

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

**ESTUDO E SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE NÊUTRONS
BIDIMENSIONAL PELO MÉTODO LTS_N PARA ELEVADAS ORDENS DE
QUADRATURAS ANGULARES: $LTS_N2D - Diag$ e $LTS_N2D - DiagExp$**

por

Eliete Biasotto Hauser

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, Janeiro de 2002

**ESTUDO E SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE NÊUTRONS
BIDIMENSIONAL PELO MÉTODO LTS_N PARA ELEVADAS ORDENS DE
QUADRATURAS ANGULARES: $LTS_N2D - Diag$ e $LTS_N2D - DiagExp$**

por

Eliete Biasotto Hauser

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

Orientador: Prof. Dr. Marco Tullio Menna Barreto de Vilhena

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Ricardo Carvalho de Barros (UERJ-IPRJ)

Prof. Dr. Fernando Carvalho da Silva (UFRJ-COPPE-PEN)

Prof. Dr. Ruben Panta Pazos (PUCRS-FAMAT)

Prof. Dr. Jorge R. S. Zabadal (UFRGRS-PROMEC)

Prof. Dr. Alberto Tamagna
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 18 de Janeiro de 2002

Dedico
a Samuel, Elisa , Lucio
e ao benefício de todos os seres sencientes.

AGRADECIMENTOS

Quero agradecer a todos que, de alguma maneira, e a seu tempo, contribuíram para a elaboração da presente tese.

Ao Prof. Dr. Marco Tullio M. B. de Vilhena, meus sinceros agradecimentos pela oportunidade de realização deste trabalho, pela competente orientação e pelo encaminhamento às pessoas certas, no momento certo.

Aos membros da banca examinadora: Prof. Dr. Ricardo Carvalho de Barros , Prof. Dr. Fernando Carvalho da Silva , Prof. Dr. Ruben Panta Pazos e Prof. Dr. Jorge R. S. Zabadal.

Ao Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da UFRGS pela acolhida e qualificação profissional recebida. A todos os colegas do PROMEC, especialmente a Luiz Eduardo Ourique e Gilberto Orengo, pela ajuda com o Latex.

À Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, a todos colegas da Faculdade de Matemática e principalmente ao Prof. Dr. Augusto Vieira Cardona .

Aos familiares e amigos que propiciaram a realização deste trabalho com êxito.

A Deus, por tudo...

RESUMO

ESTUDO E SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE NÊUTRONS BIDIMENSIONAL PELO MÉTODO LTS_N PARA ELEVADAS ORDENS DE QUADRATURAS ANGULARES: $LTS_N2D - \text{Diag}$ e $LTS_N2D - \text{DiagExp}$

O principal objetivo dessa tese consiste em determinar uma solução numérica da equação bidimensional do transporte de nêutrons para elevadas ordens de quadratura angular. Diagonalizando a matriz de transporte LTS_N bidimensional, construímos dois algoritmos que se diferenciam pela forma de representar os termos de fuga transversal, que surgem nas equações LTS_N integradas transversalmente. Esses termos no método $LTS_N2D - \text{Diag}$ são expressos como combinação linear dos autovetores multiplicados por exponenciais dos respectivos autovalores. No método $LTS_N2D - \text{DiagExp}$ os termos de fuga transversal são representados por uma função exponencial com constante de decaimento heurísticamente identificada com parâmetros materiais característicos do meio.

A análise espectral desenvolvida permite realizar a diagonalização. Um estudo sobre o condicionamento é feito e também associamos um *número de condicionamento* ao termo de fuga transversal. Definimos os erros no fluxo aproximado e na fórmula da quadratura, e estabelecemos uma relação entre eles. A convergência ocorre com condições de fronteira e quadratura angular adequadas. Apresentamos os resultados numéricos gerados pelos novos métodos $LTS_N2D - \text{Diag}$ e $LTS_N2D - \text{DiagExp}$ para elevadas ordens de quadratura angular para um problema ilustrativo e comparamos com resultados disponíveis na literatura.

ABSTRACT

STUDY AND SOLUTION OF THE STEADY-STATE TWO-DIMENSIONAL TRANSPORT EQUATION BY THE LTS_N METHOD FOR HIGH ORDER ANGULAR QUADRATURE SETS: **LTS_N2D – Diag** e **LTS_N2D – DiagExp**

The main purpose of this thesis is to determine a numerical solution of steady-state two-dimensional transport equation for high order angular quadrature. Diagonalizing the two-dimensional LTS_N transport matrix, we build two algorithms whose difference lies in the representation of the transverse leakage terms that appear in the transverse integrated S_N equations. These terms in version **LTS_N2D – Diag** are written as linear combinations of the eigenvectors multiplied by exponential functions of the corresponding eigenvalues. As with in the **LTS_N2D – DiagExp** method, the transverse leakage terms are represented by exponential functions with decay constant depending on the characteristics of the material associated to the medium.

The spectral analysis guarantees the diagonalization. A study about the condition of the transport matrix is made and we also associate the *condition number* the transverse leakage terms. Next, we estimate the error in the approximate flux and the truncation error in the quadrature formula in order to establish a relation between them. The convergence is obtained as a consequence of feasible boundary conditions and the adequate choice of the quadrature scheme. We present numerical results generated by both methods for high order angular quadrature sets in an illustrative problem, comparing our results with those published in the literature.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
2	O MÉTODO LTS_N PARA O PROBLEMA DE ORDENADAS DISCRETAS COM ESPALHAMENTO ISOTRÓPICO EM GEOMETRIA CARTESIANA BIDIMENSIONAL PARA ELEVADA ORDEM DE QUADRATURA ANGULAR	5
2.1	As Equações S_N Integradas Transversalmente	5
2.2	Método LTS_N Bidimensional Via Diagonalização: $LTS_N2D - \text{Diag}$	7
2.3	Método $LTS_N2D - \text{DiagExp}$	13
2.4	Abordagem para o Problema de Elevada Quadratura	15
3	O ESPECTRO LTS_N BIDIMENSIONAL E ANÁLISE DE CONDICIONAMENTO	17
3.1	Determinação dos Autovalores e Autovetores das Matrizes A_x e A_y	18
3.2	Localização dos Autovalores e Comportamento do Raio Espectral	20
3.2.1	Teorema de Gerschgorin	20
3.2.2	O Comportamento do Raio Espectral	21
3.3	O Espectro LTS_6 Bidimensional	22
3.4	Análise de Condicionamento das Matrizes	25
3.4.1	Um Número de Condicionamento Para o Fluxo	26
3.4.2	Análise do Condicionamento da Matriz LTS_N 2D	28
4	ESTUDO DA CONVERGÊNCIA DAS APROXIMAÇÕES LTS_N PARA ELEVADA ORDEM DE QUADRATURA	33
5	RESULTADOS NUMÉRICOS	39

5.1 Problema Ilustrativo	40
6 CONCLUSÕES	47
ANEXOS	49
A Matriz $sI - A_x$ para $N = 4$	49
B Código Fonte para o Problema Ilustrativo com $N = 8$	51
REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	68
APÊNDICE	73
I Método da Diagonalização	73

