

MINISTÉRIO DA EDUCAÇÃO
UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

FORMULAÇÃO ANALÍTICA PARA SOLUÇÃO DO PROBLEMA
DE ORDENADA DISCRETA UNIDIMENSIONAL

por

Liliane Basso Barichello

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre

1992

FORMULAÇÃO ANALÍTICA PARA SOLUÇÃO DO PROBLEMA
DE ORDENADA DISCRETA UNIDIMENSIONAL

por

Liliane Basso Barichello

Mestre em Matemática

Tese submetida ao Corpo Docente do Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica, PROMEC, da Escola de Engenharia da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como parte dos requisitos necessários para a obtenção do Título de

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Aprovado por:

Prof. Dr. Marco Tullio M. B. de Vilhena (Orientador)

Prof. Dr. Julio Ruiz Claeysen

Prof. Dr. Alwin Wilhelm Elbern

Prof. Dr. Cláudio de Oliveira Graça

Prof. Dr. Roberto D. Martinez Garcia

Prof. Dr. Sergio Viçosa Möller

Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 01 de setembro de 1992

Aos meus pais ,
aos meus irmãos
e ao Fernando .

"Tempo virá em que uma pesquisa diligente e continuada esclarecerá aspectos que agora permanecem escondidos. O espaço de tempo de uma vida, mesmo inteiramente devotada ao estudo, não seria suficiente para investigar um objetivo tão vasto...; este conhecimento será conseguido somente através de gerações sucessivas. Tempo virá em que nossos descendentes ficarão admirados de que não soubéssemos particularidades tão óbvias a eles... Muitas descobertas estarão reservadas para os que virão, quando a lembrança de nós estiver apagada. O nosso Universo será um assunto sem importância, a menos que haja alguma coisa nele a ser investigada a cada geração... A natureza não revela seus mistérios de uma só vez."

Sêneca

AGRADECIMENTOS

Agradeço, de forma especial, ao Prof. Dr. Marco Túllio de Vilhena, não só pela oportunidade de compartilhar da sua competência e experiência profissional, mas pelo grande incentivador e amigo que sempre tem sido.

Ao Prof. Dr. Julio R. Claeysen pelo apoio e amizade.

Ao Prof. Dr. Alwin Elbern pelo estímulo na realização deste trabalho.

Ao Eng. Fernando Luís Treis pela colaboração na elaboração dos slides de apresentação e ao Prof. Dr. Arno Krezinger pela parte fotográfica.

Ao aluno Nei Rodrigues de Freitas pelo valioso auxílio na datilografia deste trabalho, bem como pela participação como bolsista de iniciação científica.

Aos colegas Edson, Sílvio, Elaine e Sandi pela disponibilidade e colaboração nas discussões pertinentes ao trabalho.

Aos colegas Zabadal, Sérgio e Clarissa pelo apoio no início do curso, bem como ao Rubem, Egon, Tiarajú, Izete, Adriano e demais colegas do PROMEC pelo carinho e amizade.

Ao Prof. Volnei e demais professores do DENUC.

À bibliotecária Juliana Bonilha.

As amigas Maristéla e Márcia.

À Ivone e Zoraydes pela atenção sempre dedicada.

A todos os familiares e amigos que sempre torceram pelo sucesso na realização deste trabalho.

À Universidade Federal de Santa Maria.

Aos meus pais, Irineu e Eny, por tudo... desde o princípio!

RESUMO

Neste trabalho é apresentada uma solução analítica para o problema de ordenada discreta unidimensional e multigrupo de transporte de neutrons em simetria planar. A idéia básica da formulação proposta consiste na aplicação da transformada de Laplace na equação de ordenada discreta. Para a solução do sistema linear resultante, uma solução explícita para a matriz inversa é estabelecida. Dessa forma, o fluxo angular é obtido, por inversão analítica, em termos do fluxo angular em $x=0$. Essa formulação é aplicada a problemas de domínio finito e semi-infinito. No primeiro caso, os valores de fluxo angular desconhecidos na fronteira em $x=0$, são determinados a partir dos valores conhecidos do fluxo angular em $x=a$; no segundo caso é usada a condição de que o fluxo angular é limitado no infinito. Foram tratados problemas homogêneos e heterogêneos, para a placa plana com um grupo de neutrons e multigrupo. O problema inverso, que consiste na determinação do fluxo incidente na fronteira a partir de valores do fluxo escalar no interior do domínio, também foi resolvido. Os resultados obtidos para os problemas acima descritos, apresentaram uma boa comparação com os resultados disponíveis na literatura.

ABSTRACT

In this work, an analytical solution to the multigroup slab-geometry discrete ordinate equation is presented. The main feature of this method consists in the application of the Laplace transform to the discrete ordinate equation which yields to a linear system to be solved. This system is analytically solved and the inversion is performed using the Heaviside expansion technique. The general formulation, achieved by this procedure, is then applied to the one-group and multigroup, homogeneous and heterogeneous, slab geometries problems. Numerical comparisons with available results are presented.

LISTA DE SÍMBOLOS

$A_N(s)$	Matriz do sistema gerado pela formulação LTS_N - um grupo de energia.
$A_N^{-1}(s)$	Matriz inversa da matriz $A_N(s)$
$A_{GN}(s)$	Matriz do sistema gerado pela formulação LTS_N - multigrupo
$A_{GN}^{-1}(s)$	Matriz inversa da matriz $A_{GN}(s)$
$A_{i,j}$	Elementos da matriz dos cofatores de $A_N(s)$
$A_{i,j}^G$	Elementos da matriz dos cofatores de $A_{GN}(s)$
A_k, P_k	Pesos e nós para inversão numérica da transformada de Laplace por quadratura de Gauss
a, a_1, a_2	Espessuras da placa (cm)
A^*	Coeficiente de Albedo
c	Número médio de neutrons secundários emitidos por colisão
$\det A_N(s)$	Determinante da matriz $A_N(s)$
$\det A_{GN}(s)$	Determinante da matriz $A_{GN}(s)$
$\delta_{i,j}$	Delta de Kroenecker
f_m	Fluxo angular de neutrons incidente na fronteira $x=0$ da placa, na direção μ_m
\vec{f}	Vetor dos termos independentes do sistema LTS_N
F	Vetor dos fluxos angulares em $x=0$, nas direções μ_m
F_j	Vetor dos fluxos angulares em $x=0$, nas direções μ_m , na região j
F_g	Vetor do fluxo angular incidente na fronteira $x=0$ para o grupo g
$f(\mu_m)$	Vetor do fluxo angular incidente em $x=0$, na direção μ_m , para dois grupos

\mathcal{G}_m	Fluxo angular de neutrons incidente na fronteira $x=a$ da placa , na direção μ_m .
$\mathcal{G}(\mu)$	Vetor do fluxo angular incidente na fronteira $x=a$ para o caso de multigrupo
G	Número de grupos considerados para o caso de multigrupo
$H(\mu)$	Função H de Chandrasekhar
L	Operador íntegro-diferencial associado à equação de transporte de neutrons unidimensional
M	Número de regiões consideradas no problema heterogêneo
M_1	Número de pontos de quadratura para inversão numérica da transformada de Laplace
N	Número de pontos de quadratura de Gauss para o cálculo da integral da equação de transporte de neutrons unidimensional
NR	Número de regiões consideradas em uma placa
$Q(x)$	Termo de fonte
Q	Vetor dos termos de fonte
$\bar{q}_m(s)$	Transformada de Laplace da função $q_m(x)$
s	Parâmetro complexo
s_k	Raízes do polinômio determinante
v	Função teste usada na formulação variacional
x	Variável espacial na geometria da placa
α_k	Coefficiente Da formulação analítica de $\psi_m(x)$
$\alpha_k^{(j)}$	Coefficiente da formulação analítica de $\psi_m(x)$ para a região j
$\psi(x, \mu)$	Fluxo angular de neutrons
$\psi_m(x)$	Fluxo angular de neutrons na direção μ_m
$\psi_{j m}(x)$	Fluxo angular de neutrons na direção μ_m , na região j
$\psi_g(x, \mu_m)$	Fluxo angular de neutrons na direção μ_m no grupo g

$\psi_g^j(x, \mu_m)$	Fluxo angular de neutrons na direção μ_m , no grupo g , no meio j
$\bar{\psi}_m(s)$	Transformada de Laplace da função $\psi_m(x)$
$\bar{\Psi}_m(s)$	Vetor dos fluxos angulares transformados
Ψ	Vetor dos fluxos angulares para multigrupo
$\phi(x)$	Fluxo escalar de neutrons
\mathcal{L}^{-1}	Transformada inversa de Laplace
μ	Direção do neutron espalhado
μ'	Direção do neutron incidente
μ_k	Raízes do Polinômio de Legendre de N-ésimo grau, usadas para cálculo da integral por quadratura de Gauss
σ_T	Seção de choque total
σ_{s0}	Seção de choque diferencial de espalhamento de ordem zero (cm^{-1})
σ_{s1}	Seção de choque diferencial de espalhamento de primeira ordem (cm^{-1})
$\sigma_s(\mu' \rightarrow \mu)$	Seção de choque diferencial de espalhamento
σ_g	Seção de choque total no grupo g
σ_{gj}	Seção de choque de espalhamento do grupo g para o grupo j
Σ	Matriz diagonal das seções de choque total por grupo
Σ_s	Matriz das seções de choque de espalhamento - multigrupo
$*$	Convolução

LISTA DE TABELAS

3.1.1	Placa homogênea: comparação numérica dos métodos SGF S_2 e LTS_2	21
3.1.2	Placa homogênea: comparação numérica dos métodos SGF S_4 e LTS_4	21
3.1.3	Placa homogênea: comparação numérica dos métodos SGF S_8 e LTS_8	21
3.2.1	Problema heterogêneo : espessura e parâmetros de cada região	26
3.2.2	Placa heterogênea : comparação numérica dos métodos SGF S_2 e LTS_2	27
3.2.3	Placa heterogênea : comparação numérica dos métodos SGF S_4 e LTS_4	27
3.2.4	Placa heterogênea : comparação numérica dos métodos SGF S_2 e LTS_2	27
3.3.1	Problema do Albedo: comparação numérica entre as aproximações F_0 , LTS_2 e solução exata	32
3.3.2	Problema do Albedo: comparação numérica entre as aproximações F_2 , LTS_4 e solução exata	32
3.3.3	Problema do Albedo: comparação numérica entre as aproximações F_3 , LTS_8 e solução exata	33
3.3.4	Albedo - LTS_4 : interpolação linear e quadrática	34
3.3.5	Comparação numérica entre duas formas de cálculo do albedo na aproximação LTS_2	35
3.3.6	Comparação numérica entre duas formas de cálculo do albedo na aproximação LTS_4	35
3.3.7	Comparação numérica entre duas formas de cálculo do albedo na aproximação LTS_8	36

3.3.8	Problema do albedo: comparação numérica entre as aproximações F_3 , LTS_2^* e solução exata	37
3.3.9	Problema do albedo: comparação numérica entre as aproximações F_4 , LTS_4^* e solução exata	38
3.3.10	Problema do albedo: comparação numérica entre as aproximações F_5 , LTS_8^* e solução exata	38
3.4.1	Resultados do problema inverso - LTS_2 considerando fluxo escalar conhecido nos pontos $x=5, 10$ (cm)	41
3.4.2	Resultados do problema inverso - LTS_2 considerando fluxo escalar conhecido nos pontos $x=50, 70$ (cm)	41
3.4.3	Resultados do problema inverso - LTS_4 considerando fluxo escalar conhecido nos pontos $x=2, 4, 6$ e 8 (cm)	42
3.4.4	Resultados do problema inverso - LTS_4 considerando fluxo escalar conhecido nos pontos $x=12, 14, 16$ e 18 (cm)	43
3.4.5	Resultados do problema inverso - LTS_4 considerando fluxo escalar conhecido nos pontos $x=2, 4, 96$ e 98 (cm)	43
3.4.6	Resultados do problema inverso - LTS_4 considerando fluxo escalar conhecido nos pontos $x=22, 24, 26$ e 28 (cm)	44
3.4.7	Resultados do problema inverso - LTS_8 considerando fluxo escalar conhecido nos pontos $x=1, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 4, 4.5$ (cm)	45
3.4.8	Resultados do problema inverso - LTS_8 considerando fluxo escalar conhecido nos pontos	

	x=1, 2, 3, 4, 96, 97, 98 e 99 (cm)	46
3.4.9	Resultados do problema inverso - LTS_8 considerando fluxo escalar conhecido nos pontos x=6, 6.5, 7, 7.5, 8, 8.5, 9 e 9.5 (cm)	47
5.2.1	Problema de dois meios a dois grupos: seções de choque para cada meio	66
5.2.2	Problema de dois meios: fluxo escalar do grupo 1 - aproximação LTS_2 - caso 1	67
5.2.3	Problema de dois meios: fluxo escalar do grupo 1 - aproximação LTS_2 - caso 2	68
5.2.4	Problema de dois meios: fluxo escalar do grupo 1 - aproximação LTS_4 - caso 1	69
5.2.5	Problema de dois meios: fluxo escalar do grupo 1 - aproximação LTS_4 - caso 2	70
5.2.6	Problema de dois meios: fluxo escalar do grupo 1 - aproximação LTS_8 - caso 1	71
5.2.7	Problema de dois meios: fluxo escalar do grupo 1 - aproximação LTS_8 - caso 2	72
A1.1	LTS_2 com inversão numérica: comparação com $SGFS_2$	80

LISTA DE FIGURAS

3.1	Problema heterogêneo: Placa de espessura a dividida em M regiões	24
-----	---	----

SUMÁRIO

RESUMO	iii
ABSTRACT	iv
LISTA DE SÍMBOLOS	v
LISTA DE TABELAS	viii
LISTA DE FIGURAS	xi
1. INTRODUÇÃO	01
2. O MÉTODO LTS_N PARA UM GRUPO	06
2.1 Introdução	06
2.2 Inversão da matriz $A_N(s)$	10
2.3 A formulação LTS_N	16
3. APLICAÇÃO A PROBLEMAS DE UM GRUPO	20
3.1 O Método LTS_N para problemas homogêneo	20
3.2 O Método LTS_N para problemas heterogêneos	23
3.3 O problema do Albedo	28
3.4 O problema Inverso	39
4. O MÉTODO LTS_N PARA MULTIGRUPO	48
4.1 Introdução	48
4.2 Inverso da matriz $A_{GN}(s)$	53
4.3 A formulação LTS_N para multigrupo	57
5. APLICAÇÃO A PROBLEMAS DE DOIS GRUPOS DE ENERGIA	61
5.1 Procedimento	61
5.2 Resultados	65
6. CONCLUSÃO	73
7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	75
APÊNDICE A1 : LTS_N com Inversão Numérica	79

1. INTRODUÇÃO

A principal característica dos problemas de ordenada discreta de transporte de neutrons, consiste na discretização da variável angular. Esse tipo de abordagem foi inicialmente desenvolvida para o estudo de problemas relacionados com atmosferas estelares [7]. Desde então, o método tem sido extensivamente usado em vários outros problemas, como : problemas de blindagem, onde a penetração de radiação pode ser profunda; em análise de reatores, para geração de parâmetros para modelos de projetos; em problemas de transporte de partículas carregadas, em problemas de transporte de fótons-elétrons acoplados e nas mais diversas áreas nas quais a equação de transporte é aplicável [3] .

O tratamento para um problema desse tipo, nos códigos de ordenada discreta mais comumente usados, é baseado na discretização do termo integral na equação de transporte por fórmulas de quadratura (Gauss), a energia é tratada pelo modelo de multigrupo e as variáveis espaciais são aproximadas por esquemas de diferenças finitas. Nos últimos anos, a análise matemática desses esquemas de diferenças para variável espacial, em problemas de ordenada discreta, tem recebido especial atenção [16]. Aperfeiçoamentos nos esquemas numéricos associados tem sido buscados [2, 20, 12]; os resultados das modificações vêm sendo comparados [17,19], buscando aprimorar e ampliar a capacidade dos códigos desenvolvidos. Nesse sentido, um método numérico livre de

erro de truncamento espacial, denotado por SGF [9], foi recentemente proposto para solução do problema de ordenada discreta unidimensional (S_N).

