., KARDJILOV, N., HILGER, A., DAWSON, M., AND BANHART, J. Advances in neutron radiography and tomography. *J. Phys. D: Appl. Phys.* 42 (2009).
- [59] TRES, A., PICOLOTO, C., CUNHA, R., AND BARICHELLO, L. Explicit formulation of a nodal transport method for discrete ordinates calculations in two-dimensional fixed-source problems. *Kerntechnik (1987) 79* (2014), 155–162.
- [60] VOGEL, C. *Computational Methods for Inverse Problems*. SIAM, 2002.
- [61] VOLEGOV, P., DANLY, C., FITTINGHOFF, D., GRIM, G., GULER, N., IZUMI, N., MA, T., MERRILL, F., WARRICK, A., WILDE, C., AND WILSON, D. Neutron source reconstruction from pinhole imaging at national ignition facility. *Review of Scientific Instruments* 85 (2014).
- [62] WOOD, J. *Computational Methods in Reactor Shielding*. Pergamon Press, 1982.