LISTA DE SÍMBOLOS

$M = \frac{N(N+2)}{2}$	cardinal do conjunto de ordenadas discretas, veja a equação (2.1), página 5
ϵ	erro global do fluxo aproximado, veja a equação (4.18), página 37
σ_s	seção de choque diferencial de espalhamento, veja a equação (2.1), página 5
τ	erro global na fórmula de quadratura, veja a equação (4.19), página 38
w_m	peso na quadratura angular , veja a equação (2.1), página 5
$Cond$	medida de condicionamento, veja a equação (3.29), página 28
D	coeficiente de difusão , veja a equação (2.43), página 15
J_N	$J_N = J_x + J_y$, veja a equação (5.2), página 41
J_x	corrente parcial, veja a equação (5.2), página 41
J_y	corrente parcial, veja a equação (5.3), página 42
L^{-1}	inverso do comprimento de difusão , veja a equação (2.43), página 15
N	ordem da quadratura angular, veja a equação (2.1), página 5
$Norm$	determinante normalizado, veja a equação (3.30), página 28
$Q(x, y)$	fonte isotrópica de nêutros no ponto (x, y) , veja a equação (2.1), página 5
V	conjunto das direções (μ, η) , veja a equação (4.1), página 33
V_{x_i}	autovetor associado ao autovalor r_i de A_x , veja a equação (2.32), página 12
V_{y_i}	autovetor associado ao autovalor s_i de A_y , veja a equação (2.33), página 12
$\Omega_m = (\mu_m, \eta_m)$	direção discreta, veja a equação (2.1), página 5
$\Psi_{mx}(x)$	fluxo angular médio na variável x na direção discreta Ω_m , veja a equação (2.7), página 7

$\Psi_{my}(y)$	fluxo angular médio na variável y na direção discreta Ω_m , veja a equação (2.4), página 7
$\Psi_m(a, y)$ e $\Psi_m(0, y)$	fluxos angulares transversos , veja a equação (2.2), página 6
$\Psi_m(x, b)$ e $\Psi_m(x, 0)$	fluxos angulares transversos , veja a equação (2.5), página 7
$\Psi_m(x, y)$	fluxo angular de partículas na direção discreta Ω_m , veja a equação (2.1), página 5
E	espaço de base, veja a equação (4.2), página 34
E_M	espaços aproximantes, veja a equação (4.2), página 34
X	espaço de configuração, veja a equação (4.2), página 34
$\epsilon_m(x, y)$	erro no fluxo aproximado, veja a equação (4.3), página 34
$\epsilon_{mx}(x)$	erro médio do fluxo na variável x , veja a equação (4.7), página 35
$\epsilon_{my}(y)$	erro médio do fluxo na variável y , veja a equação (4.7), página 35
λ	constante de decaimento dos fluxos angulares transversos , veja a equação (2.38), página 13
\mathcal{L}^{-1}	transformada inversa de Laplace, veja a equação (2.21), página 10
ρ	raio espectral, veja a equação (3.14), página 21
σ_t	seção de choque macroscópica total, veja a equação (2.1), página 5
$\tau_x(x)$	erro médio em x na fórmula de quadratura, veja a equação (4.8), página 35
$\tau_y(y)$	erro médio em y na fórmula de quadratura, veja a equação (4.8), página 35
$\tau_m(x, y)$	erro na fórmula da quadratura, veja a equação (4.4), página 34
K_0^M e K_1^M	constantes associadas ao núcleo de espalhamento e aos pesos da quadratura, veja a equação (4.13), página 36
$\psi(x, y, \mu, \eta)$	fluxo angular, veja a equação (4.1), página 33
$k(\mu, \eta, \mu', \eta')$	núcleo de espalhamento, veja a equação (4.1), página 33
r_i	i -ésimo autovalor de A_x , veja a equação (2.32), página 12

s_i

i -ésimo autovalor de A_y , veja a equação (2.33), página 12

ÍNDICE DE FIGURAS

2.1	Ordenação das direções discretas para $\Omega_m = (\mu_m, \eta_m)$ para $N = 4$	6
2.2	Aproximação exponencial para o fluxo angular transverso.	14
3.1	Localização dos autovalores - círculos de Gerschgorin para $N = 8$	21
3.2	Estimativa do comportamento do raio espectral $\rho_{A_x}(N)$	22
3.3	Ordenação das direções discretas, $\Omega_m(\mu_m, \eta_m)$, para $N = 6$	23
3.4	Decrescimento do determinante normalizado $Norm_{A_x}(N)$ para $\sigma_s = 0.5$	31
3.5	Decrescimento do determinante normalizado $Norm_{A_x}(N)$ para $\sigma_s = 0.99$	32
5.1	Domínio do problema ilustrativo: as faces pontilhadas têm contorno reflexivo e as demais, vácuo.	41

ÍNDICE DE TABELAS

3.1	Autovalores simples	25
3.2	Medidas de condicionamento e raio espectral para $\sigma_t = 1$ e $\sigma_s = 0.5$	29
3.3	Medidas de condicionamento e raio espectral para $\sigma_t = 1$ e $\sigma_s = 0.99$	30
5.1	Tempo de execução computacional no sistema de computação algébrica e simbólica <i>Maple6.02a</i>	43
5.2	Resultados numéricos para o problema ilustrativo-caso1 para $N = 4$	43
5.3	Resultados numéricos para o problema ilustrativo-caso1 para $N > 4$	44
5.4	Erro relativo percentual no cálculo da fuga de nêutrons do caso1 do problema ilustrativo para $N > 4$ pelo método LTS_N2D – DiagExp	44
5.5	Resultados numéricos para o problema ilustrativo-caso2 para $N = 4$	45
5.6	Resultados numéricos para o problema ilustrativo-caso2 para $N > 4$	45
5.7	Erro relativo percentual no cálculo da fuga de nêutrons do caso 2 do problema ilustrativo para $N > 4$ pelo método LTS_N2D – DiagExp	46

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

A equação de transporte de Boltzmann modela matematicamente problemas de distribuição de partículas em meios materiais, com origem na teoria cinética dos gases [Lewis e W. F. Miller, 1984], [Bell e Glasstone, 1985]. A equação de transporte de nêutrons é uma equação integro-diferencial linear de primeira ordem, conhecida como a equação de transporte de Boltzmann linearizada, onde o fluxo depende de três variáveis independentes para definir a posição espacial da partícula, duas para expressar sua direção de movimento, uma para definir a energia e uma para o tempo.

Existem duas linhas de abordagem bem definidas na resolução da equação do transporte. Os métodos de Monte Carlo são exemplos de modelagem computacional probabilística, a qual independe da modelagem matemática e visa a estimar a solução tratando diretamente o problema físico. Na abordagem determinística modelos matemáticos aproximados são usados para representarem a equação de transporte. Citamos o método da expansão em harmônicos esféricos (P_N) e os métodos de elementos finitos. Uma ampla e atualizada bibliografia sobre os métodos de Elementos Finitos e outros métodos numéricos em teoria de transporte foi elaborada por [Carpenter, 1998], relativa ao período de 1971 a 1997, e está disponível para *download* em <http://www.osti.gov/bridge/> .

Uma abordagem determinística de relevante importância é a aproximação de ordenadas discretas (S_N) para a equação de transporte de nêutrons. As equações S_N são estabelecidas aproximando-se o termo integral da equação de transporte pelo esquema de quadratura de Gauss e o método da colocação [Lewis e W. F. Miller, 1984].

Os métodos nodais convencionais resolvem numericamente as equações S_N integradas transversalmente usando aproximações por polinômios de baixos graus para o termo de fuga

transversal e para os termos de fonte por espalhamento, [R.D.Lawrence, 1986].

Os métodos espectro-nodais SGF, [Barros, 1990] e [Barros e Larsen,1991,1992] fazem uma única aproximação para os termos de fuga transversal , enquanto o termo de fonte por espalhamento é tratado de forma analítica. Inicialmente o termo de fuga transversal foi aproximado por uma constante e o método foi denominado SGF-CN [Barros e Larsen, 1992]. A seguir, esse termo foi aproximado heurísticamente por uma função exponencial com constante de decaimento identificada com a seção de choque macroscópica de absorção , surgindo assim o método espectro-nodal exponencial SGF-ExpN , conforme [Barros e Larsen, 1991], [Mello, 2000] e [Mello e Barros, 2002].

Uma solução analítica para as equações S_N unidimensionais foi obtida através do método LTS_N [Vilhena e Barichello, 1991], [Vilhena et al., 1998]. Esse método consiste na aplicação da transformada de Laplace ao sistema de equações diferenciais ordinárias gerado pela aproximação S_N , transformando-o num sistema algébrico para os fluxos transformados. Após a resolução desse último, o uso da transformada inversa de Laplace fornece uma expressão analítica para o fluxo angular discretizado.