Neste trabalho apresentamos uma solução analítica para o problema unidimensional de ordenada discreta. Esse problema pode ser entendido a partir de formulação variacional. Para tal definimos o operador L associado à equação unidimensional de transporte de neutrons como:

$$L [\psi(x, \mu)] = \left[\mu \frac{d}{dx} + \sigma_T - \int_{-1}^1 \sigma_s(\mu' \rightarrow \mu) \psi(x, \mu') d\mu' \right] \psi(x, \mu) \quad (1.1)$$

onde $\psi(x, \mu)$ é o fluxo angular de neutrons na direção μ ; σ_T é a seção de choque total; $\sigma_s(\mu' \rightarrow \mu)$ é a seção de choque diferencial de espalhamento. O método S_N é então descrito como segue. Na equação de transporte de neutrons escrita na forma operacional:

$$L \psi = Q(x) \quad (1.2)$$

é aplicado o método da Colocação na variável μ , ou seja:

$$\int_{-1}^1 v L \psi d\mu = \int_{-1}^1 v Q d\mu \quad (1.3)$$

onde a função teste v é escolhida como a função generalizada delta de Dirac e os pontos de colocação μ_m são as raízes do Polinômio de Legendre de N -ésimo grau. Nessa situação obtemos:

$$\mu_m \frac{d}{dx} \psi_m(x) + \sigma_T \psi_m(x) - \int_{-1}^1 \sigma_s(\mu' \rightarrow \mu_m) \psi(x, \mu') d\mu' = Q(x) \quad (1.4)$$

Aplicando a quadratura de Gauss no termo integral da equação (1.4) e considerando a seguinte aproximação para a seção de choque diferencial:

$$\sigma_s(\mu' \rightarrow \mu) = \frac{1}{2} (\sigma_{s0} + 3 \sigma_{s1} \mu \mu') \quad (1.5)$$

obtemos a seguinte equação de ordenada discreta (S_N), para o caso de espalhamento anisotrópico linear :

$$\begin{aligned} \mu_m \frac{d}{dx} \psi_m(x) + \sigma_T \psi_m(x) = \frac{1}{2} [\sigma_{s0} \sum_{k=1}^N \psi_k(x) \omega_k \\ + 3 \mu_m \sigma_{s1} \sum_{k=1}^N \mu_k \psi_k(x) \omega_k + 2 Q(x)] \\ m = 1, \dots, N \end{aligned} \quad (1.6)$$

A idéia básica da formulação proposta neste trabalho, consiste na aplicação da transformada de Laplace na equação S_N (1.6), na variável espacial, e inversão analítica da solução transformada do sistema algébrico resultante, resultando uma expressão para o fluxo angular em termos dos valores na fronteira $x = 0$ do domínio.

No capítulo 2 a formulação é detalhada. A apresentação de uma fórmula de inversão para a matriz do sistema algébrico gerado (que é dependente do parâmetro complexo s) é feita também nesse capítulo, na seção 2.2. Não se dispondo dessa fórmula de inversão da matriz, faz-se necessário um tratamento numérico de inversão na transformada de Laplace conforme o apêndice A1.

A aplicação dessa formulação a problemas em meio finito e semi-infinito é tratada no capítulo 3. No caso do problema da placa (meio finito), uma vez conhecido o fluxo angular que entra na fronteira do domínio, os dados iniciais (fluxo angular na fronteira $x = 0$) que não são conhecidos, são reconstituídos a partir da aplicação da condição conhecida na fronteira $x = a$. Os resultados são comparados aos resultados obtidos por Barros [9]. Para meio semi-infinito, a condição imposta ao fluxo angular no infinito é que será aplicada para determinação das incógnitas em $x = 0$ usadas para o cálculo do fluxo angular. Particularmente o problema de Albedo foi resolvido e os resultados foram comparados aos obtidos pelo método F_N [22, 11]. Ainda no capítulo 3 são apresentadas as soluções obtidas na resolução do problema inverso: obtenção dos valores do fluxo angular nas fronteiras do domínio a partir de valores conhecidos do fluxo escalar no interior deste.

O tratamento para a equação de transporte na forma de

multigrupo é apresentada no capítulo 4. Assim como no caso de um grupo, a inversão da matriz do sistema algébrico gerado pela aplicação da transformada de Laplace, resulta numa expressão apresentada na seção 4.2. A formulação para multigrupo é aplicada a um problema de dois meios, no capítulo 5, e comparada com os resultados obtidos pelo método de Case [13].

Todos os problemas apresentados neste trabalho foram resolvidos para dois, quatro e oito pontos de quadratura em um PC-386.

Finalmente cumpre ressaltar que a transformada de Laplace tem sido aplicada à equação de transporte nas variáveis energia [4], tempo [15, 14, 8] e espacial [10]. Todavia não temos conhecimento que esse procedimento tenha sido aplicado a problemas de ordenadas discretas, motivo pelo qual denotamos essa formulação como método LTS_N .

2. O MÉTODO LTS_N PARA UM GRUPO

2.1 Introdução

Consideremos o seguinte problema de ordenada discreta numa placa homogênea com espalhamento linearmente anisotrópico :

$$\begin{aligned} \mu_m \frac{d}{dx} \psi_m(x) + \sigma_T \psi_m(x) = & \frac{1}{2} \left[\sigma_{s0} \sum_{k=1}^N \psi_k(x) \omega_k \right. \\ & \left. + 3 \mu_m \sigma_{s1} \sum_{k=1}^N \mu_k \psi_k(x) \omega_k + Q(x) \right] \end{aligned} \quad (2.1.1)$$

$m = 1, \dots, N$, N par, $0 \leq x \leq a$.

$$\psi_m(0) = f_m, \quad \mu_m > 0 \quad (2.1.1a)$$

e

$$\psi_m(a) = g_m, \quad \mu_m < 0 \quad (2.1.1b)$$

onde f_m e g_m são os fluxos que entram na fronteira do domínio; $\psi_m(x) = \psi(x, \mu_m)$ é o fluxo angular de partículas na direção μ_m ; σ_T é a seção de choque total; σ_{s0} e σ_{s1} são os componentes de ordem

onde a notação k' no somatório em (2.1.5) é usada para indicar que k não assume o valor m . Por outro lado $\bar{\psi}_m(s)$ e $\bar{q}_m(s)$ representam a transformada de Laplace na variável x de $\psi_m(x)$ e $q_m(x)$ respectivamente, considerando-se que $q(x)$ seja uma função cuja transformada de Laplace esteja definida.

A equação (2.1.5) representa um sistema de N equações lineares da forma :

$$A_N(s) \bar{\psi}(s) = \bar{f} \quad (2.1.6)$$

onde a matriz $A_N(s)$ é dada por :

$$\begin{bmatrix} s + \frac{\sigma_T}{\mu_1} - \frac{\sigma_s \omega_1}{2\mu_1} - \frac{3\sigma_{s1} \omega_1 \mu_1}{2} & -\frac{\sigma_s \omega_2}{2\mu_1} - \frac{3\sigma_{s1} \omega_2 \mu_2}{2} & \dots & -\frac{\sigma_s \omega_N}{2\mu_1} - \frac{3\sigma_{s1} \omega_N \mu_N}{2} \\ -\frac{\sigma_s \omega_1}{2\mu_2} - \frac{3\sigma_{s1} \omega_1 \mu_1}{2} & s + \frac{\sigma_T}{\mu_2} - \frac{\sigma_s \omega_2}{2\mu_2} - \frac{3\sigma_{s1} \omega_2 \mu_2}{2} & \dots & -\frac{\sigma_s \omega_N}{2\mu_2} - \frac{3\sigma_{s1} \omega_N \mu_N}{2} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\frac{\sigma_s \omega_1}{2\mu_N} - \frac{3\sigma_{s1} \omega_1 \mu_1}{2} & -\frac{\sigma_s \omega_2}{2\mu_N} - \frac{3\sigma_{s1} \omega_2 \mu_2}{2} & \dots & s + \frac{\sigma_T}{\mu_N} - \frac{\sigma_s \omega_N}{2\mu_N} - \frac{3\sigma_{s1} \omega_N \mu_N}{2} \end{bmatrix} \quad (2.1.7)$$

e ainda :

$$\bar{\psi}(s) = \begin{bmatrix} \bar{\psi}_1(s) \\ \vdots \\ \bar{\psi}_N(s) \end{bmatrix} \quad (2.1.8)$$

$$\tilde{\mathcal{F}} = F + Q = \begin{bmatrix} f_1 \\ \vdots \\ f_N \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \bar{q}_1(s) \\ \vdots \\ \bar{q}_N(s) \end{bmatrix} \quad (2.1.9)$$

sendo que os valores de $f_m = \psi_m(0)$, $m=1, \dots, N$, ainda não são conhecidos para $m = N/2+1, \dots, N$.

Uma vez conhecida a matriz inversa da matriz $A_N(s)$, que denotaremos $A_N^{-1}(s)$, por (2.1.6) $\bar{\psi}(s)$ será :

$$\bar{\psi}(s) = A_N^{-1}(s) \tilde{\mathcal{F}} \quad (2.1.10)$$

e então aplicando-se a transformada inversa de Laplace em (2.1.10), resulta na seguinte expressão para o fluxo angular :

$$\psi(x) = \mathcal{L}^{-1}\{ A_N^{-1}(s) F \} + Q(x) * \mathcal{L}^{-1}\{ A_N^{-1}(s) M \} \quad (2.1.11)$$

onde o segundo termo do lado direito da equação (2.1.11) representa a convolução de $Q(x)$ com a transformada inversa (denotada por \mathcal{L}^{-1}) do produto da matriz $A_N^{-1}(s)$ e do vetor M , definido como $M = [1/2\mu_1, \dots, 1/2\mu_N]^T$.

Sendo assim a principal dificuldade que se origina na aplicação dessa formulação é que para a solução do sistema (2.1.6) devemos determinar a matriz inversa da matriz $A_N(s)$, que é

dependente do parâmetro complexo s . Para $N = 2$ o problema é resolvido diretamente via método de Cramer, de forma simples [26]; o problema surge para aproximações de maior ordem ($N > 2$).

A primeira opção que pode ser apresentada para o tratamento desse problema é a de inverter-se numericamente a transformada de Laplace, como é mostrado no apêndice A1. No entanto a estrutura da matriz $A_N(s)$, dada em (2.1.7), permite a determinação de uma formulação explícita para o cálculo de sua inversa como apresentamos a seguir.

2.2 Inversão da matriz $A_N(s)$

A matriz $A_N(s)$ em (2.1.7) pode ser decomposta, segundo suas colunas, como segue :

$$A_N(s) = (E_1 + C_1 + D_1, \dots, E_j + C_j + D_j, \dots, E_N + C_N + D_N) \quad (2.2.1)$$

onde E_j , D_j e C_j , $j=1, \dots, N$, são definidas como "sub-colunas" dadas por :

$$\begin{aligned} E_j &= \text{col} (0, 0, \dots, s + \frac{\sigma_T}{\mu_j}, \dots, 0), \quad j = 1, \dots, N. \\ C_j &= \text{col} \left(\frac{-\sigma_{s0}\omega_j}{2\mu_1}, \dots, \frac{-\sigma_{s0}\omega_j}{2\mu_N} \right), \quad j = 1, \dots, N. \\ D_j &= \text{col} \left(-3/2 \sigma_{s1}\omega_j\mu_j, \dots, -3/2 \sigma_{s1}\omega_j\mu_j \right), \quad j = 1, \dots, N. \end{aligned} \quad (2.2.2)$$

O determinante da matriz $A_N(s)$:

$$\det A_N(s) = \det(E_1 + C_1 + D_1, E_2 + C_2 + D_2, \dots, E_N + C_N + D_N) \quad (2.2.3)$$

será calculado a partir da soma de determinantes de matrizes menores, já que segundo a decomposição (2.2.1) a matriz $A_N(s)$ pode ser escrita como uma soma de matrizes. Porém o cálculo desse determinante fica reduzido à soma dos termos :

$$\begin{aligned} \det A_N(s) = & \det(E_1, E_2, \dots, E_N) + \det(C_1, E_2, \dots, E_N) + \dots \\ & + \det(E_1, E_2, \dots, C_N) + \det(D_1, E_2, \dots, E_N) + \dots \\ & + \det(E_1, E_2, \dots, D_N) + \det(C_1, D_2, E_3, \dots, E_N) + \dots \\ & + \det(C_1, E_2, \dots, D_N) + \dots + \det(D_1, E_2, \dots, C_N) + \dots \\ & + \det(E_1, E_2, \dots, D_{N-1}, C_N) \end{aligned} \quad (2.2.4)$$

já que :

$$\det(E_1, \dots, C_i, \dots, C_j, \dots, E_N) = 0, \quad i \neq j \quad (2.2.5a)$$

$$\det(E_1, \dots, D_i, \dots, D_j, \dots, E_N) = 0, \quad i \neq j \quad (2.2.5b)$$

sendo :

$$C_i = \frac{\omega_i}{\omega_j} C_j \quad \text{e} \quad D_i = \frac{\omega_i \mu_i}{\omega_j \mu_j} D_j, \quad i \neq j \quad (2.2.6)$$

Dessa forma após alguns cálculos obtemos :

$$\begin{aligned} \det A_N(s) = & \prod_{k=1}^N \left(s + \frac{\sigma_T}{\mu_k}\right) - \sum_{k=1}^N \left\{ \left[\frac{\sigma_{s0} \omega_k}{2\mu_k} + \frac{3}{2} \sigma_{s1} \omega_k \mu_k \right] \prod_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^N \left(s + \frac{\sigma_T}{\mu_l}\right) \right\} \\ & + \frac{3}{4} \sigma_{s0} \sigma_{s1} \sum_{k=1}^N \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^N \left\{ \omega_k \omega_l \mu_l \left(\frac{1}{\mu_k} - \frac{1}{\mu_l} \right) \prod_{\substack{m=1 \\ m \neq k, l}}^N \left(s + \frac{\sigma_T}{\mu_m}\right) \right\} \end{aligned} \quad (2.2.7)$$

Os cofatores de $A_N(s)$, quando $i=j$, são obtidos diretamente a partir de (2.2.7) :

$$\begin{aligned} A_{i,j} = & \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \left(s + \frac{\sigma_T}{\mu_k}\right) - \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \left\{ \left[\frac{\sigma_{s0} \omega_k}{2\mu_k} + \frac{3}{2} \sigma_{s1} \omega_k \mu_k \right] \prod_{\substack{l=1 \\ l \neq i, k}}^N \left(s + \frac{\sigma_T}{\mu_l}\right) \right\} \\ & + \frac{3}{4} \sigma_{s0} \sigma_{s1} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^N \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq i, k}}^N \left\{ \omega_k \omega_l \mu_l \left(\frac{1}{\mu_k} - \frac{1}{\mu_l} \right) \prod_{\substack{m=1 \\ m \neq i, k, l}}^N \left(s + \frac{\sigma_T}{\mu_m}\right) \right\} \end{aligned} \quad (2.2.8)$$

Por outro lado, quando $i \neq j$ os cofatores são obtidos após algumas trocas de colunas de forma a se manter o parâmetro s na diagonal principal e eliminar a dependência do sinal nos

cofatores, resultando :

$$\begin{aligned}
 A_{ij} = & \left[\frac{\sigma_{s0} \omega_i}{2\mu_j} + \frac{3}{2} \sigma_{s1} \omega_i \mu_i \right] \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i, j}}^N \left(s + \frac{\sigma_T}{\mu_k} \right) \\
 & - \frac{3}{4} \sigma_{s0} \sigma_{s1} \sum_{\substack{k=1 \\ k \neq i, j}}^N \{ \omega_i \omega_k \left[\frac{\mu_k}{\mu_j} + \frac{\mu_i}{\mu_k} - \frac{\mu_i}{\mu_j} - 1 \right] \prod_{\substack{l=1 \\ l \neq i, j, k}}^N \left(s + \frac{\sigma_T}{\mu_l} \right) \}
 \end{aligned}
 \tag{2.2.9}$$

Então, baseado no cálculo de matriz adjunta, a matriz inversa $A_N(s)$ pode ser escrita como :

$$A_N^{-1}(s) = \frac{s^{N-1}P_{N-1} + s^{N-2}P_{N-2} + \dots + sP_1 + P_0}{\det A_N(s)}
 \tag{2.2.10}$$

onde as matrizes P_i ($i = 0, \dots, N-1$) são tais que :

$$P_{N-1} = I_N
 \tag{2.2.11}$$

I_N é a identidade de ordem N e os elementos da matriz P_{N-k-1} ($k = 1, \dots, N-1$) são dados por :

$$P_{ij}^{(N-k-1)} = \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq i}}^k \prod \left(\frac{\sigma_T}{\mu_m} \right) + \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq i}}^N H_l S_k + (1 - \delta_{1k}) \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq i}}^N \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq i, l}}^N U_{lm} T_k \quad (2.2.12)$$

para $i=j$; δ_{1k} é o delta de Kroenecker; S_k e T_k são definidas como:

$$S_k = \begin{cases} 1 & \text{quando } k=1 \\ \sum \prod \left(\frac{\sigma_T}{\mu_m} \right)_{m \neq i, l} & \text{quando } k > 1 \end{cases} \quad (2.2.12a)$$

$$T_k = \begin{cases} 1 & \text{quando } k=2 \\ \sum \prod \left(\frac{\sigma_T}{\mu_p} \right)_{p \neq i, l, m} & \text{quando } k > 2 \end{cases} \quad (2.2.12b)$$

Os parâmetros H_l e U_{lm} são dados por :

$$H_l = \frac{\sigma_{s0} \omega_l}{2\mu_l} + \frac{3}{2} \sigma_{s1} \omega_l \mu_l \quad (2.2.12c)$$

$$U_{lm} = \frac{3}{4} \sigma_{s0} \sigma_{s1} \omega_l \omega_m \mu_m \left[\frac{1}{\mu_l} - \frac{1}{\mu_m} \right] \quad (2.2.12d)$$

A notação $\sum \prod^k$ indica o somatório de todos os produtos de k termos do tipo (σ_T / μ_m) . O número de termos desse somatório será dado pela combinação de n elementos k a k , com $n = 1, \dots, N-1$. Por exemplo, para os elementos da matriz $P_{N-3}(k = 2)$, o primeiro termo do lado direito de (2.2.12) será a soma de todos os produtos de

dois termos (k termos) do tipo $(\sigma_T / \mu_1) \times (\sigma_T / \mu_2)$ onde os μ_m 's ($m = 1, \dots, N$) devem assumir valores diferentes de μ_i , ou seja m assume N-1 valores ($n = N-1$). Assim o número de elementos deste somatório será dado pelo número de combinações de N-1 elementos a k.

Usando as definições acima ainda se pode dizer que

$$\det A_N(s) = s^N + d_{N-1} s^{N-1} + \dots + d_1 s + d_0 \quad (2.2.13)$$

onde

$$d_{N-k} = \sum \prod_{m=1}^k \left(\frac{\sigma_T}{\mu_m} \right) - \sum_{l=1}^N H_l S_k + (1 - \delta_{1k}) \sum_{l=1}^N \sum_{m=1}^N U_{lm} T_k \quad (2.2.14)$$

incluindo, nesse caso, os termos $\mu_m = \mu_i$ nas definições de S_k e T_k dadas respectivamente em (2.2.12a) e (2.2.12b).

Para $i \neq j$ os elementos das matrizes P_{N-k-1} ($k = 1, \dots, N-1$) são escritos como :

$$P_{ij}^{(N-k-1)} = V_{ij} Y_k - \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq i, j}}^N R_{ijl} Z_k \quad (2.2.15)$$

Onde Y_k e Z_k são definidos como :

$$Y_k = \begin{cases} 1 & \text{quando } k=1 \\ \sum \prod \left(\frac{\sigma_T}{\mu_m} \right)_{m^x i, j}^{k-1} & \end{cases} \quad (2.2.15a)$$

$$Z_k = \begin{cases} 1 & \text{quando } k=2 \\ \sum \prod \left(\frac{\sigma_T}{\mu_m} \right)_{m^x i, j, l}^{k-2} & \end{cases} \quad (2.2.15b)$$

Ainda os parâmetros V_{ij} e R_{ijm} são dados por :

$$V_{ij} = \frac{\sigma_{s0} \omega_j}{2\mu_i} + \frac{3}{2} \sigma_{s1} \omega_j \mu_j \quad (2.2.15c)$$

$$R_{ijm} = \frac{3}{4} \sigma_{s0} \sigma_{s1} \omega_j \omega_m \left[\frac{\mu_m}{\mu_i} - 1 + \frac{\mu_i}{\mu_m} - \frac{\mu_j}{\mu_i} \right] \quad (2.2.15d)$$

ficando assim perfeitamente determinada a matriz $A_N^{-1}(s)$.

Cabe ainda salientar que matrizes que possam ser decompostas na forma $(sA + A_1)$ sendo A e A_1 matrizes numéricas, como é o caso da matriz $A_N(s)$, o algoritmo computacional de Trazka [24] também pode ser usado para a inversão.

2.3 A formulação LTS_N

Como foi observado na seção 2.1, a principal dificuldade que surge na aplicação do método proposto é a solução do sistema (2.1.6) uma vez que os elementos da matriz são dependentes do

parâmetro complexo s . Sendo assim, uma vez obtida a expressão (2.2.10) para a matriz inversa $A_N^{-1}(s)$, a solução de (2.1.6) pode ser escrita como :

$$\bar{\psi}(s) = \frac{s^{N-1}P_{N-1} + s^{N-2}P_{N-2} + \dots + sP_1 + P_0}{\det A_N(s)} \tilde{\mathcal{F}} \quad (2.3.1)$$

onde $\tilde{\mathcal{F}}$ é dada em (2.1.9); as matrizes P_i ($i = 0, \dots, N-1$) e o $\det A_N(s)$ estão definidas na seção 2.2. Agora, sendo $\bar{\psi}(s)$ escrita em termos de quocientes de polinômios a inversão da transformada pode ser feita usando-se a técnica de expansão de Heaviside e a formulação LTS_N para o problema (2.1.1) é então dada por :

$$\psi(x) = \sum_{k=1}^N \alpha_k e^{s_k x} + Q(x) * \mathcal{L}^{-1} \{ A_N^{-1}(s) M \} \quad (2.3.2)$$

onde

$$\alpha_k = \left[\frac{s_k^{N-1}P_{N-1} + \dots + s_k P_1 + P_0}{\frac{d}{ds} [\det A_N(s)]_{s=s_k}} \right] F = \mathcal{P}_k F \quad (2.3.3)$$

é uma matriz da ordem $(N \times 1)$ e s_k são as raízes do determinante de $A_N(s)$. As raízes calculadas por este polinômio coincidem com as raízes calculadas pela função de dispersão

discretizada, apresentada por Barros [9].

Podemos reescrever (2.3.2) como :

$$\psi(x) = B F + Q(x) * B M \quad (2.3.4)$$

onde os elementos da matriz B de ordem (N x N) são do tipo :

$$b_{ij}(x) = \sum_{k=1}^N p_k(i,j) e^{s_k x} \quad (2.3.5)$$

sendo $p_k(i, j)$ os elementos da matriz \mathcal{P}_k e o segundo termo da direita de (2.3.4) representa a convolução de $Q(x)$, o termo de fonte, com o produto da matriz B com o vetor $M = [1/2\mu_1, \dots, 1/2\mu_N]^T$.

O vetor fluxo angular $\psi(x)$ não pode ser determinado diretamente de (2.3.2) já que somente as primeiras N/2 componentes do vetor F são conhecidas. No entanto, aplicando-se as condições de contorno em $x=a$ dadas por (2.1.1b), a solução de um sistema linear (N/2 x N/2) fornecerá os valores das incógnitas em $x=0$, ou seja os valores de $\psi_m(0)$, $m = N/2+1, \dots, N$.

No caso do problema homogêneo ($Q = 0$) o sistema a ser resolvido será :

$$\begin{aligned}
& \begin{bmatrix} b_{N/2+1, N/2+1} \cdots b_{N/2+1, N} \\ \vdots \\ b_{N, N/2+1} \quad \dots \quad b_{N, N} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{N/2+1}(0) \\ \vdots \\ \psi_N(0) \end{bmatrix} \\
&= \begin{bmatrix} \psi_{N/2+1}(a) \\ \vdots \\ \psi_N(a) \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} b_{N/2+1, 1} \cdots b_{N/2+1, N/2} \\ \vdots \\ b_{N, 1} \quad \dots \quad b_{N, N/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_1(0) \\ \vdots \\ \psi_{N/2}(0) \end{bmatrix} \\
& \hspace{25em} (2.3.6)
\end{aligned}$$

Cabe aqui ressaltar, que no caso do problema não homogêneo (com fonte), a determinação das incógnitas em $x = 0$ envolve a solução de um sistema obtido fazendo-se $x = a$ em (2.3.4) para $\mu < 0$.

Dessa forma então, com a determinação dos valores de $\psi_m(0)$ para $\mu_m < 0$, uma solução analítica, que denominamos LTS_N , é obtida para o problema (2.1.1) dada por (2.3.2).

3. APLICAÇÕES A PROBLEMAS DE UM GRUPO

3.1 O Método LTS_N para problemas homogêneos

Vamos considerar a solução do problema (2.1.1), sem o termo de fonte ($Q = 0$), para uma placa homogênea de espessura $a = 100$ cm, com os parâmetros de seção de choque definidos na seção 2.1.1 dados por : $\sigma_T = 1.0$ (cm^{-1}), $\sigma_{s0} = 0.99$ (cm^{-1}), $\sigma_{s1} = 0.80$ (cm^{-1}). Considerando ainda que as condições de contorno (2.1.1a) e (2.1.1b) sejam tais que $\psi_m(0) = 1.0$ para $\mu_m > 0$ e $\psi_m(100) = 0$ para $\mu_m < 0$ esse problema foi resolvido usando o método LTS_N para 2, 4 e 8 pontos de quadratura.

Calculamos o fluxo escalar :

$$\phi(x) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \psi(x, \mu) d\mu = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \psi_k(x) \omega_k \quad (3.1.1)$$

nos pontos $x = 0, 50$ e 100 cm. Os resultados obtidos para as aproximações LTS_2 , LTS_4 , LTS_8 , são apresentados nas tabelas 3.1, 3.2 e 3.3 respectivamente, bem como a comparação desses resultados com os resultados obtidos por Barros [9] para a solução do mesmo problema.

Tabela 3.1.1 : Placa homogênea : comparação
numérica dos métodos SGF S_2 e LTS_2

	SGF S_2	LTS_2
x [cm]	$\phi(x)$ [$\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$]	$\phi(x)$ [$\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$]
0	0.81726×10^0	0.81726×10^0
50	0.16991×10^{-1}	0.16991×10^{-1}
100	0.12918×10^{-3}	0.12918×10^{-3}

Tabela 3.1.2 : Placa homogênea : comparação
numérica dos métodos SGF S_4 e LTS_4

	SGF S_4	LTS_4
x [cm]	$\phi(x)$ [$\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$]	$\phi(x)$ [$\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$]
0	0.82226×10^0	0.82226×10^0
50	0.16538×10^{-1}	0.16538×10^{-1}
100	0.12353×10^{-3}	0.12353×10^{-3}

Tabela 3.1.3 : Placa homogênea : comparação
numérica dos métodos SGF S_8 e LTS_8

	SGF S_8	LTS_8
x [cm]	$\phi(x)$ [$\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$]	$\phi(x)$ [$\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$]
0	0.82284×10^0	0.82284×10^0
50	0.16470×10^{-1}	0.16471×10^{-1}
100	0.12250×10^{-3}	0.12251×10^{-3}

3.2 Método LTS_N para problemas heterogêneos

Consideremos a seguir o seguinte problema de ordenada discretas para M regiões :

$$\begin{aligned} \mu_m \frac{d}{dx} \psi_{jm}(x) + \sigma_{Tj} \psi_{jm}(x) = \frac{1}{2} [\sigma_{s0j} \sum_{k=1}^N \psi_{jk}(x) \omega_k \\ + 3 \mu_m \sigma_{s1j} \sum_{k=1}^N \mu_k \psi_{jk}(x) \omega_k + Q(x)] \end{aligned} \quad (3.2.1)$$

onde $\psi_{jm}(x) = \psi_j(x, \mu_m)$ é o fluxo angular de partículas na direção μ_m ($m = 1, \dots, N$) em cada região $x_{j-1} < x < x_j$ ($j = 1, \dots, M$); $x_0 = 0$; $x_M = a$; com as seguintes condições de contorno :

$$\psi_{1m}(0) = f_m, \mu_m > 0 \quad (3.2.1a)$$

$$\psi_{Mm}(a) = g_m, \mu_m < 0 \quad (3.2.1b)$$

Nesse caso, como no problema (2.1.1), μ_k são as raízes do Polinômio de Legendre de N -ésimo grau e estão ordenadas como em (2.1.2); ω_k são os respectivos pesos nas direções μ_k ; para cada região $x_{j-1} < x < x_j$, $j = 1, \dots, M$ são conhecidas σ_{Tj} : seção de choque total, σ_{s0j} e σ_{s1j} : seções de choque diferenciais

de espalhamento de ordem zero e um respectivamente . (fig. 3.1)

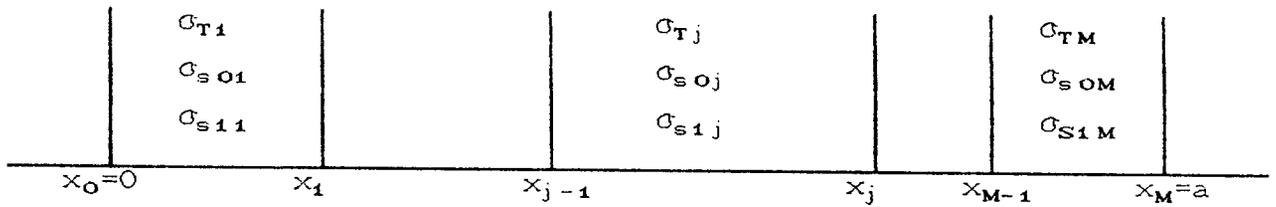


Figura 3.1 : Problema heterogêneo : Placa de espessura a dividida em M regiões.

Podemos aplicar a formulação analítica do fluxo angular (2.3.2), obtida pelo método LTS_N para o problema da placa (2.1.1), para cada região e assim obtemos:

$$\psi_{jm}(x) = \sum_{k=1}^N \alpha_k^{(j)} \exp[s_{kj}(x - x_{j-1})] + Q(x) * B M \quad (3.2.2)$$

para $x_{j-1} < x < x_j$, onde :

$$\alpha_k^{(j)} = \left[\frac{s_{kj}^{N-1} P_{N-1} + \dots + s_{kj} P_1 + P_0}{\frac{d}{ds} [\det A_N(s)]_{s=s_{kj}}} \right] F_j \quad (3.2.3)$$

sendo as matrizes P_i ($i = 0, \dots, N-1$) definidas como na seção 2.1; o termo da direita de (3.2.2) representa a convolução da função $Q(x)$, que representa o termo de fonte, e do produto

matricial de B pelo vetor M definido na seção 2.1. Apenas os valores de s_{kj} são agora as raízes do polinômio determinante de $A_N(s)$ para cada região ($x_{j-1} < x < x_j$). O vetor F_j ($j = 1, \dots, M$) contém os valores do fluxo angular para cada região na fronteira correspondente a $x = 0$:

$$F_j = \begin{bmatrix} \psi_{j1}(0) \\ \vdots \\ \psi_{jN}(0) \end{bmatrix} \quad (3.2.4)$$

Como no caso do problema homogêneo, somente os $N/2$ primeiros componentes do vetor F_1 são conhecidos. Para que o vetor fluxo angular fique perfeitamente determinado devemos considerar além da condição de contorno em $x = a$ as condições de continuidade do fluxo angular nas interfaces de cada região, ou seja em $x = x_j$ ($j = 1, \dots, M-1$).