Para obtenção dessa solução é necessário inverter uma matriz, associada especificamente às seções de choque do problema de transporte. Vários métodos foram desenvolvidos com esse objetivo. O método da diagonalização tem se mostrado bastante eficiente, permitindo a inversão dessa matriz para altas ordens de quadratura [Segatto e Vilhena, 1999].

Paralelamente à busca de uma melhor forma de inversão da matriz LTS_N , iniciou-se a procura de uma extensão da solução LTS_N para problemas multidimensionais. Em [Vilhena et al., 1999] encontramos uma abordagem para o problema de ordenadas discretas multidimensional combinando o método LTS_N com o método Spectral.

Anterior a isso, a formulação LTS_N multidimensional (em diferentes geometrias) foi desenvolvida por [Zabadal et al., 1993], [Zabadal et al., 1995], [Zabadal et al., 1997] e utilizou a Transformada de Laplace para determinar as soluções gerais analíticas das equações S_N nodais integradas transversalmente com alguma aproximação para os termos de fuga transversal. Em geometria cartesiana foram especificamente detalhados os casos bidimensional e tridimensional em [Zabadal, 1994]. À medida que a ordem de quadratura cresce, também aumenta a complexidade computacional dessa formulação.

Em [Zabadal et al., 1993] o método da eliminação de Gauss foi utilizado para resolver

o sistema linear de $4M^2$ (que surge com a aplicação das condições de contorno) e para calcular a matriz inversa da matriz bidimensional de transporte LTS_N . A técnica de Expansão de Heaviside para raízes múltiplas foi aplicada na determinação da Transformada Inversa de Laplace dessa matriz inversa. Os termos de fuga transversal, que surgem nas equações LTS_N integradas transversalmente foram expressos como combinação linear de exponenciais dos autovalores multiplicadas pela variável espacial elevada na potência igual à multiplicidade do respectivo autovalor.

A motivação para a escolha do tema desta tese foi a de determinar uma solução numérica da equação bidimensional do transporte para valores mais altos de N . Isso será possível através da construção de um novo algoritmo para o método LTS_N bidimensional, o qual utiliza o método da diagonalização. Uma primeira tentativa de construção da solução utilizou a diagonalização da matriz LTS_N bidimensional e os termos de fuga transversal, que surgem nas equações LTS_N integradas transversalmente, foram também expressos como combinação linear dos autovetores multiplicados por exponencias dos respectivos autovalores. Esse algoritmo foi por nós denominado como **LTS_N2D – Diag**, e, quando aplicado na resolução de um problema ilustrativo disponível na literatura para comparação, não se mostrou eficiente para elevadas ordens de quadratura angular.

Para melhorar esses resultados e resolver o problema para maiores valores de N , como descrito por [Barros e Larsen, 1992], com base na física de problemas de penetração profunda, onde o fluxo de nêutrons decresce à medida que se distancia da fonte, propomos uma aproximação exponencial para os termos de fuga transversal. Nessa representação a constante de decaimento, λ , foi heurísticamente identificada com a seção de choque macroscópica de absorção σ_a do meio. Com essa aproximação passamos a denominar o método como **LTS_N2D – DiagExp**.

No capítulo 2 detalhamos a construção dos novos algoritmos **LTS_N2D – Diag** e **LTS_N2D – DiagExp**. No capítulo 3 analisamos o espectro das matrizes LTS_N bidimensionais, da forma $sI - A$. Isso nos permite diagonalizar a matriz A e encontrar uma expressão analítica mais simples para os fluxos angulares médios e fluxos angulares médios na fronteira. Essa análise espectral fundamenta-se em [Barros e Larsen, 1990] e [Case e Zweifel, 1967]. Um estudo sobre o condicionamento do nosso problema também é feito no capítulo 3 e mostra que, quando $\lambda < \rho(A_x)$ a aproximação exponencial para os termos de fuga transver-

sal parece melhor do que a primeiramente realizada na formulação **LTS_N2D – Diag**. Isso é feito associando um *número de condicionamento* ao termo de fuga transversal. No capítulo 4 apresentamos algumas idéias sobre a convergência das aproximações LTS_N bidimensionais para elevada ordem de quadratura. Esse procedimento tem como base [Pazos e Vilhena, 1998], [Pazos e Vilhena, 1999a], [Pazos e Vilhena, 1999b], que provou a convergência do método LTS_N unidimensional e LTS_N bidimensional espectral. Definimos os chamados erros no fluxo aproximado e na fórmula da quadratura e estabelecemos uma relação entre eles. Concluimos fazendo uma estimativa global do erro no fluxo aproximado. No capítulo 5 apresentamos os resultados numéricos gerados pelos novos algoritmos **LTS_N2D – Diag** e **LTS_N2D – DiagExp** para elevadas ordens de quadratura angular para um problema ilustrativo, inicialmente trabalhado por [Barros e Larsen, 1991], para o caso em que a constante de decaimento λ nas aproximações exponenciais para os termos de fuga transversal foi identificada com a seção de choque macroscópica de absorção σ_a do meio. Estimamos numericamente a fuga de nêutrons para o problema ilustrativo descrito, e comparamos com os resultados obtidos por [Zabadal, 1994] e [Mello, 2000]. Finalizamos a tese no capítulo 6 apresentando as conclusões e nossas sugestões para trabalhos futuros.

O MÉTODO LTS_N PARA O PROBLEMA DE ORDENADAS DISCRETAS COM ESPALHAMENTO ISOTRÓPICO EM GEOMETRIA CARTESIANA BIDIMENSIONAL PARA ELEVADA ORDEM DE QUADRATURA ANGULAR

2.1 As Equações S_N Integradas Transversalmente

Consideremos o problema de ordenadas discretas S_N para meios não-multiplicativos, em geometria cartesiana bidimensional, com espalhamento isotrópico e um grupo de energia dado por:

$$\mu_m \frac{\partial \Psi_m}{\partial x}(x, y) + \eta_m \frac{\partial \Psi_m}{\partial y}(x, y) + \sigma_t \Psi_m(x, y) = Q(x, y) + \frac{1}{4} \sum_{n=1}^M w_n \Psi_n(x, y) \sigma_s. \quad (2.1)$$

Na Eq.(2.1):

$(x, y) \in [0, a] \times [0, b]$, são as variáveis espaciais da geometria retangular,

$m = 1 : M$ (números inteiros de 1 até M , inclusive), $M = \frac{N(N+2)}{2}$,

N é a ordem da quadratura angular,

M é a cardinalidade do conjunto de ordenadas discretas (número de direções discretas),

$\sigma_t(x, y)$ é a seção de choque macroscópica total ,

$\sigma_s(x, y)$ é a seção de choque macroscópica para espalhamento isotrópico,

$Q(x, y)$ é a fonte isotrópica de nêutrons no ponto (x, y) do domínio,

$\Psi_m(x, y)$ denota o fluxo angular de partículas na direção discreta $\Omega_m = (\mu_m, \eta_m)$,

e w_m é o respectivo peso na quadratura angular usada.

As condições de contorno abrangem fluxo incidente conhecido e reflexão especular .

Utilizamos o conjunto de quadratura angular com simetria de nível, descrito por [Lewis e W. F. Miller, 1984]. Todos os cálculos efetuados no transcorrer desta tese utilizam os dados da Tabela 4.1, página 162 do referido livro, cuja ordenação é exemplificada para $N = 4$ na figura 2.1.