Como em (2.3.6), no caso de se considerar $Q = 0$, o sistema gerado será de ordem igual ao $(M \times N) - N/2$ onde M é o número de regiões em que a placa está subdividida.

A solução deste sistema permite com que os coeficientes de (3.2.2) fiquem bem determinados e conseqüentemente uma solução analítica para o problema de multiregiões (3.2.1) seja obtido. Cabe considerar que esse tipo de procedimento foi o mesmo usado para solução do problema homogêneo para $N = 4$ e 8 para contornar o problema de espessuras maiores como foi citado na seção 3.1.

Resolvemos numericamente o problema (3.2.1) para o caso de que $Q = 0$ e considerando uma placa de espessura $a = 100$ cm

dividida em três regiões ($M = 3$) caracterizadas pelos parâmetros e espessura apresentados na tabela 3.2.1 :

Tabela 3.2.1 : Problema heterogêneo : espessura e parâmetros de cada região

Região j	espessura [cm]	σ_T [cm^{-1}]	σ_{s0} [cm^{-1}]	σ_{s1} [cm^{-1}]
1	$0 < x < 20$	1.0	0.9	0.8
2	$20 < x < 70$	0.6	0.4	0.3
3	$70 < x < 100$	1.0	0.9	0.8

Esse problema foi resolvido usando-se 2, 4 e 8 pontos de quadratura. Como anteriormente, devido à espessura da placa, a mesma foi dividida em um número maior de regiões, de forma que no caso da aproximação LTS_2 , o sistema a ser resolvido para a determinação das incógnitas em $x = 0$ é de ordem (11×11) , na aproximação LTS_4 é de ordem (38×38) e para LTS_8 temos um sistema (156×156) . Os resultados são apresentados nas tabelas 3.2.2, 3.2.3 e 3.2.4 respectivamente. Uma comparação com os resultados do método SGF [9] também é apresentada.

Tabela 3.2.2 : Problema heterogêneo : comparação
numérica das aproximações SGF S_2 e LTS_2

	SGF S_2	LTS_2
x [cm]	$\phi(x)$ [$\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$]	$\phi(x)$ [$\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$]
0	0.58578×10^0	0.58578×10^0
20	0.40531×10^{-2}	0.40531×10^{-2}
70	0.26614×10^{-11}	0.17281×10^{-9}
100	0.14190×10^{-14}	0.14190×10^{-14}

Tabela 3.2.3 : Problema heterogêneo : comparação
numérica das aproximações SGF S_4 e LTS_4

	SGF S_4	LTS_4
x [cm]	$\phi(x)$ [$\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$]	$\phi(x)$ [$\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$]
0	0.60819×10^0	0.60819×10^0
20	0.41468×10^{-2}	0.41468×10^{-2}
70	0.31817×10^{-10}	0.31816×10^{-10}
100	0.24196×10^{-13}	0.24196×10^{-13}

Tabela 3.2.4 : Problema heterogêneo : comparação
numérica das aproximações SGF S_8 e LTS_8

	SGF S_8	LTS_8
x [cm]	$\phi(x)$ [$\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$]	$\phi(x)$ [$\text{cm}^{-2} \cdot \text{s}^{-1}$]
0	0.61112×10^0	0.61112×10^0
20	0.41033×10^{-2}	0.41033×10^{-2}
70	0.32316×10^{-10}	0.32316×10^{-10}
100	0.24323×10^{-13}	0.24323×10^{-13}

Pela análise das tabelas anteriores, pode-se observar que para o caso do problema homogêneo, (tabelas da seção 3.1), usando-se até 8 pontos de quadratura já se obtém resultados com dois algarismos significativos coincidentes (até três algarismos para o fluxo em $x = 0$), o que indica a convergência numérica do método. Para o caso do problema heterogêneo (tabelas da seção 3.2) a convergência numérica ainda não fica bem evidenciada para os valores de $N = 2, 4$ e 8 .

3.3 O Problema do Albedo

Seja o problema (2.1.1) para o caso de espalhamento isotrópico, sem fonte ($Q = 0$), $c < 1$ ($c = \sigma_{s0}/\sigma_T$) em um meio semi-infinito :

$$\mu_m \frac{d}{dx} \psi_m(x) + \sigma_T \psi_m(x) = \frac{1}{2} \left[\sigma_{s0} \sum_{k=1}^N \psi_k(x) \omega_k \right] \quad (3.3.1)$$

$m = 1, \dots, N$, N par, $x > 0$, e com as seguintes condições :

$$\psi_m(0) = f_m, \mu_m > 0 \quad (3.3.1a)$$

$$\psi_m \rightarrow 0 \text{ quando } x \rightarrow \infty \quad (3.3.1b)$$

onde f_m representa o fluxo que entra na fronteira $x = 0$; $\psi_m(x) = \psi(x, \mu_m)$ é o fluxo angular de partículas na direção μ_m ; σ_T é a seção de choque total; σ_{s0} é a componente de ordem zero da seção de choque diferencial de espalhamento; μ_m são as raízes do Polinômio de Legendre de N -ésimo grau, ordenados como em (2.1.2), e ω_m são os respectivos pesos da quadratura de Gauss. Esse problema caracteriza-se como problema de Albedo.

Todo o procedimento aplicado ao problema (2.1.1) é aqui repetido. Ou seja, a solução de (3.3.1) é da forma :

$$\psi(x) = \sum_{k=1}^N \alpha_k e^{s_k x} \quad (3.3.2)$$

como em (2.3.2), considerando-se $Q = 0$. Além disso :

$$\alpha_k = \left[\frac{s_k^{N-1} P_{N-1} + \dots + s_k P_1 + P_0}{\frac{d}{ds} [\det A_N(s)]_{s=s_k}} \right] F \quad (3.3.3)$$

também como em (2.3.3). O vetor F é definido como em (2.1.9) no entanto deve-se observar que os elementos da matriz $A_N(s)$ diferem de (2.1.7), bem como as matrizes P_i ($i = 0, \dots, N-1$) diferem das definições da seção 2.2, porque para espalhamento isotrópico, temos $\sigma_{s1} = 0$. Isso na verdade simplifica muito todos os cálculos envolvidos na solução do problema, especialmente no cálculo do determinante da matriz $A_N(s)$ e cofatores.

Por outro lado, se até aqui repetimos o procedimento usado para solução do problema da placa, a determinação das componentes do vetor F que não são conhecidas ($\psi_m(0)$, $\mu_m < 0$) deve ser feita de forma diversa. Ou seja, para que o vetor fluxo angular $\psi(x)$ fique perfeitamente determinado, devemos usar a condição (3.3.1b) para obtenção dos valores de $\psi_m(0)$, $\mu_m < 0$. Isso resulta que um sistema ($N/2 \times N/2$) deve ser resolvido :

$$p_k(m, N/2 + 1) f_{N/2+1} + \dots + p_k(m, N) f_N = p_k(m, 1) f_1 + \dots + p_k(m, N/2) f_{N/2} \quad (3.3.4)$$

para k assumindo $N/2$ valores que correspondem às raízes positivas s_k e para m assumindo qualquer valor entre 1 e N ; ainda $p_k(i, j)$ são os elementos da matriz \mathcal{P}_k definida em (2.3.3). Ou seja, estamos considerando nulos os coeficientes das exponenciais de argumento positivo na expressão de fluxo angular para satisfazer a condição de que $\psi_m \rightarrow 0$ quando $x \rightarrow \infty$.

Com a obtenção dos valores de $\psi_m(0)$ para $\mu_m < 0$, os coeficientes em (3.3.2) ficam bem determinados e obtemos assim uma solução analítica para o problema (3.3.1). Com isso podemos também calcular o coeficiente de Albedo, que indica a razão entre a corrente que sai e a corrente que entra na fronteira $x = 0$, dada por :

$$A^* = 2 \int_0^1 \psi(0, -\mu) \mu \, d\mu = \int_{-1}^1 \psi(0, -\lambda) \lambda \, d\lambda = \sum_{k=1}^N \psi(0, -\lambda_k) \lambda_k \omega_k$$

(3.3.5)

onde $\lambda_k = (\mu_k + 1)/2$, $k = 1, \dots, N$ e $f_m = 1.0$ para $\mu_m > 0$. No entanto, os valores de $\psi(0, -\lambda_k)$, $k = 1, \dots, N$, devem ser obtidos por meio de uma interpolação a partir dos valores de $\psi_m(0)$, $m=1, \dots, N$.

Os valores do Albedo foram calculados para $c = \sigma_{s0} / \sigma_T$ variando de 0.1 a 0.9 para comparação com os resultados obtidos pelo método F_N [11]. Por razões de simplicidade, mas principalmente para se obter uma padronização do procedimento, usamos sempre uma interpolação linear para determinarmos os valores $\psi(0, -\lambda_k)$, com $k = 1, \dots, N$. No entanto, à medida que trabalhamos com aproximações de maior ordem, dispomos de maior número de pontos para o cálculo dessa aproximação, ou seja, quando $N = 2$ os valores $\psi(0, -\lambda_k)$, $k = 1, 2$ são obtidos a partir de uma interpolação linear determinada por $\psi(0, \mu_1)$ e $\psi(0, \mu_2)$. Quando $N=4$, os valores $\psi(0, -\lambda_k)$, $k = 1, \dots, 4$ são obtidos a partir de uma interpolação linear determinada por $\psi(0, \mu_i)$, $i = 1, \dots, 4$ que foi calculada pelo método dos mínimos quadrados. E analogamente para $N = 8$. Os resultados obtidos, bem como os resultados obtidos pelo método F_N [11], são mostrados nas tabelas 3.3.1, 3.3.2 e 3.3.3 e comparados com a solução exata. Cabe ainda lembrar que para diferentes valores de c obtemos diferentes valores para $\psi(0, \mu_k)$, $k = N/2 + 1, \dots, N$ e para as raízes s_k .

Tabela 3.3.1 : Problema do Albedo : comparação numérica entre as aproximações F_0 , LTS_2 e solução exata

c	exata	F_0	erro(%)	LTS_2	erro(%)
0.1	0.02170	0.01676	22.8	-0.04898	325.7
0.2	0.04626	0.03694	20.1	-0.01731	137.4
0.3	0.07445	0.06160	17.3	0.01846	75.2
0.4	0.1073	0.09203	14.2	0.05949	44.5
0.5	0.1465	0.1299	11.3	0.1075	17.1
0.6	0.1947	0.1778	8.7	0.1652	15.1
0.7	0.2566	0.2406	6.2	0.2375	7.5
0.8	0.3419	0.3284	4.0	0.3342	2.3
0.9	0.4780	0.4691	1.9	0.4823	0.9

Tabela 3.3.2 : Problema do Albedo : comparação numérica entre as aproximações F_2 , LTS_4 e solução exata

c	exata	F_2	erro(%)	LTS_4	erro(%)
0.1	0.02170	0.02375	9.4	0.02322	7.0
0.2	0.04626	0.04986	7.8	0.04931	6.6
0.3	0.07445	0.07900	6.1	0.07901	6.1
0.4	0.1073	0.1123	4.7	0.1134	5.7
0.5	0.1465	0.1514	3.3	0.1540	5.1
0.6	0.1947	0.1990	2.2	0.2034	4.5
0.7	0.2566	0.2600	1.3	0.2663	3.8
0.8	0.3419	0.3442	0.7	0.3521	3.0
0.9	0.4780	0.4791	0.2	0.4875	2.0

Tabela 3.3.3 : Problema do Albedo : comparação numérica entre as aproximações F_3 , LTS_8 e solução exata

c	exata	F_3	erro(%)	LTS_8	erro(%)
0.1	0.02170	0.02186	0.7	0.02269	4.6
0.2	0.04626	0.04651	0.5	0.04825	4.3
0.3	0.07445	0.07474	0.4	0.07739	3.9
0.4	0.1073	0.1076	0.3	0.1112	3.6
0.5	0.1465	0.1468	0.2	0.1512	3.2
0.6	0.1947	0.1950	0.1	0.2001	2.8
0.7	0.2566	0.2568	0.1	0.2625	2.3
0.8	0.3419	0.3420	0.03	0.3479	1.7
0.9	0.4780	0.4781	0.02	0.4833	1.1

Observamos anteriormente que uma interpolação linear seria adotada, para determinação dos valores $\psi(0, -\lambda_k), k = 1, \dots, N$, principalmente no sentido de padronização do procedimento. Isso porque na verdade o que acontece é que os resultados são muito sensíveis ao tipo de interpolação usada. Para caracterizarmos esse fato, mostramos a seguir, na tabela 3.3.4 os resultados obtidos para o cálculo do albedo usando combinação de interpolações quadrática e linear (conforme a disposição dos pontos) no caso LTS_4 , onde se pode observar que embora os resultados melhorem bastante para alguns valores de c ($c = 0.6$), por outro lado o erro aumenta muito para outros valores ($c = 0.1$).

Tabela 3.3.4 : Albedo-LTS₄ : resultados obtidos com
interpolação linear e quadrática

c	exata	LTS ₄ ^a	erro(%)	LTS ₄ ^b	erro(%)
0.1	0.02170	0.02322	7.0	0.04258	80.4
0.2	0.04626	0.04931	6.6	0.03277	29.2
0.3	0.07445	0.07901	6.1	0.06500	12.7
0.4	0.1073	0.1134	5.7	0.1020	4.9
0.5	0.1465	0.1540	5.1	0.1454	0.8
0.6	0.1947	0.2034	4.5	0.1977	1.5
0.7	0.2566	0.2663	3.8	0.2634	2.7
0.8	0.3419	0.3521	3.0	0.3520	2.9
0.9	0.4780	0.4875	2.0	0.4893	2.4

caso a : albedo obtido por interpolação linear

caso b : interpolação linear e quadrática

Um outro recurso bastante simples também foi testado. A integral (3.3.5) foi calculada apenas para valores positivos discretos de μ_m . Ou seja, para a aproximação LTS_N são usados N/2 pontos para o cálculo de (3.3.5). Esse tipo de procedimento apresenta a vantagem de corrigir bastante os valores obtidos na aproximação LTS₂ para menores valores de c e ao mesmo tempo na aproximação LTS₈ os erros são de mesma ordem daqueles obtidos a partir da interpolação linear, além de se tornar operacionalmente bastante simples. Os resultados obtidos a partir desse procedimento são mostrados nas tabelas (3.3.5), (3.3.6) e (3.3.7) respectivamente para as aproximações LTS₂, LTS₄ e LTS₈.

Tabela 3.3.5 : Comparação numérica entre duas formas de cálculo do albedo na aproximação LTS_2

c	exata	LTS_2^a	erro(%)	LTS_2^b	erro(%)
0.1	0.02170	-0.04898	325.7	0.02633	21.3
0.2	0.04626	-0.01731	137.4	0.05573	20.5
0.3	0.07445	0.01846	75.2	0.08893	19.4
0.4	0.1073	0.0595	44.6	0.1270	18.4
0.5	0.1465	0.1075	26.3	0.1715	17.1
0.6	0.1947	0.1652	15.1	0.2251	15.6
0.7	0.2566	0.2375	7.4	0.2922	13.9
0.8	0.3419	0.3342	2.3	0.3820	11.7
0.9	0.4780	0.4823	0.9	0.5195	8.7

caso a : albedo obtido por aproximação linear

caso b : aproximação para valores positivos μ_m .

Tabela 3.3.6 : Comparação numérica entre duas formas de cálculo do albedo na aproximação LTS_4

c	exata	LTS_4^a	erro(%)	LTS_4^b	erro(%)
0.1	0.02170	0.02322	7.0	0.02481	14.3
0.2	0.04626	0.04931	6.6	0.05266	13.8
0.3	0.07445	0.07901	6.1	0.08431	13.2
0.4	0.1073	0.1134	5.7	0.1209	12.6
0.5	0.1465	0.1540	5.1	0.1640	11.9
0.6	0.1947	0.2034	4.5	0.2163	11.1
0.7	0.2566	0.2663	3.8	0.2827	10.2
0.8	0.3419	0.3521	3.0	0.3729	9.1
0.9	0.4780	0.4823	2.0	0.5144	7.6

caso a : albedo obtido por aproximação linear

caso b : aproximação para valores positivos μ_m .

Tabela 3.3.7 : Comparação numérica entre duas formas de cálculo do albedo na aproximação LTS_B

c	exata	LTS_B^a	erro(%)	LTS_B^b	erro(%)
0.1	0.02170	0.02269	4.6	0.02267	4.5
0.2	0.04626	0.04825	4.3	0.04825	4.3
0.3	0.07445	0.07739	3.9	0.07747	4.1
0.4	0.1073	0.1112	3.6	0.1114	3.9
0.5	0.1465	0.1512	3.2	0.1518	3.6
0.6	0.1947	0.2001	2.8	0.2011	3.3
0.7	0.2566	0.2625	2.3	0.2641	2.9
0.8	0.3419	0.3479	1.7	0.3508	2.6
0.9	0.4780	0.4823	1.1	0.4882	2.1

caso a : albedo obtido por aproximação linear

caso b : aproximação para valores positivos μ_m .

Os resultados obtidos para o albedo a partir de valores interpolados $\psi(0, -\lambda_k)$, $k=1, \dots, N$, apresentados nas tabelas 3.3.1 a 3.3.7, mostram a necessidade de trabalharmos com aproximações LTS_N de maior ordem ($N > 8$) para obtermos resultados mais precisos, independentemente do valor de c.

No entanto outra forma de determinação dos valores $\psi(0, -\lambda_k)$, $k = 1, \dots, N$ foi usada, que não a de interpolação a partir dos valores de $\psi(0, \mu_m)$, $m = 1, \dots, N$, para cálculo do albedo. Na verdade, os valores $\psi(0, -\lambda_k)$, $k = 1, \dots, N$ foram calculados a partir do resultado obtido por Chandrasekhar [7] segundo o qual :

$$\psi(0, -\mu) = \frac{c}{2} H(\mu) \int_0^1 H(x) \times \frac{dx}{x + \mu}, \quad \mu > 0 \quad (3.3.6)$$

onde $H(\mu)$ satisfaz :

$$H(\mu) = 1 + \frac{c}{2} \mu H(\mu) \int_0^1 H(x) \frac{dx}{x + \mu} \quad (3.3.7)$$

avaliando (3.3.6) nos valores λ_k desejados. A função H foi calculada usando-se 80 pontos de quadratura, segundo [25], sem ocasionar acréscimo significativo de tempo computacional (cerca de 0,2 min). Com isso obtivemos não só um procedimento padronizado para o cálculo do albedo, como também uma diferença significativa no sentido da diminuição dos erros obtidos. Isso pode ser observado nas tabelas (3.3.8), (3.3.9) e (3.3.10) a seguir :

Tabela 3.3.8 : Problema do albedo : comparação numérica entre as aproximações F_3 , LTS_2^* e solução exata.

c	exata	F_3	erro(%)	LTS_2^*	erro(%)
0.1	0.02170	0.02186	0.7	0.02187	0.8
0.2	0.04626	0.04651	0.5	0.04661	0.8
0.3	0.07445	0.07474	0.4	0.07496	0.7
0.4	0.1073	0.1076	0.3	0.1080	0.6
0.5	0.1465	0.1468	0.2	0.1473	0.5
0.6	0.1947	0.1950	0.1	0.1956	0.5
0.7	0.2566	0.2568	0.08	0.2575	0.3
0.8	0.3419	0.3420	0.03	0.3427	0.2
0.9	0.4780	0.4781	0.02	0.4787	0.1

* obtido a partir do resultado (3.3.6) de Chandrasekhar

Tabela 3.3.9 : Problema do albedo : comparação numérica entre as aproximações F_4 , LTS_4^* e solução exata.

c	exata	F_4	erro(%)	LTS_4^*	erro(%)
0.1	0.02170	0.02177	0.3	0.02166	0.2
0.2	0.04626	0.04639	0.3	0.04619	0.1
0.3	0.07445	0.07461	0.2	0.07433	0.2
0.4	0.1073	0.1075	0.2	0.1072	0.1
0.5	0.1465	0.1467	0.1	0.1463	0.1
0.6	0.1947	0.1949	0.1	0.1944	0.1
0.7	0.2566	0.2567	0.04	0.2561	0.2
0.8	0.3419	0.3420	0.03	0.3413	0.2
0.9	0.4780	0.4781	0.02	0.4771	0.2

* obtido a partir do resultado (3.3.6) de Chandrasekhar

Tabela 3.3.10 : Problema do albedo : comparação numérica entre as aproximações F_5 , LTS_8^* e solução exata.

c	exata	F_5	erro(%)	LTS_8^*	erro(%)
0.1	0.02170	0.02172	0.09	0.02170	0.00
0.2	0.04626	0.04630	0.09	0.04627	0.01
0.3	0.07445	0.07449	0.05	0.07445	0.00
0.4	0.1073	0.1074	0.09	0.1073	0.00
0.5	0.1465	0.1466	0.07	0.1465	0.00
0.6	0.1947	0.1948	0.05	0.1947	0.00
0.7	0.2566	0.2566	0.00	0.2566	0.00
0.8	0.3419	0.3419	0.00	0.3419	0.00
0.9	0.4780	0.4780	0.00	0.4780	0.00

* obtido a partir do resultado (3.3.6) de Chandrasekhar

3.4 O Problema Inverso

Consideremos o problema de determinação do fluxo incidente num domínio a partir do conhecimento do fluxo escalar em pontos interiores desse domínio. Esse problema é caracterizado como um problema inverso. A solução desse tipo de problema tem importância e aplicação no planejamento de doses em radioterapia [5].

A solução de um problema desse tipo é viabilizada na medida em que usando a formulação LTS_N determinamos uma solução analítica para o problema (2.1.1), em uma placa homogênea de espessura a , dada por (2.3.2) :

$$\psi(x) = \sum_{k=1}^N \alpha_k e^{s_k x} + Q(x) * B M \quad (2.3.2)$$

onde vimos que o coeficiente α_k , $k = 1, \dots, N$ depende dos valores do fluxo angular $\psi_m(x)$, $m = 1, \dots, N$ no ponto $x = 0$. Ainda, na solução do problema (2.1.1) de "forma direta" os valores do fluxo incidente nas fronteiras da placa são conhecidos. Supondo agora que não conhecemos os valores do fluxo que entra nas fronteiras mas conhecemos o valor do fluxo escalar em N pontos x_i interiores do domínio, a solução linear do sistema $(N \times N)$ dada por :

$$\phi(x_i) = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N \psi_k(x_i) \omega_k, \quad i = 1, \dots, N \quad (3.4.1)$$

permite que os valores $\psi_m(0)$, $m = 1, \dots, N$ sejam determinados e possamos com isso calcular os valores de $\psi_m(a)$, $m = 1, \dots, N$ usando (2.3.2), estabelecendo-se assim uma solução para o problema inverso.

Aplicamos essa formulação para o problema com os mesmos dados usados em (3.1.1) para a placa homogênea de espessura $a = 100\text{cm}$. Os valores de fluxo escalar em pontos do interior da placa, usados na solução do problema inverso, foram obtidos na resolução do problema direto (2.1.1). Como o problema considerado foi um problema homogêneo ($Q = 0$), descrito por (2.3.4), então:

$$\psi(x) = B F \quad (3.4.2)$$

onde a matriz B , definida em (2.3.5) tem elementos $b_{ij} = b_{ij}(x)$, $i, j = 1, \dots, N$ e o vetor F , dado em (2.1.9) é o vetor dos valores do fluxo angular em $x = 0$. Assim, o sistema de equações (3.4.1) é do tipo:

$$\begin{aligned} \phi(x_i) = \frac{1}{2} \{ & [b_{11}(x_i)\omega_1 + b_{21}(x_i)\omega_2 + \dots + b_{N1}(x_i)\omega_N] \psi_1(0) + \dots \\ & \dots + [b_{1N}(x_i)\omega_1 + b_{2N}(x_i)\omega_2 + \dots + b_{NN}(x_i)\omega_N] \psi_N(0) \} \end{aligned} \quad (3.4.3)$$

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

Para a aproximação LTS_2 , inicialmente resolvemos o problema inverso a partir de valores do fluxo escalar em pontos próximos à fronteira ($x = 5$ e $x = 10$ (cm)). Os resultados relativos ao fluxo angular que entra nas fronteiras são apresentados na tabela 3.4.1.

Tabela 3.4.1 : Resultados do problema inverso - LTS_2 considerando fluxo escalar conhecido nos pontos $x = 5, 10$ (cm).

	P. inverso	P. Direto
$\psi_1(0)$	1.00000	1.00000
$\psi_2(100)$	0.00013	0.00000

Na tabela 3.4.2 são mostrados os resultados obtidos na solução do problema inverso, ainda para a aproximação LTS_2 , a partir de valores do fluxo escalar nos pontos $x = 50$ e $x = 70$ (cm).

Tabela 3.4.2 : Resultados do problema inverso - LTS_2 considerando fluxo escalar conhecido nos pontos $x = 50, 70$ (cm).

	P. inverso	P. Direto
$\psi_1(0)$	0.99999	1.00000
$\psi_2(100)$	0.00013	0.00000

Pelas tabelas acima pode-se observar que além de obtermos resultados satisfatórios em relação ao problema direto, os resultados obtidos praticamente não diferem segundo a localização dos pontos de fluxo escalar conhecido. Na verdade, o valor de $\psi_2(100)$ apresentado nas duas tabelas só apresenta diferença a partir oitavo algarismo significativo.

O mesmo problema foi resolvido usando a aproximação LTS_4 . Os valores do fluxo que entra nas fronteiras $x = 0$ e $x = 100$ da placa, obtidos na solução do problema inverso, são mostrados na tabela 3.4.3. Nesse caso, o problema inverso foi solucionado a partir dos valores conhecidos do fluxo escalar nos pontos $x=0, 5, 8$ e 10 (cm) . Considerando-se que a placa foi dividida em dez regiões para a solução do problema direto, como foi citado na seção 3.1, esse pontos correspondem à primeira região.

Tabela 3.4.3 : Resultados do problema inverso - LTS_4
considerando fluxo escalar conhecido
nos pontos $x = 2, 4, 6, 8$ (cm).

	P. inverso	P. Direto
$\psi_1(0)$	0.99999	1.00000
$\psi_2(0)$	1.00000	1.00000
$\psi_3(100)$	7.86×10^{-12}	0.00000
$\psi_4(100)$	4.67×10^{-12}	0.00000

Para valores do fluxo escalar em $x = 12, 14, 16$ e 18 (cm), (correspondentes à segunda região) obtivemos os seguintes valores

para o fluxo que entra nas fronteiras da placa (tabela 3.4.4) :

Tabela 3.4.4 : Resultados do problema inverso - LTS₄
considerando fluxo escalar conhecido
nos pontos $x = 12, 14, 16, 18$ (cm).

	P. inverso	P. Direto
$\psi_1(0)$	0.99785	1.00000
$\psi_2(0)$	1.00460	1.00000
$\psi_3(100)$	2.05×10^{-12}	0.00000
$\psi_4(100)$	1.64×10^{-12}	0.00000

Uma outra alternativa testada foi a solução do problema inverso a partir de valores do fluxo escalar em pontos próximos as duas fronteiras, no caso $x = 2, 4$ (cm) e $x = 96, 98$ (cm), resultando nos valores apresentados na tabela 3.4.5 :

Tabela 3.4.5 : Resultados do problema inverso - LTS₄
considerando fluxo escalar conhecido
nos pontos $x = 2, 4, 96$ e 98 (cm).

	P. inverso	P. Direto
$\psi_1(0)$	1.00000	1.00000
$\psi_2(0)$	0.99999	1.00000
$\psi_3(100)$	5.71×10^{-11}	0.00000
$\psi_4(100)$	2.82×10^{-11}	0.00000

Para pontos mais distantes da fronteira $x = 0$, já a partir da terceira região da placa (a partir de $x = 20$ (cm)), os resultados começam a apresentar maior diferença em relação aos resultados do problema direto, caracterizando a influência da localização dos pontos na solução do problema inverso. Na verdade, na resolução do problema inverso a placa também deve ser dividida em regiões menores (pelo mesmo motivo do problema direto) e então pode-se observar claramente que partindo do interior da placa para a fronteira $x = 0$, a cada região a diferença (perda de algarismos significativos) em relação aos valores obtidos pelo problema direto (nos mesmos pontos) cresce rapidamente, podendo alterar profundamente o resultado final. Então, resolvemos o problema fazendo em cada etapa, isto é, em cada região, uma correção, baseada nos resultados do problema direto. Os resultados da tabela 3.4.6 foram assim obtidos, conhecendo-se o fluxo escalar em $x = 22, 24, 26$ e 28 (cm).

Tabela 3.4.6 : Resultados do problema inverso - LTS_4 considerando fluxo escalar conhecido nos pontos $x = 22, 24, 26$ e 28 (cm).

	P. inverso	P. Direto
$\psi_1(0)$	0.99671	1.00000
$\psi_2(0)$	1.00700	1.00000
$\psi_3(100)$	6.75×10^{-13}	0.00000
$\psi_4(100)$	9.98×10^{-13}	0.00000

Também para a aproximação LTS_8 o problema inverso foi resolvido a partir de valores do fluxo escalar calculados em pontos de diferentes regiões da placa. Na tabela 3.4.7 são apresentados resultados dos fluxos angulares que entram na fronteira, a partir de valores conhecidos do fluxo escalar em $x = 1, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 4, 4.5$ (cm), correspondentes à primeira região da placa :

Tabela 3.4.7 : Resultados do problema inverso - LTS_8 considerando fluxo escalar conhecido em $x = 1, 1.5, 2, 2.5, 3, 3.5, 4$ e 4.5 (cm)

	P. Inverso	P. Direto
$\psi_1(0)$	1.000008	1.000000
$\psi_2(0)$	0.999994	1.000000
$\psi_3(0)$	1.000003	1.000000
$\psi_4(0)$	0.999997	1.000000
$\psi_5(100)$	0.000000	0.000000
$\psi_6(100)$	0.000000	0.000000
$\psi_7(100)$	0.000000	0.000000
$\psi_8(100)$	1.455×10^{-11}	0.000000

A tabela 3.4.8 a seguir apresenta os resultados obtidos para o problema inverso quando consideramos conhecidos valores do fluxo escalar em pontos próximos as duas fronteiras, no exemplo escolhemos $x = 1, 2, 3, 4$ e $x = 96, 97, 98, 99$ (cm).