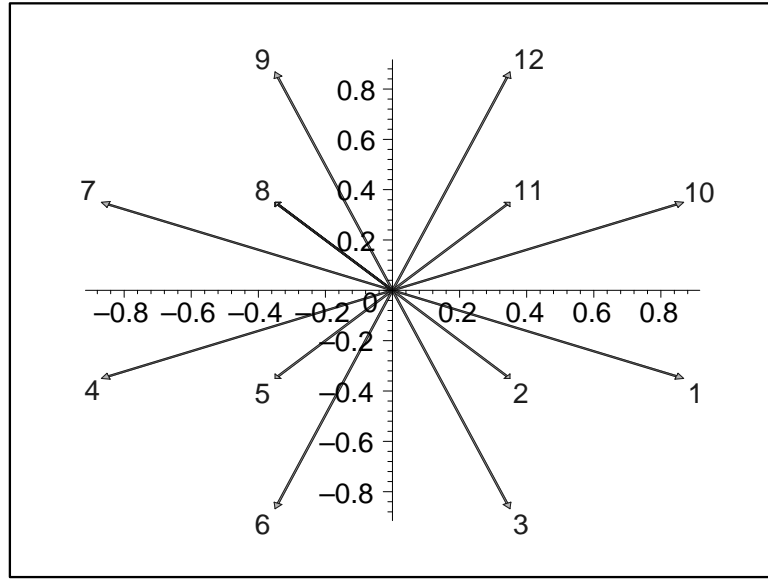


Figura 2.1 – Ordenação das direções discretas para $\Omega_m = (\mu_m, \eta_m)$ para $N = 4$.

Integrando a Eq.(2.1) com respeito a x entre os limites 0 e a , e dividindo por a , resulta a equação nodal, unidimensional, na variável y

$$\eta_m \frac{d\Psi_{my}}{dy}(y) + \frac{\mu_m}{a} [\Psi_m(a, y) - \Psi_m(0, y)] + \sigma_t \Psi_{my}(y) = Q_y(y) + \frac{1}{4} \sum_{n=1}^M w_n \sigma_s \Psi_{ny}(y), \quad (2.2)$$

onde, para $m = 1 : M$, $\Psi_m(a, y)$ e $\Psi_m(0, y)$ são os fluxos angulares incidentes e emergentes dos contornos,

$$Q_y(y) = \frac{1}{a} \int_0^a Q(x, y) dx, \quad (2.3)$$

e o fluxo angular médio na direção discreta $\Omega_m = (\mu_m, \eta_m)$ é definido como

$$\Psi_{my}(y) = \frac{1}{a} \int_0^a \Psi_m(x, y) dx. \quad (2.4)$$

Analogamente, integrando 2.1 com respeito a y entre os limites 0 e b , e dividindo por b , resulta a equação nodal unidimensional na variável x

$$\mu_m \frac{d\Psi_{mx}}{dx}(x) + \frac{\eta_m}{b} [\Psi_m(x, b) - \Psi_m(x, 0)] + \sigma_t \Psi_{mx}(x) = Q_x(x) + \frac{1}{4} \sum_{n=1}^M w_n \sigma_s \Psi_{nx}(x), \quad (2.5)$$

onde, para $m = 1 : M$, $\Psi_m(x, b)$ e $\Psi_m(x, 0)$ são os fluxos angulares incidentes e emergentes dos contornos. Ademais definimos o termo de fonte como

$$Q_x(x) = \frac{1}{b} \int_0^b Q(x, y) dy, \quad (2.6)$$

e o fluxo angular médio na direção discreta $\Omega_m = (\mu_m, \eta_m)$ como

$$\Psi_{mx}(x) = \frac{1}{b} \int_0^b \Psi_m(x, y) dy. \quad (2.7)$$

.

2.2 Método LTS_N Bidimensional Via Diagonalização: $LTS_{N2D} - \text{Diag}$

O método LTS_N nodal bidimensional [Zabadal, 1994] consiste em resolver as equações S_N nodais (2.2) e (2.5) através do uso da Transformada de Laplace, com inversão analítica via técnica de Heaviside para raízes múltiplas. A inversão da matriz LTS_N bidimensional associada foi feita utilizando o método da Eliminação de Gauss.

No presente trabalho, desenvolvemos um novo algoritmo para calcular os fluxos angulares médios, diagonalizando a matriz de transporte LTS_N bidimensional. O estudo do espectro dessa matriz, realizado no capítulo 3, mostra que isso é possível.

Aplicando a Transformada de Laplace com respeito a y em (2.2) e denotando $\mathcal{L}\{Q_y(y)\} = \bar{Q}_y(s)$ e $\mathcal{L}\{\Psi_{my}(y)\} = \bar{\Psi}_{my}(s)$, obtemos o sistema linear algébrico

$$\begin{aligned}
s\bar{\Psi}_{my}(s) + \frac{\sigma_t}{\eta_m}\bar{\Psi}_{my}(s) - \frac{1}{4\eta_m}\sum_{n=1}^M w_n\sigma_s\bar{\Psi}_{ny}(s) &= \\
&= \Psi_{my}(0) - \frac{\mu_m}{a\eta_m}[\bar{\Psi}_m(a, s) - \bar{\Psi}_m(0, s)] + \frac{\bar{Q}_y(s)}{\eta_m},
\end{aligned} \tag{2.8}$$

representado matricialmente por

$$(sI - A_y)\bar{\Psi}_y(s) = \Psi_y(0) + \bar{S}_y(s), \tag{2.9}$$

onde, para $i = 1 : M$ e $j = 1 : M$, os elementos da matriz A_y , de ordem $M \times M$, têm a forma

$$a_y(i, j) = \begin{cases} -\frac{4\sigma_t - \sigma_{sii}w_i}{4\eta_i} & \text{se } i = j ; \\ \frac{\sigma_{sij}w_j}{4\eta_i} & \text{se } i \neq j . \end{cases} \tag{2.10}$$

O vetor das incógnitas é

$$\bar{\Psi}_y(s) = [\bar{\Psi}_{1y}(s) \bar{\Psi}_{2y}(s) \cdots \bar{\Psi}_{My}(s)]^T . \tag{2.11}$$

e, $\Psi_y(0) = [\Psi_{1y}(0) \Psi_{2y}(0) \cdots \Psi_{My}(0)]^T$. O vetor $\bar{S}_y(s)$ possui componentes genéricos

$$\bar{S}_{yi}(s) = \frac{\bar{Q}_y(s)}{\eta_i} - \frac{\mu_i}{a\eta_i} [\bar{\Psi}_i(a, s) - \bar{\Psi}_i(0, s)] . \tag{2.12}$$

Similarmente, aplicando a Transformada de Laplace com respeito a x em (2.5) e denotando $\mathcal{L}\{Q_x(x)\} = \bar{Q}_x(s)$ e $\mathcal{L}\{\Psi_{mx}(x)\} = \bar{\Psi}_{mx}(s)$, obtemos o sistema linear

$$\begin{aligned}
s\bar{\Psi}_{mx}(s) + \frac{\sigma_t}{\mu_m}\bar{\Psi}_{mx}(s) - \frac{1}{\mu_m}\sum_{n=1}^M w_n\sigma_s\bar{\Psi}_{nx}(s) &= \\
&= \Psi_{mx}(0) - \frac{\eta_m}{a\mu_m}[\bar{\Psi}_m(s, b) - \bar{\Psi}_m(s, 0)] + \frac{\bar{Q}_x(s)}{\mu_m},
\end{aligned} \tag{2.13}$$

representado matricialmente por

$$(sI - A_x)\bar{\Psi}_x(s) = \Psi_x(0) + \bar{S}_x(s) \quad (2.14)$$

onde, para $i = 1 : M$ e $j = 1 : M$, os elementos da matriz A_x , de ordem $M \times M$, têm a forma

$$a_x(i, j) = \begin{cases} -\frac{4\sigma_t - \sigma_{sii}w_i}{4\mu_i} & \text{se } i = j ; \\ \frac{\sigma_{sij}w_j}{4\mu_i} & \text{se } i \neq j . \end{cases} \quad (2.15)$$