Tabela 3.4.8 : Resultados do problema inverso - LTS₈
 considerando fluxo escalar conhecido em
 $x = 1, 2, 3, 4, 96, 97, 98$ e 99 (cm)

	P. Inverso	P. Direto
$\psi_1(0)$	1.089036	1.000000
$\psi_2(0)$	0.933917	1.000000
$\psi_3(0)$	1.088588	1.000000
$\psi_4(0)$	0.736279	1.000000
$\psi_5(100)$	3.492×10^{-10}	0.000000
$\psi_6(100)$	4.365×10^{-11}	0.000000
$\psi_7(100)$	1.451×10^{-11}	0.000000
$\psi_8(100)$	0.000000	0.000000

Considerando os valores do fluxo escalar em $x = 6, 6.5, 7, 7.5, 8, 8.5, 9, 9.5$ (cm), os valores de $\psi_m(0)$, $\mu_m > 0$ e $\psi_m(100)$, $\mu_m < 0$, que correspondem aos fluxos angulares que entram nas fronteiras, obtidos na resolução do problema inverso são mostrados na tabela 3.4.9 :

Tabela 3.4.9 : Resultados do problema inverso - LTS_g
 considerando fluxo escalar conhecido em
 $x = 6, 6.5, 7, 7.5, 8, 8.5, 9$ e 9.5 (cm)

	P. Inverso	P. Direto
$\psi_1(0)$	1.007847	1.000000
$\psi_2(0)$	1.010184	1.000000
$\psi_3(0)$	1.018850	1.000000
$\psi_4(0)$	0.858342	1.000000
$\psi_5(100)$	0.000000	0.000000
$\psi_6(100)$	1.456×10^{-11}	0.000000
$\psi_7(100)$	0.000000	0.000000
$\psi_8(100)$	2.183×10^{-11}	0.000000

Os resultados mostrados na tabela (3.4.9), para pontos mais distantes da fronteira (no caso a segunda região) também foram obtidos mediante o processo de correção citado anteriormente. Com isso também, fica claro a dependência da localização dos pontos, bem como da espessura da placa, na solução do problema inverso.

4. O MÉTODO LTS_N PARA MULTIGRUPO

4.1 Introdução

A equação de transporte de neutrons, considerando-se espalhamento isotrópico, para o caso de multigrupo, pode ser escrita como :

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \underline{\Psi}(x, \mu) + \Sigma \underline{\Psi}(x, \mu) = \Sigma_s \int_{-1}^1 \underline{\Psi}(x, \mu) d\mu \quad (4.1.1)$$

num domínio $x \in [0, L]$ e onde o vetor $\underline{\Psi}(x, \mu)$ tem as componentes : $\Psi_1(x, \mu), \dots, \Psi_G(x, \mu)$; a matriz $\Sigma = \text{diag} \{ \sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_G \}$ tem como elementos as seções de choque total por grupo; a matriz de transferência Σ_s tem como elementos $\sigma_{ij}/2$; x representa a variável espacial. Procuramos uma solução para (4.1.1) sujeita as condições de contorno :

$$\underline{\Psi}(0, \mu) = F(\mu), \quad \mu > 0 \quad (4.1.1a)$$

$$\underline{\Psi}(L, \mu) = G(\mu), \quad \mu < 0 \quad (4.1.1b)$$

onde $F(\mu)$ e $G(\mu)$ são funções conhecidas da variável μ . Para cada grupo $g = 1, \dots, G$ a equação será de forma :

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \psi_g(x, \mu) + \sigma_g \psi_g(x, \mu) = \frac{1}{2} \sum_{j=1}^G \sigma_{gj} \int_{-1}^1 \psi_j(x, \mu) d\mu \quad (4.1.2)$$

e ainda se pode dizer que :

$$\psi_g(0, \mu) = F_g(\mu), \quad \mu > 0 \quad (4.1.2a)$$

$$\psi_g(L, \mu) = G_g(\mu), \quad \mu < 0 \quad (4.1.2b)$$

onde $F_g(\mu)$ e $G_g(\mu)$ são os g -ésimos componentes dos vetores $F(\mu)$ e $G(\mu)$ respectivamente.

Finalmente considerando cada uma das G equações (4.1.2) escritas na forma ordenadas discretas resulta, num sistema linear $(GN \times GN)$:

$$\frac{d}{dx} \psi_{gm}(x) + \frac{\sigma_g}{\mu_m} \psi_{gm}(x) = \frac{1}{2\mu_m} \sum_{j=1}^G \sigma_{gj} \left[\sum_{k=1}^N \psi_{jk}(x) \omega_k \right] \quad (4.1.3)$$

$g = 1, \dots, G, \quad m = 1, \dots, N; \quad N$ par; com as condições de contorno :

$$\psi_{gm}(0) = F_g(\mu_m), \mu_m > 0 \quad (4.1.3a)$$

$$\psi_{gm}(L) = G_g(\mu_m), \mu_m < 0 \quad (4.1.3b)$$

onde $\psi_{gm}(x) = \psi_g(x, \mu_m)$ representa o fluxo angular de neutrons do grupo g na direção μ_m ; μ_m são as raízes do Polinômio de Legendre de N -ésimo grau, ordenados como em (2.1.2); ω_m são os respectivos pesos da quadratura de Gauss e os demais parâmetros como definidos em (4.1.1).

Aplicando a transformada de Laplace em (4.1.3), para $g = 1, \dots, G$, e $m = 1, \dots, N$ obtemos um sistema linear ($GN \times GN$) como em (2.1.6) :

$$A_{GN}(s) \bar{\psi}(s) = F \quad (4.1.4)$$

onde a matriz do sistema, que agora chamamos $A_{GN}(s)$, é da forma :

$$\begin{bmatrix}
 s + \frac{\sigma_1}{\mu_1} - \frac{\sigma_{11}}{2\mu_1} \omega_1 & \dots & -\frac{\sigma_{11}}{2\mu_1} \omega_N & \dots & -\frac{\sigma_{12}}{2\mu_1} \omega_1 & \dots & -\frac{\sigma_{12}}{2\mu_1} \omega_N & \dots & -\frac{\sigma_{1g}}{2\mu_1} \omega_1 & \dots & -\frac{\sigma_{1g}}{2\mu_1} \omega_N \\
 -\frac{\sigma_{11}}{2\mu_N} \omega_1 & \dots & s + \frac{\sigma_1}{\mu_N} - \frac{\sigma_{11}}{2\mu_N} \omega_N & \dots & -\frac{\sigma_{12}}{2\mu_N} \omega_1 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots \\
 -\frac{\sigma_{21}}{2\mu_1} \omega_1 & \dots & -\frac{\sigma_{21}}{2\mu_1} \omega_N & \dots & s + \frac{\sigma_2}{\mu_1} - \frac{\sigma_{22}}{2\mu_1} \omega_1 & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & -\frac{\sigma_{2g}}{2\mu_1} \omega_N \\
 \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots & \dots & \dots & \dots & \dots & \dots & \vdots \\
 -\frac{\sigma_{21}}{2\mu_N} \omega_1 & \dots & -\frac{\sigma_{21}}{2\mu_N} \omega_N & \dots & -\frac{\sigma_{22}}{2\mu_N} \omega_1 & \dots & s + \frac{\sigma_2}{\mu_N} - \frac{\sigma_{22}}{2\mu_N} \omega_N & \dots & \dots & \dots & -\frac{\sigma_{2g}}{2\mu_N} \omega_N \\
 \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots & \dots & \dots & \dots & \vdots \\
 -\frac{\sigma_{g1}}{2\mu_1} \omega_1 & \dots & \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots & \dots & s + \frac{\sigma_g}{\mu_1} - \frac{\sigma_{gg}}{2\mu_1} \omega_1 & \dots & -\frac{\sigma_{gg}}{2\mu_1} \omega_1 \\
 \vdots & \dots & \vdots \\
 -\frac{\sigma_{g1}}{2\mu_N} \omega_1 & \dots & -\frac{\sigma_{g1}}{2\mu_N} \omega_N & \dots & -\frac{\sigma_{g2}}{2\mu_N} \omega_1 & \dots & -\frac{\sigma_{g2}}{2\mu_N} \omega_N & \dots & -\frac{\sigma_{gg}}{2\mu_N} \omega_1 & \dots & s + \frac{\sigma_g}{\mu_N} - \frac{\sigma_{gg}}{2\mu_N} \omega_N
 \end{bmatrix}$$

(4.1.5)

ainda :

$$\bar{\psi}(s) = \begin{bmatrix} \bar{\psi}_{11}(s) \\ \vdots \\ \bar{\psi}_{1N}(s) \\ \vdots \\ \bar{\psi}_{g1}(s) \\ \vdots \\ \bar{\psi}_{gN}(s) \end{bmatrix} \tag{4.1.6}$$

$$F = \begin{bmatrix} \psi_{11}(0) \\ \vdots \\ \psi_{1N}(0) \\ \vdots \\ \psi_{G1}(0) \\ \vdots \\ \psi_{GN}(0) \end{bmatrix} \quad (4.1.7)$$

Como no caso de um grupo, descrito no capítulo 2, uma vez conhecida a matriz inversa da matriz $A_{GN}(s)$, que denotaremos por $A_{GN}^{-1}(s)$, por (4.1.4) $\bar{\psi}(s)$ será :

$$\bar{\psi}(s) = A_{GN}^{-1}(s) F \quad (4.1.8)$$

e então aplicando-se a transformada inversa de Laplace (denotada por \mathcal{L}^{-1}) em (4.1.8) resulta na seguinte expressão [6] :

$$\psi(x) = \mathcal{L}^{-1} \{ A_{GN}^{-1}(s) F \} \quad (4.1.8)$$

que difere do caso de um grupo pelo fato de estarmos aqui trabalhando com a matriz $A_{GN}^{-1}(s)$. Ou seja, todo o procedimento para o caso de um grupo é repetido e o fluxo angular apresenta uma formulação idêntica, com a diferença que o sistema linear nesse

caso é de ordem $(GN \times GN)$. Cabe ainda ressaltar que o problema não homogêneo, isto é, com fonte, é de maneira análoga obtido pela convolução do fluxo angular homogêneo com o produto $[A_{GN}^{-1}(s)M]$, motivo pelo qual não foi aqui considerado.

A matriz $A_{GN}(s)$, como podemos observar em (4.1.5) apresenta a mesma estrutura da matriz para o caso de um grupo, dada em (2.1.7). No entanto, algumas modificações devem ser consideradas no cálculo da inversa, em relação ao problema de um grupo. Ou seja, além de outros recursos já citados em 2.1 para inversão da matriz $A_{GN}(s)$, cujos elementos dependem do parâmetro s , uma formulação própria da sua inversa será apresentada. Essa formulação parte do mesmo princípio usado para o cálculo de $A_N^{-1}(s)$, matriz para o caso de um grupo, diferindo apenas por alguns termos que devem ser considerados. A determinação de $A_{GN}^{-1}(s)$ será tratada na seção a seguir.

4.2 Inversão da matriz $A_{GN}(s)$

A estrutura da matriz $A_{GN}(s)$ dada em (4.1.5) é análoga à da matriz $A_N(s)$ que caracteriza os problemas de um grupo, dada em (2.1.7), ressaltando-se que agora estamos trabalhando com o caso isotrópico, que corresponderia a considerarmos $\sigma_{s1} = 0$ em (2.1.7). Para tal consideramos a decomposição segundo as colunas, que segue:

$$A_{GN}(s) = (E_1 + D_1, \dots, E_j + D_j, \dots, E_{GN} + D_{GN}) \quad (4.2.1)$$

Como no caso da matriz $A_N(s)$, referente a problemas de um grupo, o determinante de $A_{GN}(s)$ será calculado a partir da soma de determinantes de matrizes menores, ressaltando-se apenas que agora os termos do tipo :

$$\det(E_1, \dots, D_i, D_j, \dots, E_N) \quad (4.2.2)$$

só serão nulos quando $i-j < N$. Ou seja, em cada conjunto de N colunas persiste a proporcionalidade entre elas, o que anula determinantes como em (4.2.2), mas entre conjuntos de N colunas essa proporcionalidade não é mantida. Assim, quando $i-j > N$ os termos (4.2.2) devem ser acrescentados à formulação (2.2.7) para cálculo do determinante de $A_{GN}(s)$. Nisso reside a diferença entre a formulação obtida para a inversa da matriz $A_N(s)$, associada a problemas de um grupo, e a matriz $A_{GN}(s)$, associada a problemas de multigrupo segundo o método LTS_N . Sendo assim resulta que :

$$\det A_{GN}(s) = \prod_{k=1}^{GN} \left(s + \frac{\sigma_T}{\mu_k} \right) - \sum_{k=1}^{GN} H_k \prod_{\substack{l=1 \\ l \neq k}}^{GN} \left(s + \frac{\sigma_T}{\mu_l} \right)$$

$$+ \sum_{p=0}^{N-2} \left(\sum_{k=pN+1}^{(p+1)N} \sum_{l=(p+1)N+1}^{GN} [H_k H_l - a_{lk} a_{kl}] \right) \prod_{\substack{m=1 \\ m \neq k, l}}^{GN} \left(s + \frac{\sigma_T}{\mu_m} \right)$$

(4.2.3)

onde se observa que apenas o último termo da direita difere da formulação obtida para o caso de um grupo dada em (2.2.7) se considerarmos o caso isotrópico. Aqui, a_{ij} , $i, j = 1, \dots, GN$, são os próprios elementos da matriz $A_{GN}(s)$ e o parâmetro H_l é agora definido como :

$$H_l = \sigma_{gg} \frac{\omega_l}{2\mu_l}; \quad g = 1, \dots, G; \quad l = 1, \dots, N \quad (4.2.4)$$

Diretamente de (4.2.3) obtém-se os cofatores de $A_{GN}(s)$ quando $i=j$:

$$A_{ij}^G = \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i}}^{GN} \left(s + \frac{G_T}{\mu_k} \right) - \sum_{k=1}^{GN} H_k \prod_{\substack{l=1 \\ l \neq i, k}}^{GN} \left(s + \frac{G_T}{\mu_l} \right) \\ + \sum_{p=0}^{N-2} \left\{ \sum_{\substack{k=pN+1 \\ k \neq i}}^{(p+1)N} \sum_{\substack{l=(p+1)N+1 \\ l \neq i}}^{GN} [H_k H_l - a_{lk} a_{kl}] \prod_{\substack{m=1 \\ m \neq i, k, l}}^{GN} \left(s + \frac{G_T}{\mu_m} \right) \right\} \quad (4.2.5)$$

Quando $i \neq j$ os cofatores são dados por :

$$A_{ij}^G = a_{ij} \prod_{\substack{k=1 \\ k \neq i, j}}^{GN} \left(s + \frac{G_T}{\mu_k} \right) - a_{ij} \sum_{l=1}^{GN} H_l \prod_{\substack{m=1 \\ m \neq i, j, l}}^{GN} \left(s + \frac{G_T}{\mu_m} \right) \\ + \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq i, j}}^{GN} a_{il} a_{lj} \prod_{\substack{m=1 \\ m \neq i, j, l}}^{GN} \left(s + \frac{G_T}{\mu_m} \right) \quad (4.2.6)$$

considerando-se ainda o fato que os últimos dois termos da direita direita de (4.2.6) se anulam quando $i-j < N$.

Finalmente a matriz inversa da matriz $A_{GN}(s)$ é escrita como :

$$A_{GN}^{-1}(s) = \frac{s^{GN-1} P_{GN-1} + s^{GN-2} P_{GN-2} + \dots + s P_1 + P_0}{\det A_{GN}(s)} \quad (4.2.7)$$

onde as matrizes P_i ($i = 0, \dots, GN - 1$) são tais que :

$$P_{GN-1} = I_{GN} \quad (4.2.8)$$

I_{GN} é a matriz identidade de ordem GN e os elementos da matriz P_{GN-k-1} ($k = 1, \dots, GN - 1$) são dados por :

$$P_{ij}^{(GN-k-1)} = \sum_{\substack{m=1 \\ m \neq i}}^{GN} \prod_{\substack{l=1 \\ l \neq i}}^{GN} \left(\frac{\sigma_T}{H_m} \right) - \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq i}}^{GN} H_l S_k + \\ + (1 - \delta_{ik}) \sum_{p=0}^{N-2} \left(\sum_{\substack{k=pN+1 \\ k \neq i}}^{(p+1)N} \sum_{\substack{l=(p+1)N+1 \\ l \neq i}}^{GN} [H_k H_l - a_{lk} a_{kl}] T_k \right) \quad (4.2.9)$$

para $i = j$; δ_{ik} é o delta de Kroenecker; S_k e T_k são definidos como em (2.2.12a), com $\sigma_T = \sigma_{gg}$. Para $i \neq j$ os elementos das

matrizes P_{GN-k-1} ($k = 1, \dots, N-1$) são :

$$p_{ij}^{(GN-k-1)} = a_{ij} Y_k - \sum_{\substack{l=1 \\ l \neq i, j}}^{GN} [a_{il} H_l - a_{lj}] Z_k \quad (4.2.10)$$

onde Y_k e Z_k são definidos como em (2.2.15a), com $\sigma_T = \sigma_{gg}$. É preciso ressaltar que para cada valor de $g = 1, \dots, G$ devemos variar l de 1 até N . Ou seja, para LTS_4 o parâmetro $H_5 = \sigma_{22} \omega_1 / 2\mu_1$. Resumidamente, podemos considerar que os elementos da diagonal principal de $A_{GN}(s)$ são da forma $(s + (\sigma_T/\mu_m) - H_m)$, sendo que para cada N linhas, o valor de σ_T é referente a apenas um grupo e o valor de m varia de 1 até N . Em resumo, a formulação LTS_N aplicada a problemas de multigrupo gera um sistema linear no qual a inversa da matriz do sistema é calculada a partir da matriz gerada para o caso de um grupo com modificações que foram apresentadas nessa seção, decorrentes do acréscimo de termos do tipo (4.2.2).