O vetor das incógnitas é

$$\bar{\Psi}_x(s) = [\bar{\Psi}_{1x}(s) \bar{\Psi}_{2x}(s) \cdots \bar{\Psi}_{Mx}(s)]^T \quad (2.16)$$

e, $\Psi_x(0) = [\Psi_{1x}(0) \Psi_{2x}(0) \cdots \Psi_{Mx}(0)]^T$. O vetor $\bar{S}_x(s)$ possui componentes genéricas

$$\bar{S}_{xi}(s) = \frac{\bar{Q}_x(s)}{\mu_i} + \frac{\eta_i}{b\mu_i} [\bar{\Psi}_i(s, b) - \bar{\Psi}_i(s, 0)] . \quad (2.17)$$

As soluções dos sistemas (2.9) e (2.14) são dadas, respectivamente, por

$$\bar{\Psi}_y(s) = (sI - A_y)^{-1}[\Psi_y(0) + \bar{S}_y(s)] , \quad (2.18)$$

e

$$\bar{\Psi}_x(s) = (sI - A_x)^{-1}[\Psi_x(0) + \bar{S}_x(s)] . \quad (2.19)$$

Para determinarmos os fluxos angulares aplicamos a Transformada de Laplace Inversa em (2.18) e (2.19) e o resultado é

$$\Psi_y(y) = \mathcal{L}^{-1}\{(sI - A_y)^{-1}[\Psi_y(0) + \bar{S}_y(s)]\} , \quad (2.20)$$

e

$$\Psi_x(x) = \mathcal{L}^{-1}\{(sI - A_x)^{-1}[\Psi_x(0) + \bar{S}_x(s)]\} . \quad (2.21)$$

Neste ponto aplicamos o método da diagonalização [Segatto et al., 1999] usado em problemas de transporte com elevados graus de anisotropia e de quadratura angular, para determinarmos $\mathcal{L}^{-1}\{(sI - A_y)^{-1}\}$ e $\mathcal{L}^{-1}\{(sI - A_x)^{-1}\}$. O cálculo da transformada inversa de Laplace de $(sI - A_x)^{-1}$ está detalhado no apêndice I.

Conforme analisaremos no capítulo 3, para o caso isotrópico de fonte fixa, as matrizes A_y e A_x possuem M autovalores reais, dos quais N são simples e simétricos, e $M - N$ simétricos com multiplicidade ≥ 1 . Sejam V_{y_i} e V_{x_i} autovetores associados aos autovalores s_i e r_i de A_y e A_x respectivamente. V_{y_i} e V_{x_i} constituem as colunas das matrizes de autovetores \mathbf{V}_y e \mathbf{V}_x . Como os autovetores são linearmente independentes, as matrizes A_y e A_x são diagonalizáveis, isto é

$$A_y = \mathbf{V}_y \mathbf{D}_y \mathbf{V}_y^{-1}, \quad (2.22)$$

e

$$A_x = \mathbf{V}_x \mathbf{D}_x \mathbf{V}_x^{-1}, \quad (2.23)$$

onde \mathbf{D}_y e \mathbf{D}_x são matrizes diagonais dos autovalores, e \mathbf{V}_y e \mathbf{V}_x as matrizes dos autovetores correspondentes a A_y e A_x respectivamente. Portanto, conforme justificado no apêndice I, obtemos

$$\mathcal{L}^{-1}\{(sI - A_y)^{-1}\} = \mathbf{V}_y \mathcal{L}^{-1}\{(sI - \mathbf{D}_y)^{-1}\} \mathbf{V}_y^{-1} = \mathbf{V}_y e^{\mathbf{D}_y y} \mathbf{V}_y^{-1} \quad (2.24)$$

e

$$\mathcal{L}^{-1}\{(sI - A_x)^{-1}\} = \mathbf{V}_x \mathcal{L}^{-1}\{(sI - \mathbf{D}_x)^{-1}\} \mathbf{V}_x^{-1} = \mathbf{V}_x e^{\mathbf{D}_x x} \mathbf{V}_x^{-1}. \quad (2.25)$$

Substituindo os resultados (2.24) e (2.25) em (2.20) e (2.21), representando a operação convolução por $*$, determinamos a forma matricial, analítica, para os fluxos angulares médios em função dos fluxos angulares médios na origem e dos fluxos angulares na fronteira.

$$\Psi_y(y) = [\mathbf{V}_y e^{\mathbf{D}_y y} \mathbf{V}_y^{-1}] \Psi_y(0) + [\mathbf{V}_y e^{\mathbf{D}_y y} \mathbf{V}_y^{-1}] * S_y(y) \quad (2.26)$$

e

$$\Psi_x(x) = [\mathbf{V}_x e^{\mathbf{D}_x x} \mathbf{V}_x^{-1}] \Psi_x(0) + [\mathbf{V}_x e^{\mathbf{D}_x x} \mathbf{V}_x^{-1}] * S_x(x). \quad (2.27)$$

Os fluxos angulares médios na origem são

$$\Psi_y(0) = [\Psi_{1y}(0) \ \Psi_{2y}(0) \ \cdots \ \Psi_{My}(0)]^T \quad (2.28)$$

e

$$\Psi_x(0) = [\Psi_{1x}(0) \ \Psi_{2x}(0) \ \cdots \ \Psi_{Mx}(0)]^T, \quad (2.29)$$

onde, para $i = 1 : M$, os elementos genéricos são especificados, respectivamente, a partir de (2.4) e (2.7):

$$\Psi_{iy}(0) = \frac{1}{a} \int_0^a \Psi_m(x, 0) dx.$$

e

$$\Psi_{ix}(0) = \frac{1}{b} \int_0^b \Psi_m(0, y) dy.$$

Os vetores $S_y(y)$ e $S_x(x)$ possuem componentes genéricos

$$S_{yi}(y) = \frac{Q_y(y)}{\eta_i} - \frac{\mu_i}{a\eta_i} [\Psi_i(a, y) - \Psi_i(0, y)] , \quad (2.30)$$

e

$$S_{xi}(x) = \frac{Q_x(x)}{\mu_i} + \frac{\eta_i}{b\mu_i} [\Psi_i(x, b) - \Psi_i(x, 0)] . \quad (2.31)$$

O espaço-solução dos problemas (2.2) e (2.5) é constituído por M autovetores V_{yi}

e V_{x_i} , linearmente independentes, multiplicados por exponenciais, cujos expoentes são os autovalores s_i e r_i de A_y e A_x respectivamente. Em continuidade, expressamos os fluxos angulares médios e os fluxos angulares transversos (na fronteira) como

$$\Psi_x(x) = \sum_{i=1}^M A_i V_{x_i} e^{r_i x} = \mathbf{V}_x e^{\mathbf{D}_x x} \mathbf{A}, \quad (2.32)$$

onde $\mathbf{A} = [A_1, A_2, \dots, A_M]^T$, e

$$\Psi_y(y) = \sum_{i=1}^M B_i V_{y_i} e^{s_i y} = \mathbf{V}_y e^{\mathbf{D}_y y} \mathbf{B}, \quad (2.33)$$

onde $\mathbf{B} = [B_1, B_2, \dots, B_M]^T$,

$$\Psi(x, 0) = \sum_{i=1}^M C_i V_{x_i} e^{r_i x} = \mathbf{V}_x e^{\mathbf{D}_x x} \mathbf{C}, \quad (2.34)$$

onde $\mathbf{C} = [C_1, C_2, \dots, C_M]^T$, e os fluxos angulares transversos (na fronteira) como

$$\Psi(0, y) = \sum_{i=1}^M D_i V_{y_i} e^{s_i y} = \mathbf{V}_y e^{\mathbf{D}_y y} \mathbf{D}, \quad (2.35)$$

onde $\mathbf{D} = [D_1, D_2, \dots, D_M]^T$,

$$\Psi(x, b) = \sum_{i=1}^M E_i V_{x_i} e^{r_i x} = \mathbf{V}_x e^{\mathbf{D}_x x} \mathbf{E}, \quad (2.36)$$

onde $\mathbf{E} = [E_1, E_2, \dots, E_M]^T$, e

$$\Psi(a, y) = \sum_{i=1}^M F_i V_{y_i} e^{s_i y} = \mathbf{V}_y e^{\mathbf{D}_y y} \mathbf{F}, \quad (2.37)$$

onde $\mathbf{F} = [F_1, F_2, \dots, F_M]^T$.

As soluções (2.26) e (2.27) ficam completamente determinadas ao encontrarmos as

$6M$ incógnitas presentes nas expressões (2.32) a (2.37).

Para tanto, resolve-se um sistema linear compatível, de $6M = 3N^2 + 6N$ equações, obtidas a partir da definição dos fluxos angulares médios em $x = a$ e $y = b$, e da aplicação das condições de contorno.

Assim, determinadas as incógnitas A_i, B_i, C_i, D_i, E_i e F_i , os fluxos angulares médios Ψ_y e Ψ_x ficam completamente estabelecidos pelas Eqs.(2.26) e (2.27).

2.3 Método $LTS_N2D - \text{DiagExp}$

O método $LTS_N2D - \text{Diag}$, descrito na seção anterior foi utilizado para resolver o problema ilustrativo descrito no capítulo 5, [Hauser et al., 2001a]. Os resultados figuram na Tabela 5.2 e Tabela 5.4.

Para melhorar esses resultados e resolver o problema para maiores valores de N , propomos uma aproximação exponencial para os termos de fuga transversal, que surgem nas equações S_N integradas transversalmente, como foi descrito no trabalho pioneiro de Barros e Larsen no método espectro-nodal exponencial **SGF-ExpN**, [Barros e Larsen, 1991] para domínios homogêneos, e recentemente generalizado para domínios heterogêneos em [Mello, 2000] e [Mello e Barros, 2001]. Com essa aproximação passamos a denominar o presente método como **$LTS_N2D - \text{DiagExp}$** .

Fundamentados na física de problemas de penetração profunda, onde o fluxo de nêutrons decresce à medida que se distancia da fonte, ao invés de utilizar as formas (2.34) a (2.37), expressamos os fluxos angulares transversos na m -ésima direção, $m = 1 : M$, como:

$$\Psi_m(x, 0) = \mathbf{F}_m e^{-\text{sign}(\mu_m)\lambda x}, \quad (2.38)$$

$$\Psi_m(0, y) = \mathbf{G}_m e^{-\text{sign}(\eta_m)\lambda y}, \quad (2.39)$$

$$\Psi_m(x, b) = \mathbf{H}_m e^{-\text{sign}(\mu_m)\lambda x}, \quad (2.40)$$

$$\Psi_m(a, y) = \mathbf{I}_m e^{-\text{sign}(\eta_m)\lambda y}, \quad (2.41)$$

onde, por de definição, sign é a *função sinal*:

$$\text{sign}(\mu_m) = \begin{cases} 1 & \text{se } \mu_m > 0; \\ -1 & \text{se } \mu_m < 0. \end{cases}$$

A presença das funções $\text{sign}(\mu_m)$ e $\text{sign}(\eta_m)$ nas exponenciais tem como objetivo garantir que os fluxos angulares aproximados apresentem decaimento exponencial para qualquer direção discreta, como esquematizado na figura 2.2.

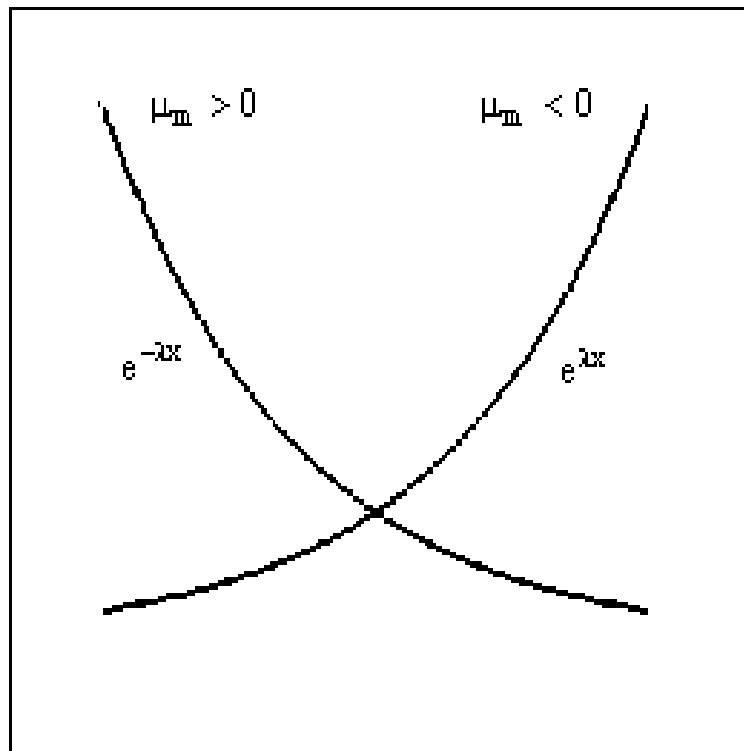


Figura 2.2 – Aproximação exponencial para o fluxo angular transversal.

A constante de decaimento λ é um parâmetro a ser determinado a priori. No trabalho preliminar de Barros e Larsen para domínios homogêneos, λ foi identificada como sendo a

seção de choque macroscópica de absorção , isto é,

$$\lambda = \sigma_a = \sigma_t - \sigma_s. \quad (2.42)$$

Em sua tese de doutorado, Mello [Mello, 2000] estendeu a investigação para domínios heterogêneos e considerou outros parâmetros materiais característicos do meio:

- inverso do comprimento de difusão:

$$\lambda = L^{-1} = \sqrt{\frac{\sigma_a}{D}}, \quad (2.43)$$

onde D é o coeficiente de difusão.

- inverso do autovalor dominante positivo, isto é, o raio espectral da matriz de transporte bidimensional.

Nesta tese fizemos uma tentativa para valores maiores de λ , próximos ao valor de $\rho(A_x)$. Escolhemos λ de forma a satisfazer a expressão:

$$e^{-a\lambda} = \frac{\sum_{k=1}^M e^{-ar_k}}{\sum_{k=1}^M |r_k|}. \quad (2.44)$$

2.4 Abordagem para o Problema de Elevada Quadratura

O comportamento exponencial da solução, combinado com o fato de que o raio espectral das matrizes LTS_N aumenta com N (vide capítulo 3), gera valores com ordens de grandezas muito diferentes. Para superar essa dificuldade e visando a obtenção de melhores resultados numéricos ,com base em [Segatto e Vilhena, 1997], [Segatto et al., 1999] e [Gonçalves, 1999], introduzimos a seguinte modificação nas Eqs.(2.26) e (2.27):

$$\mathbf{V}_y e^{\mathbf{D}_y y} \mathbf{V}_y^{-1} = \mathbf{V}_y e^{\mathbf{D}_y^+(y-b)} e^{\mathbf{D}_y^+(b)} \mathbf{V}_y^{-1} + \mathbf{V}_y e^{\mathbf{D}_y^- y} \mathbf{V}_y^{-1}, \quad (2.45)$$

onde os elementos genéricos das matrizes \mathbf{D}_y^+ e \mathbf{D}_y^- são

$$d_{ij}^+ = \begin{cases} s_i & \text{se } d_{ij} > 0 \\ 0 & \text{se } d_{ij} \leq 0 \end{cases} \quad \text{e} \quad d_{ij}^- = \begin{cases} s_i & \text{se } d_{ij} < 0 \\ 0 & \text{se } d_{ij} \geq 0, \end{cases} \quad (2.46)$$

onde $s_i, i = 1 : M$ são os autovalores da matriz A_y . Analogamente

$$\mathbf{V}_x e^{\mathbf{D}_x x} \mathbf{V}_x^{-1} = \mathbf{V}_x e^{\mathbf{D}_x^+(x-a)} e^{\mathbf{D}_x^+(a)} \mathbf{V}_x^{-1} + \mathbf{V}_x e^{\mathbf{D}_x^- x} \mathbf{V}_x^{-1}, \quad (2.47)$$

onde os elementos genéricos das matrizes \mathbf{D}_x^+ e \mathbf{D}_x^- são

$$d_{ij}^+ = \begin{cases} r_i & \text{se } d_{ij} > 0 \\ 0 & \text{se } d_{ij} \leq 0 \end{cases} \quad \text{e} \quad d_{ij}^- = \begin{cases} r_i & \text{se } d_{ij} < 0 \\ 0 & \text{se } d_{ij} \geq 0. \end{cases} \quad (2.48)$$

Aqui $r_i, i = 1 : M$ são os autovalores da matriz A_x .