4.3 A formulação LTS_N para multigrupo

Como no capítulo 2, referente à aplicação da formulação LTS_N a problemas de um grupo, a partir da determinação de $A_{GN}^{-1}(s)$ (apresentada em 4.2), podemos dizer que :

$$\bar{\psi}(s) = A_{GN}^{-1}(s) F \quad (4.3.1)$$

ou então :

$$\psi(x) = \sum_{k=1}^{GN} \alpha_k e^{s_k x} \quad (4.3.2)$$

onde :

$$\alpha_k = \left[\frac{s_k^{GN-1} P_{GN-1} + \dots + s_k P_1 + P_0}{\frac{d}{ds} [\det A_{GN}(s)]_{s=s_k}} \right] F = \mathcal{P}_{GK} F \quad (4.3.3)$$

é uma matriz de ordem $GN \times 1$, as matrizes P_i ($i = 0, \dots, GN-1$) foram definidas na seção 4.2 , o vetor F é dado em (4.1.7) e s_k são as raízes do determinante de $A_{GN}(s)$. Ainda se pode dizer que :

$$\psi(x) = B F \quad (4.3.4)$$

onde os elementos da matriz B de ordem $(GN \times GN)$ são do tipo :

$$b_{ij}(x) = \sum_{k=1}^{GN} p_{gk}(i, j) e^{s_k x} \quad (4.3.5)$$

exatamente como no caso dos problemas de um grupo.

Em relação ao vetor F temos que as componentes $\psi_{gm}(0)$, $g = 1, \dots, G$, $m = N/2 + 1, \dots, N$ são desconhecidas, ou seja, em cada grupo somente as $N/2$ primeiras componentes do fluxo angular são conhecidas. As condições (4.1.3b), correspondentes aos valores do fluxo angular em $x = L$ para cada grupo, serão usadas para determinação desses valores desconhecidos. O sistema de ordem $(GN/2 \times GN/2)$ a ser resolvido será :

$$\begin{bmatrix} b_{N2, N2} & \dots & b_{N2, N} & \dots & b_{N2, GN2} & \dots & b_{N2, GN} \\ \vdots & & & & & & \\ b_{N, N2} & \dots & b_{N, N} & \dots & b_{N, GN2} & \dots & b_{N, GN} \\ \vdots & & & & & & \\ b_{GN2, N2} & \dots & b_{GN2, N} & \dots & b_{GN2, GN2} & \dots & b_{GN2, GN} \\ \vdots & & & & & & \\ b_{GN, N2} & \dots & b_{GN, N} & \dots & b_{GN, GN2} & \dots & b_{GN, GN} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{N2}(0) \\ \vdots \\ \psi_N(0) \\ \vdots \\ \psi_{GN2}(0) \\ \vdots \\ \psi_{GN}(0) \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} \psi_{N2}(L) \\ \vdots \\ \psi_{NN}(L) \\ \vdots \\ \psi_{G2}(L) \\ \vdots \\ \psi_{GN}(L) \end{bmatrix} -$$

$$\begin{bmatrix} b_{N2, 1} & \dots & b_{N2, N/2} & \dots & b_{N2, G1} & \dots & b_{N2, GN/2} \\ \vdots & & & & & & \\ b_{N, 1} & \dots & b_{N, N/2} & \dots & b_{N, G1} & \dots & b_{N, GN/2} \\ \vdots & & & & & & \\ b_{GN2, 1} & \dots & b_{GN2, N} & \dots & b_{GN2, G1} & \dots & b_{GN2, GN/2} \\ \vdots & & & & & & \\ b_{GN, 1} & \dots & b_{GN, N} & \dots & b_{GN, G1} & \dots & b_{GN, GN/2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \psi_{11}(0) \\ \vdots \\ \psi_{1N/2}(0) \\ \vdots \\ \psi_{G1}(0) \\ \vdots \\ \psi_{GN/2}(0) \end{bmatrix}$$

(4.3.6)

onde $N_2 = N/2 + 1$ e $GN_2 = GN/2 + 1$.

Então, uma solução analítica, que denotamos por LTS_N , dada por (4.3.2) é obtida para o problema (4.1.1), sendo que a determinação dos valores de $\psi_{gm}(0)$, $g = 1, \dots, G$, $m = N/2 + 1, \dots, N$ é dada pela solução do sistema (4.3.6).

Cabe salientar que o tratamento de problemas anisotrópicos poderá ser feito segundo o mesmo procedimento apresentado nesse capítulo, considerando-se apenas, como no caso de um grupo, as devidas alterações na matriz.

5. APLICAÇÃO A PROBLEMAS DE DOIS GRUPOS DE ENERGIA

5.1 Procedimento

Vamos considerar a equação de transporte de neutrons (4.1.1) escrita como :

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \psi(x, \mu) + \Sigma \psi(x, \mu) = \Sigma_s \int_{-1}^1 \psi(x, \mu') d\mu' \quad (5.1.1)$$

para o caso de dois grupos de energia onde a variável espacial x é medida em termos de livre caminho médio relativo ao grupo rápido. Nós assumimos que a matriz espalhamento Σ_s não é diagonal nem triangular e que Σ_s é uma matriz não singular. Introduzimos uma matriz Q definida como :

$$Q = \begin{bmatrix} (\Sigma_{s21} / \Sigma_{s12})^{1/2} & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad (5.1.2)$$

onde $\Sigma_{ij} = \sigma_{ij} / 2\sigma_2$ são os elementos da matriz Σ_s . Então a solução de (5.1.1) é dada por :

$$\psi(x, \mu) = Q^{-1} I(x, \mu) \quad (5.1.3)$$

onde $I(x, \mu)$ é a solução de

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} I(x, \mu) + \Sigma I(x, \mu) = C \int_{-1}^1 I(x, \mu') d\mu' \quad (5.1.4)$$

com a matriz de espalhamento, que foi simetrizada, é dada por $C = Q \Sigma_s Q^{-1}$ e os elementos de Σ sendo $\Sigma_{11} = \sigma = \sigma_1/\sigma_2$, $\Sigma_{12} = \Sigma_{21} = 0$ e $\Sigma_{22} = 1$.

A equação de transporte descrita pela equação (5.1.1) foi resolvida por Ishiguro e Garcia [13] usando o método de Case. Nesta seção resolvemos esse mesmo problema aplicando a formulação LTS_N para multigrupo, apresentada na seção anterior. Para tal, a equação (5.1.4) é discretizada como:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dx} I_1(x, \mu_m) + \frac{\sigma}{\mu_m} I_1(x, \mu_m) &= \frac{C_{11}}{\mu_m} \sum_{k=1}^N I_1(x, \mu_k) \omega_k + \frac{C_{12}}{\mu_m} \sum_{k=1}^N I_2(x, \mu_k) \omega_k \\ \frac{d}{dx} I_2(x, \mu_m) + \frac{1}{\mu_m} I_2(x, \mu_m) &= \frac{C_{21}}{\mu_m} \sum_{k=1}^N I_1(x, \mu_k) \omega_k + \frac{C_{22}}{\mu_m} \sum_{k=1}^N I_2(x, \mu_k) \omega_k \end{aligned} \quad (5.1.5)$$

onde $I_g(x, \mu_m)$; $g = 1, 2$, $m = 1, \dots, N$ representa o fluxo angular no grupo g na direção μ_m . A aplicação do método LTS_N nesse caso, gera um sistema de $2N$ equações, cuja solução transformada é obtida

como (4.3.1) e o vetor fluxo angular como em (4.3.4):

$$\begin{bmatrix} I_1(x, \mu_1) \\ \vdots \\ I_1(x, \mu_N) \\ I_2(x, \mu_1) \\ \vdots \\ I_2(x, \mu_N) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} b_{11}(x) & \dots & b_{1(2N)}(x) \\ \vdots & & \vdots \\ \vdots & & \vdots \\ b_{(2N)}(x) & \dots & b_{(2N)(2N)}(x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_1(0, \mu_1) \\ \vdots \\ I_1(0, \mu_N) \\ I_2(0, \mu_1) \\ \vdots \\ I_2(0, \mu_N) \end{bmatrix} \quad (5.1.6)$$

Os elementos $b_{ij}(x)$ são definidos em (4.3.5). No vetor F as incógnitas a serem determinadas serão $I_g(0, \mu_i)$ para $g = 1, 2$ e $i = N/2 + 1, \dots, N$. A determinação das incógnitas em (5.1.6) será feita a partir da aplicação da condição de contorno ainda não utilizada.

Nós consideramos o problema de uma placa de espessura a_1 , considerada como meio 1 ($0 \leq x \leq a_1$) adjacente a outra de espessura a_2 , considerada como meio 2. ($a_1 \leq x \leq \gamma$, $\gamma = a_1 + a_2$) irradiada na superfície $x = 0$ por um fluxo de neutrons $f(\mu)$ $0 < \mu < 1$, sujeita as condições :

$$I_1(0, \mu) = P_1 f(\mu), \quad \mu > 0 \quad (5.1.7)$$

$$I_2(\gamma, \mu) = 0, \quad \mu < 0 \quad (5.1.8)$$

e

$$I_1(a_1, \mu) = G I_2(a_1, \mu), \quad \mu \in (-1, 1) \quad (5.1.9)$$

devidamente ajustadas para o caso de ordenadas discretas. Consideramos $a_1 = a_2 = 1$ e assumimos que os grupos são ordenados da mesma forma para ambos os meios e que a matriz G é uma matriz diagonal dada por $G = Q_1 Q_2^{-1}$, sendo a matriz Q_i referida ao meio i ($i = 1, 2$). Chamando os elementos da matriz G de g_{ij} , o sistema das condições de contorno a ser resolvido será formado a partir das equações :

$$I_1^1(a_1, \mu_m) = g_{11} I_1^2(a_1, \mu_m), \quad m = 1, \dots, N$$

$$I_2^1(a_1, \mu_m) = I_2^2(a_1, \mu_m), \quad m = 1, \dots, N$$

(5.1.10)

$$I_1^2(\gamma, \mu_m) = 0, \quad m = N/2 + 1, \dots, N$$

$$I_2^2(\gamma, \mu_m) = 0, \quad m = N/2 + 1, \dots, N$$

sendo $I_g^j(x, \mu_m)$ o fluxo angular do grupo g ($g = 1, 2$) na direção μ_m ($m = 1, \dots, N$) no meio j ($j = 1, 2$). Esse sistema resulta da aplicação das condições de contorno e de (5.1.9) na interface. Em cada meio o fluxo angular é dado por (5.1.6). Na verdade teremos $GN/2$ incógnitas na fronteira $x = 0$ e GN incógnitas na interface $x = a_1$.

5.2 Resultados

Nós consideramos dois casos para o fluxo incidente.

$$1^{\circ} \text{ caso : } \begin{cases} f_1(\mu_m) = 0, \mu_m > 0 \\ f_2(\mu_m) = 2, \mu_m \geq 0 \end{cases} \quad (5.2.1)$$

$$2^{\circ} \text{ caso : } \begin{cases} f_1(\mu_m) = 0, \mu_m > 0 \\ f_2(\mu_m) = 3\mu_m, \mu_m > 0 \end{cases} \quad (5.2.2)$$

com f_g , $g = 1, 2$ representando o fluxo incidente para o grupo g .

O fluxo escalar em cada grupo foi calculado como :

$$\begin{bmatrix} \phi_1(x) \\ \phi_2(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \sum_{k=1}^N \psi_{1k}(x) \omega_k \\ \sum_{k=1}^N \psi_{2k}(x) \omega_k \end{bmatrix} \quad (5.2.3)$$

Lembrando que ψ_{gk} , $g = 1, 2$, $k = 1, \dots, N$ está relacionada com I_{gk} , $g = 1, 2$, $k = 1, \dots, N$, por (5.1.3). Os valores dos parâmetros utilizados na resolução desse problema, para ambos os meios são apresentados na tabela 5.2.1 a seguir:

Tabela 5.2.1 : Problema de dois meios a dois grupos :
seções de choque em cada meio

	Meio 1	Meio 2
σ_1	2.9865	2.9664
σ_2	0.88798	0.88731
σ_{11}	2.9676	2.8876
σ_{12}	0.04749	0.04588
σ_{21}	0.000336	0.00106
σ_{22}	0.83975	0.83912

Para efeito de comparação com os resultados apresentados na referência [13], o fluxo escalar do grupo 1 foi calculado para os dois casos de fluxo incidente (5.2.1) e (5.2.2). Em cada caso foram considerados dois procedimentos, ou seja, o problema foi resolvido considerando-se primeiramente o conjunto de dados do meio 1 e depois do meio 2, para o caso 1. Depois o mesmo problema foi resolvido invertendo-se a ordem do conjunto de dados. Também o caso 2 foi assim tratado.

Na tabela (5.2.2) são apresentados os resultados obtidos para o fluxo escalar do grupo 1 segundo a aproximação LTS_2 na solução do problema (5.1.1) com fluxo incidente (5.2.1), ou seja, o caso 1. Os resultados são comparados com os obtidos pelo método de Case [13].