As formulações **LTS_N2D – Diag** e **LTS_N2D – DiagExp** em geometria cartesiana bidimensional com elevadas quadraturas e grandes espessuras podem gerar problemas de mal condicionamento. O sistema linear cuja solução constitui os valores procurados das incógnitas A_i, B_i, F_i, G_i, H_i e I_i , têm-se mostrado mal condicionado. Na sua resolução para $N > 4$ temos usado a rotina para Decomposição em Valores Singulares, inclusa na *IMSL Libraries Reference*.

CAPÍTULO 3

O ESPECTRO LTS_N BIDIMENSIONAL E ANÁLISE DE CONDICIONAMENTO

Uma análise espectral para problemas unidimensionais de transporte, em meio homogêneo, contínuo, com espalhamento isotrópico, foi realizada por [Case e Zweifel, 1967]. O estudo a ser realizado neste capítulo refere-se ao problema homogêneo de Ordenadas Discretas S_N bidimensional, com espalhamento isotrópico e um grupo de energia. Fundamenta-se em [Barros, 1990], que analisou o espectro das equações S_N para os casos de espalhamento linearmente anisotrópico e espalhamento isotrópico. Ademais, [Abreu, 1998] também analisou o espectro das equações S_N unidimensionais. O espectro do problema de ordenadas discretas S_N bidimensional com espalhamento isotrópico e a um grupo de energia encontra-se em [Mello, 2000].

Neste capítulo, descrevemos um processo para determinar M autovalores e M autovetores da matriz de transporte LTS_N , válido somente para conjuntos simétricos de quadratura S_N , com N par. Ou seja, diferentes direções Ω_m podem ter o mesmo valor de μ_m e η_m . Conseqüentemente, para $N \geq 2$, as matrizes A_x e A_y possuem autovalores múltiplos.

Consideremos um conjunto convencional de quadratura simétrica orientada no sentido anti-horário, a partir do primeiro quadrante, com espalhamento isotrópico e $N > 2$. Vimos no capítulo 2 que a matriz A_x tem os elementos definidos por 2.16. Como pode ser observado no anexo A, temos que, para o polinômio característico da matriz A_x , isto é, para $\det(sI - A_x)$:

- $s = -\frac{\sigma_t}{\mu_1}$ é raiz simples pois a primeira e a M -ésima coluna de $sI - A_x$ são iguais,
- $s = \frac{\sigma_t}{\mu_1}$ é raiz simples pois a $(\frac{M}{2})$ -ésima e a $(\frac{M}{2} + 1)$ -ésima coluna de $sI - A_x$ são

iguais,

- $s = -\frac{\sigma_t}{\mu_2}$ é raiz de multiplicidade três pois a segunda, a terceira, a (M-1)-ésima e a (M-2)-ésima colunas de $sI - A_x$ são iguais,
- $s = \frac{\sigma_t}{\mu_2}$ é raiz de multiplicidade três pois a quarta, a quinta, a (M-4)-ésima e a (M-5)-ésima colunas de $sI - A_x$ são iguais,

E assim, sucessivamente, concluímos que:

- $s = \pm \frac{\sigma_t}{\mu_{\frac{N}{2}}}$ são raízes de multiplicidade N-1 .

Assim, diretamente da matriz $sI - A_x$ obtemos $M - N$ autovalores. Porém o espectro completo não pode ser descrito dessa forma. Os N autovalores restantes de A_x , que não são facilmente determinados a partir da leitura da matriz $sI - A_x$, são obtidos a partir da descrição completa do espectro na próxima seção.

3.1 Determinação dos Autovalores e Autovetores das Matrizes A_x e A_y

Consideremos a equação homogênea associada às equações nodais S_N na variável x

$$\mu_m \frac{d\Psi_{xm}}{dx}(x) + \sigma_t \Psi_{xm}(x) = \frac{\sigma_s}{4} \sum_{n=1}^M w_n \Psi_{xn}(x) \quad (3.1)$$

com $m = 1 : M$.

Supomos que para cada m exista uma solução da forma

$$\Psi_{mx}(x) = \alpha_m(s) e^{sx}, \quad (3.2)$$

a qual substituímos na Eq. (3.1). O resultado é

$$\alpha_m(s) \mu_m s e^{sx} + \alpha_m(s) \sigma_t e^{sx} = \frac{\sigma_s}{4} \sum_{n=1}^M \alpha_n(s) e^{sx} w_n, \quad (3.3)$$

ou, equivalentemente

$$\alpha_m(s) (s \mu_m + \sigma_t) = \frac{\sigma_s}{4} \sum_{n=1}^M \alpha_n w_n. \quad (3.4)$$

No problema de autovalores (3.4) $\sum_{n=1}^M \alpha_n w_n$ pode ser qualquer valor real. Se $\sum_{n=1}^M \alpha_n w_n \neq 0$, como a normalização é arbitrária, por simplicidade assumimos

$$\sum_{n=1}^M \alpha_n(s) w_n = 1, \quad (3.5)$$

e a Eq. (3.4) toma a forma

$$\alpha_m(s)(s\mu_m + \sigma_t) = \frac{\sigma_s}{4}. \quad (3.6)$$

Logo

$$\alpha_m(s) = \frac{\sigma_s}{4(s\mu_m + \sigma_t)}. \quad (3.7)$$

A partir das Eqs. (3.5) e (3.7) determinamos, em analogia a [Case e Zweifel, 1967], a equação da dispersão

$$\sum_{n=1}^M \frac{w_n}{s\mu_n + \sigma_t} = \frac{4}{\sigma_s}. \quad (3.8)$$

Aqui as N raízes reais aparecem aos pares $\pm s_1, \pm s_2, \pm s_3, \dots, \pm s_{\frac{N}{2}}$, e constituem N autovalores de (3.4) de um total de M necessários. Os respectivos autovetores são determinados a partir de (3.7).

Os outros $M - N = \frac{N^2}{2}$ autovalores são obtidos considerando a segunda restrição

$$\sum_{n=1}^M \alpha_n(s) w_n = 0. \quad (3.9)$$

Substituindo essa condição no problema de autovalores (3.4), obtemos

$$\alpha_m(s)(s\mu_m + \sigma_t) = 0. \quad (3.10)$$

Assim, se, para $m = 1 : M$,

$$s = -\frac{\sigma_t}{\mu_m}, \quad (3.11)$$

podemos escolher $\alpha_m(s) \neq 0$, de modo a satisfazer simultaneamente as equações (3.9) e

(3.10). Os autovalores dados em (3.11) são de multiplicidade ≥ 1 e os termos α_m correspondentes constituem um conjunto de $M - N$ autovetores linearmente independentes. Isso justifica a forma como definimos o fluxo a ser determinado através do Método **LTS_N2D – Diag**.

Um raciocínio análogo é aplicado à equação homogênea associada às equações nodais S_N na variável y .