Tabela 5.2.2 : Problema de duas placas : fluxo escalar
do grupo 1 aproximação LTS_2 - caso 1 :

	LTS_2	Exato	LTS_2	Exato
x	$\phi_1(x)^a$	$\phi_1(x)^a$	$\phi_1(x)^b$	$\phi_1(x)^b$
0.0	0.16623	0.16816	0.14524	0.14545
0.2	0.32876	0.36402	0.28609	0.31225
0.4	0.43423	0.46469	0.37947	0.39937
0.6	0.48983	0.51356	0.43477	0.44804
0.8	0.50199	0.52003	0.45970	0.46878
1.0	0.47643	0.48805	0.46057	0.47039
1.2	0.42546	0.43299	0.43567	0.44800
1.4	0.35930	0.36714	0.38295	0.39637
1.6	0.28031	0.28974	0.30688	0.32156
1.8	0.19025	0.20071	0.21175	0.22618
2.0	0.09031	0.08688	0.10073	0.09781

$\phi_1(x)^a$: dados 1 - dados 2

$\phi_1(x)^b$: dados 2 - dados 1

Ainda segundo a aproximação LTS_2 os resultados obtidos agora para o caso do fluxo incidente (5.2.2), caso 2, são mostrados na tabela 5.2.3 e comparados com [13] :

Tabela 5.2.3 : Problema de duas placas : fluxo escalar
do grupo 1 aproximação LTS_2 - caso 2 :

	LTS_2	Exato	LTS_2	Exato
x	$\phi_1(x)^a$	$\phi_1(x)^a$	$\phi_1(x)^b$	$\phi_1(x)^b$
0.0	0.14396	0.16266	0.12578	0.14054
0.2	0.28471	0.35678	0.24776	0.30612
0.4	0.37605	0.46118	0.32863	0.39702
0.6	0.42421	0.51434	0.37652	0.44991
0.8	0.43473	0.52444	0.39812	0.47433
1.0	0.41260	0.49492	0.39887	0.47875
1.2	0.36846	0.44108	0.37730	0.45801
1.4	0.31116	0.37541	0.33164	0.40663
1.6	0.24276	0.29716	0.26576	0.33078
1.8	0.16476	0.20633	0.18321	0.23313
2.0	0.07821	0.08939	0.08724	0.10089

$\phi_1(x)^a$: dados 1 - dados 2

$\phi_1(x)^b$: dados 2 - dados 1

As tabelas 5.2.4 e 5.2.5 a seguir apresentam os resultados obtidos com a aproximação LTS_4 para o problema (5.1.1) considerando-se os casos (5.2.1) e 5.2.2) para o fluxo incidente, respectivamente :

Tabela 5.2.4 : Problema de duas placas : fluxo escalar
do grupo 1 aproximação LTS_4 - caso 1 :

	LTS_4	Exato	LTS_4	Exato
x	$\phi_1(x)^a$	$\phi_1(x)^a$	$\phi_1(x)^b$	$\phi_1(x)^b$
0.0	0.16922	0.16816	0.14643	0.14545
0.2	0.32400	0.36402	0.30913	0.31225
0.4	0.46558	0.46469	0.40043	0.39937
0.6	0.51539	0.51356	0.44979	0.44804
0.8	0.52129	0.52003	0.47027	0.46878
1.0	0.48883	0.48805	0.47076	0.47039
1.2	0.43308	0.43299	0.44713	0.44800
1.4	0.36607	0.36714	0.39471	0.39637
1.6	0.28760	0.28974	0.31876	0.32156
1.8	0.19760	0.20071	0.22135	0.22618
2.0	0.08686	0.08688	0.09766	0.09781

$\phi_1(x)^a$: dados 1 - dados 2

$\phi_1(x)^b$: dados 2 - dados 1

Tabela 5.2.5 : Problema de duas placas : fluxo escalar
do grupo 1 aproximação LTS_4 - caso 2 :

	LTS_4	Exato	LTS_4	Exato
x	$\phi_1(x)^a$	$\phi_1(x)^a$	$\phi_1(x)^b$	$\phi_1(x)^b$
0.0	0.15604	0.16266	0.13497	0.14054
0.2	0.33521	0.35678	0.28802	0.30612
0.4	0.43935	0.46118	0.37869	0.39702
0.6	0.49195	0.51434	0.43084	0.44991
0.8	0.50231	0.52444	0.45519	0.47433
1.0	0.47475	0.49492	0.45949	0.47875
1.2	0.42340	0.44108	0.43931	0.45801
1.4	0.35987	0.37541	0.38981	0.40663
1.6	0.28399	0.29716	0.31606	0.33078
1.8	0.19494	0.20633	0.22011	0.23313
2.0	0.08617	0.08939	0.09723	0.10089

$\phi_1(x)^a$: dados 1 - dados 2

$\phi_1(x)^b$: dados 2 - dados 1

Os resultados obtidos pela aproximação LTS_8 , para os casos (5.2.1) e (5.2.2) de fluxo incidente, respectivamente, são comparados com os resultados de Ishiguro e Garcia [13] nas tabelas 5.2.6 e 5.2.7 a seguir :

Tabela 5.2.6 : Problema de duas placas : fluxo escalar
do grupo 1 aproximação LTS_8 - caso 1 :

	LTS_8	Exato	LTS_8	Exato
x	$\phi_1(x)^a$	$\phi_1(x)^a$	$\phi_1(x)^b$	$\phi_1(x)^b$
0.0	0.16849	0.16816	0.14576	0.14545
0.2	0.36424	0.36402	0.31253	0.31225
0.4	0.46484	0.46469	0.39955	0.39937
0.6	0.51358	0.51356	0.44805	0.44804
0.8	0.51999	0.52003	0.46868	0.46878
1.0	0.48791	0.48805	0.47019	0.47039
1.2	0.43272	0.43299	0.44768	0.44800
1.4	0.36676	0.36714	0.39587	0.39637
1.6	0.28923	0.28974	0.32091	0.32156
1.8	0.20008	0.20071	0.22541	0.22618
2.0	0.08678	0.08688	0.09767	0.09781

$\phi_1(x)^a$: dados 1 - dados 2
 $\phi_1(x)^b$: dados 2 - dados 1

Tabela 5.2.7 : Problema de duas placas : fluxo escalar
do grupo 1 aproximação LTS_8 - caso 2 :

	LTS_8	Exato	LTS_8	Exato
x	$\phi_1(x)^a$	$\phi_1(x)^a$	$\phi_1(x)^b$	$\phi_1(x)^b$
0.0	0.16101	0.16266	0.13912	0.14545
0.2	0.35283	0.35678	0.30280	0.31225
0.4	0.45704	0.46118	0.39356	0.39937
0.6	0.51034	0.51434	0.44654	0.44804
0.8	0.52076	0.52444	0.47109	0.46878
1.0	0.49158	0.49492	0.47562	0.47039
1.2	0.43809	0.44108	0.45501	0.44800
1.4	0.37277	0.37541	0.40381	0.39637
1.6	0.29490	0.29716	0.32826	0.32156
1.8	0.20449	0.20633	0.23104	0.22618
2.0	0.08876	0.08939	0.10019	0.09781

$\phi_1(x)^a$: dados 1 - dados 2

$\phi_1(x)^b$: dados 2 - dados 1

A análise das tabelas anteriores mostra muito bons resultados para o problema de multigrupo resolvido, para os dois casos considerados. Quando o fluxo incidente considerado é constante obtemos resultados melhores, incluindo a aproximação LTS_2 , quando comparados com o caso de fluxo incidente variável com μ . No entanto, mesmo nesse caso, verificamos uma redução do erro de 20% da formulação LTS_2 para 1% devido à LTS_8 .

6. CONCLUSÃO

Os resultados obtidos pela aplicação da formulação analítica LTS_N , proposta nesse trabalho, a problemas de ordenadas discretas unidimensionais, apresentaram uma boa comparação aos disponíveis na literatura. Problemas em domínios finitos apresentaram melhores resultados, tanto para um grupo de neutrons como multigrupo, que os de domínio semi-infinito, para as aproximações $N = 2, 4$ e 8 . A razão disso, reside no fato que o coeficiente de albedo é descrito em forma integral, o que necessita uma aproximação de maior ordem do método para obtenção de melhores resultados. Além disso, a possibilidade de solução do problema do tipo inverso, como aqui foi caracterizado, estabelece opções de novas aplicações do método. Ainda, a parte numérica da formulação podemos dizer que se concentra nos aspectos de solução de sistemas lineares e determinação de raízes de polinômios, que vem sendo cada vez mais estudados e novos recursos apresentados. Devemos salientar que a formulação não apresenta aspectos matemáticos complicados e nem requer um esforço computacional muito grande, visto que, como já foi dito na introdução, todo o trabalho foi executado em um microcomputador do tipo 386. Além disso o tempo computacional só começa a ser significativo para problemas correspondentes a aproximações de ordem 16. A redução no tempo e principalmente na capacidade computacional exigidos, parece bastante relacionada ao fato do

cálculo da matriz inversa do sistema gerado pela aplicação da transformada de Laplace ser feito analiticamente. Cabe ainda salientar que também na solução do problema de criticalidade esse método apresentou bons resultados [21].

Apesar dos problemas aqui apresentados serem restritos à anisotropia linear, a generalização desse procedimento para problemas com anisotropia de grau L está sendo elaborada.

Problemas bidimensionais também já estão sendo estudados. Um problema S_N bidimensional é tratado como um sistema de duas equações S_N unidimensionais [18], sendo que cada uma dessas equações é resolvida usando-se a formulação LTS_N unidimensional.

Finalmente, acreditamos que problemas não lineares possam ser abordados, por essa formulação, usando o método proposto por Adomian [1], uma vez que a idéia desse método consiste no fato que uma solução em forma fechada para problemas não lineares pode ser encontrada quando uma forma explícita é conhecida para a inversão da parte linear do operador.

Assim sendo, face a simplicidade do método proposto, proveniente de sua característica analítica e a possibilidade de generalizações acima discutidas, vislumbramos que esse procedimento poderá ter uma aplicação abrangente em problemas de transporte de neutrons e radiação.

7. REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

1. ADOMIAN, G. Analytic solutions for nonlinear equations. Applied Mathematics and Computation, v.26, p.77-88, 1988.
2. ALCOUFFE, R. E. A diffusion-accelerated S_N transport method for radiation transport on a general quadrilateral mesh. Nuclear Science and Engineering, v.105, p.191-197, June 1990.
3. BADRUZZAMAN, Ahmed, FAN, Wesley C. Discrete ordinates methods for radiation transport. In: A review of nuclear computational methods and their applications, p.332-335.
4. BAKER, R. S., MONAHAN, S. P., ZHANG, H.B. An application of Chandrasekhar's method to the energy-dependent neutron transport equation in a semi-infinite medium. In: Methods in particle transport and thermal hydraulics. [S.l: s.n.,198-] p.158-160.
5. BARICHELLO, L.B., VILHENA, M.T. Analytical solution of the inverse problem for radiotherapy planning. In: CONGRESSO NACIONAL DE MATEMÁTICA APLICADA E COMPUTACIONAL, 14., Nova Friburgo, RJ, 1991. Resumo dos Trabalhos. Rio de Janeiro: SBMAC, 1991. p.107.
6. _____. Solução Analítica do problema de multigrupo de ordenada discreta unidimensional. In: CONGRESSO GERAL DE ENERGIA NUCLEAR, 4., Rio de Janeiro, 1992. Anais ...Rio de Janeiro: Associação Brasileira de Energia Nuclear e Furnas Centrais Elétricas, 1992. p.409-411.

7. CHANDRASEKHAR, S. Radiative Transfer. New York: Dover, 1960. 393p.
8. DASGUPTA, S.R., BISHNU, S.K. Exact solution of transport equation in finite multiplying media. Astrophysics and Space Science. v.74, p.131-147, 1981.
9. DE BARROS, Ricardo C., LARSEN, Edward W. A numerical method for one-group slab-geometry discrete ordinates problems with no spatial truncation error. Nuclear Science and Engineering, v.104, p.199-208, 1990.
10. GARCIA, R.D.M. A review of the facile (F_N) method in particle transport theory. Transport Theory and Statistical Physics, v.14, n.4, p.391-435, 1985.
11. GRANDJEAN, P., SIEWERT, C.E. The F_N method in neutron-transport theory. Part II: Applications and numerical results. Nuclear Science and Engineering, v. 69, p.161-168, 1979.
12. HAGHIGHAT, A. Angular parallelization of a curvilinear S_N transport theory method. Nuclear Science and Engineering, v.108, p.267-277, 1991.
13. ISHIGURO, Yuji, GARCIA, Roberto D.M. Two-media problems in two-group neutron transport theory. Nuclear Science and Engineering, v.68, p.99-110, 1978. Reprint Technical Note.
14. ITO, S. A new method for analysis of pulsed fast neutron experiments. Nuclear Science and Engineering, v.49, p.548-467, 1972.
15. KUŠČER, I., ZWEIFEL, P.F. Time-dependent one-speed albedo problem for a semi-infinite medium. Journal of Mathematical Physics, v.6, p.1125-1130, 1965.

16. LARSEN, Edward W. Spectral analysis of numerical methods for discrete-ordinates problems. I. Transport Theory and Statistical Physics, v.15, n.1/2, p.93-116, 1986.
17. LARSEN, E.W., MILLER Jr., W.F. Convergence notes of spatial difference equations for the discrete-ordinates neutron transport equations in slab geometry. Nuclear Science and Engineering, v.73, p.76-83, 1980.
18. LAWRENCE, R.D. Progress in nodal methods for the solution of the neutron diffusion and transport equations. Progress in Nuclear Energy, v.17, p.271- , 1986.
19. MILLER Jr., W.F. An analysis of the finite differential, even-parity, discrete ordinate equations in slab geometry. Nuclear Science and Engineering, v.108, p.247-266, 1991.
20. MOREL, J.E., LARSEN, Edward W. A multiple balance approach for differencing the S_N equations. Nuclear Science and Engineering, v.106, p.1-15, May 1990.
21. SARAIVA, Luís Edson. Estudo de criticalidade da placa plana por métodos analíticos de solução das aproximações P_N e S_N da equação do transporte. Porto Alegre: PROMEC, 1992. Dissertação (Mestrado em Engenharia)-Escola de Engenharia, UFRGS.
22. SIEWERT, C.E., BENOIST, P. The F_N method in neutron-transport theory. Part I: Theory and applications. Nuclear Science and Engineering, v.69, p.156-160, 1979.
23. STROUD, A.H., SECREST, D. Gaussian Quadrature Formulas. New York: Prentice Hall Inc., 1986.
24. TRASKA, Z. An efficient algorithm partial fraction expansion of the linear matrix penal inverse. Journal of the Franklin

Institute. v.324, n.3, p.465-477, 1987.

25. VELHO, Haroldo Fraga de Campos. Resolução do problema de Milne por transformada de Laplace com inversão numérica. Porto Alegre: PROMEC, 1988. 46p. Dissertação (Mestrado em Engenharia)-Escola de Engenharia, UFRGS.
26. VILHENA, M.T., BARICHELLO, L.B. A new analytical approach to solve the neutron transport equation. Kerntechnik. v.56, n.5, p.334-336, 1991.

A1. LTS_N COM INVERSÃO NUMÉRICA

Como foi ressaltado no capítulo 2 e no capítulo 4, a aplicação da formulação LTS_N gera um sistema linear cuja matriz é dependente do parâmetro complexo s . Para o caso de um grupo e também para multigrupo, viabilizamos a solução analítica desse sistema através de formulação para a inversão dessa matriz. No entanto um outro recurso pode ser apresentado : inverter-se numericamente o sistema, também através de quadratura de Gauss [23], para determinação de $\psi_m(x)$:

$$\psi_m(x) = \sum_{k=1}^{M1} A_k \left(\frac{p_k}{x} \right) \bar{\psi}_m \left(\frac{p_k}{x} \right), \quad m = 1, \dots, M1 \quad (A1.1)$$

onde p_k e A_k ($k = 1, \dots, M1$) são parâmetros tabelados [23].

Podemos observar que para determinação de $\psi_m(x)$ em (A1.1) precisamos dos valores $\bar{\psi}_m(p_k/x)$. Assim sendo, para os pontos x que desejarmos determinar o fluxo angular, o valor p_k/x é o valor assumido por s no sistema (2.1.6). Posteriormente procedemos da mesma forma já descrita para obtenção de $\psi_m(0)$, $\mu_m < 0$ usando a condição de fronteira em $x = a$.

O problema descrito na seção 3.1 foi resolvido segundo a inversão numérica somente para $N = 2$. Ou seja usamos novamente uma placa homogênea finita de espessura $a = 100$ cm, com os parâmetros

$\sigma_T = 1.0 \text{ (cm}^{-1}\text{)}, \sigma_{s0} = 0.99 \text{ (cm}^{-1}\text{)}, \sigma_{s1} = 0.8 \text{ (cm}^{-1}\text{)}$. Para a solução do problema homogêneo ($Q = 0$) as condições dadas foram : $\psi_m(0) = 1.0, \mu_m > 0$ e $\psi_m(100) = 0, \mu_m < 0$. Para a inversão numérica consideramos $M1 = 2, 4, 8$ (pontos de quadratura) e observamos que $M1 = 8$ produz bons resultados como mostra a comparação com os resultados do método SGF S_2 [9] na tabela 8.1 para o fluxo escalar em $x = 0, 50$ e 100 cm .

Tabela A1.1 : LTS_2 com inversão numérica :
 comparação com SGF S_2

	SGF S_2	LTS_2
$x[\text{cm}]$	$\phi(x) [\text{cm}^{-2} \text{ s}^{-1}]$	$\phi(x) [\text{cm}^{-2} \text{ s}^{-1}]$
0	0.81726×10^0	0.81727×10^0
50	0.16991×10^{-1}	0.16991×10^{-1}
100	0.12918×10^{-3}	0.13605×10^{-3}