3.2 Localização dos Autovalores e Comportamento do Raio Espectral

3.2.1 Teorema de Gerschgorin

Seja \mathfrak{R}_i , $i = 1 : M$, o círculo no plano complexo C , centrado em $a_x(i, i)$ e de raio $\sum_{j=1}^n |a_x(i, j)|, j \neq i$, isto é ,

$$\mathfrak{R}_i = \left\{ z \in C \mid |z - a_x(i, i)| \leq \sum_{j=1}^n |a_x(i, j)| \right\}, \quad (3.12)$$

então, os autovalores da matriz A_x pertencem ao conjunto

$$\mathfrak{R} = \bigcup_{i=1}^M \mathfrak{R}_i. \quad (3.13)$$

Exemplificamos geometricamente , para o caso de quadratura angular com simetria de nível com $N = 8$, os círculos de Gerschgorin representados na figura 3.1 , com diferentes escalas nos eixos cartesianos, daí a razão de parecerem elipses.

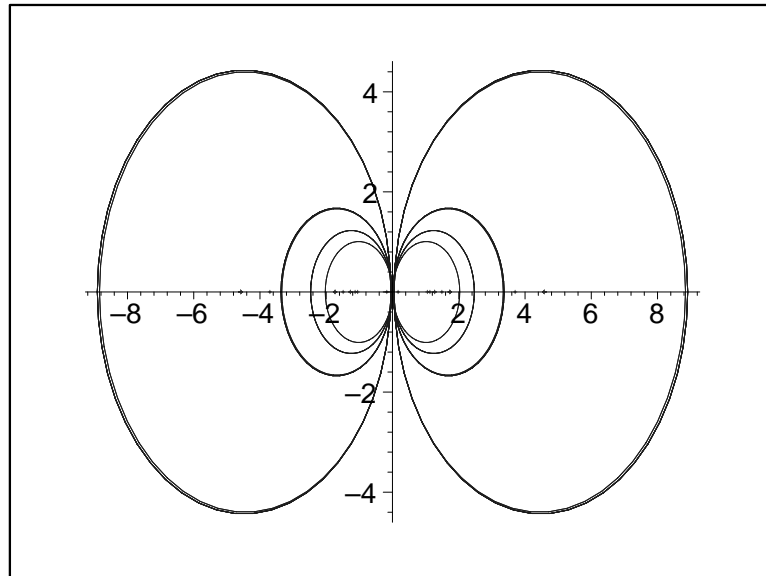


Figura 3.1 – Localização dos autovalores - círculos de Gerschgorin para $N = 8$.

3.2.2 O Comportamento do Raio Espectral

Observamos que o raio espectral, $\rho(A_x)$, cresce (lentamente) à medida que N aumenta, conforme exemplificado pela Tabela 3.2 e Tabela 3.3, construídas a partir dos dados do problema ilustrativo da Seção 5.1. Utilizamos a técnica de ajuste de funções (critério dos mínimos quadrados) e concluimos que, para o conjunto de quadratura angular utilizado e independente do parâmetro σ_s , a melhor forma de estimar o crescimento(lento) do raio espectral da matriz A_x , a partir do parâmetro N é:

$$\rho_{A_x}(N) \cong 1.0931 \times N^{0.6843}. \quad (3.14)$$

O ajuste linear

$$\rho_{A_x}(N) \cong 0.3836 N + 1.2808 \quad (3.15)$$

mostrou-se menos adequado, conforme representação gráfica na figura 3.2.

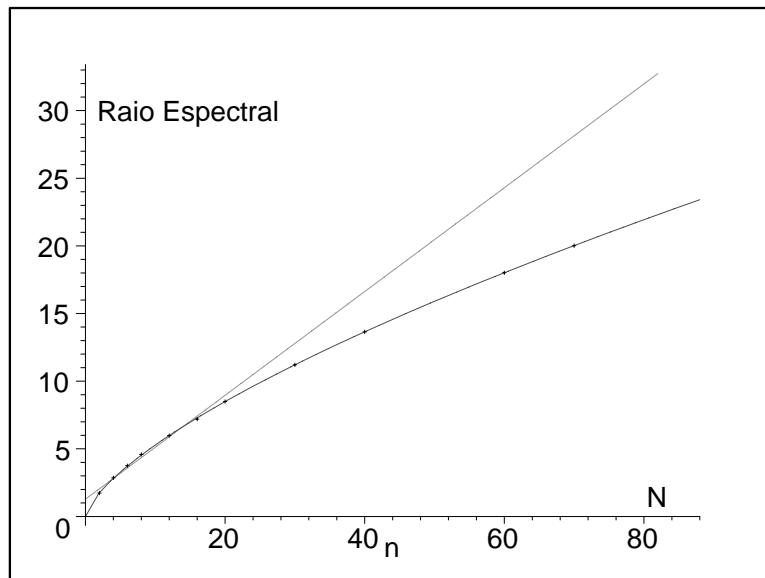


Figura 3.2 – Estimativa do comportamento do raio espectral $\rho_{A_x}(N)$

3.3 O Espectro LTS_6 Bidimensional

O espectro da matriz LTS_4 bidimensional foi descrito em [Hauser et al., 2001a]. Nessa seção detalhamos a análise espectral da matriz LTS_6 de transporte bidimensional na variável x , considerando o conjunto de quadratura angular com simetria de nível S_6 descrito em [Lewis e W. F. Miller, 1984]. As $M = \frac{N(N+2)}{2} = 24$ direções angulares Ω_m são ordenadas conforme a figura 3.3. Construiremos o espectro da matriz LTS_6 bidimensional, utilizando a análise espectral da equação (3.1).

Aplicando a primeira restrição, Eq. (3.5), ao problema de autovalores da Eq. (3.4) obtivemos a relação de dispersão (3.8), a qual, para $N = 6$ gera seis autovalores reais: $\pm s_1$, $\pm s_2$ e $\pm s_3$. Os respectivos autovetores (linearmente independentes), são obtidos a partir da

- Ω_m , $m = 7$ e 13 possuem a mesma abcissa $-\mu_3$.

Assim, podemos escolher:

- $\alpha_m \left(\frac{\sigma_t}{\mu_1} \right) \neq 0$, para $m = 3, 5, 6, 21, 23$ e 24 ; nas demais $\alpha_m \left(\frac{\sigma_t}{\mu_1} \right) = 0$.
- $\alpha_m \left(-\frac{\sigma_t}{\mu_1} \right) \neq 0$, para $m = 9, 11, 12, 15, 17$ e 18 ; nas demais $\alpha_m \left(-\frac{\sigma_t}{\mu_1} \right) = 0$.
- $\alpha_m \left(\frac{\sigma_t}{\mu_2} \right) \neq 0$, para $m = 2, 4, 20$ e 22 ; nas demais $\alpha_m \left(\frac{\sigma_t}{\mu_2} \right) = 0$.
- $\alpha_m \left(-\frac{\sigma_t}{\mu_2} \right) \neq 0$, para $m = 8, 10, 14$ e 16 ; nas demais $\alpha_m \left(-\frac{\sigma_t}{\mu_2} \right) = 0$.
- $\alpha_m \left(\frac{\sigma_t}{\mu_3} \right) \neq 0$, para $m = 1$ e 19 ; nas demais $\alpha_m \left(\frac{\sigma_t}{\mu_3} \right) = 0$.
- $\alpha_m \left(-\frac{\sigma_t}{\mu_3} \right) \neq 0$, para $m = 7$ e 13 nas demais $\alpha_m \left(-\frac{\sigma_t}{\mu_3} \right) = 0$.

Então da Eq. (3.9) obtemos:

$$w_1 \alpha_3 \left(\frac{\sigma_t}{\mu_1} \right) + w_2 \alpha_5 \left(\frac{\sigma_t}{\mu_1} \right) + w_1 \alpha_6 \left(\frac{\sigma_t}{\mu_1} \right) + w_1 \alpha_{21} \left(\frac{\sigma_t}{\mu_1} \right) + w_2 \alpha_{23} \left(\frac{\sigma_t}{\mu_1} \right) + w_1 \alpha_{24} \left(\frac{\sigma_t}{\mu_1} \right) = 0. \quad (3.16)$$

O conjunto solução da equação (3.16)(de 6 incógnitas) é um subespaço vetorial de dimensão 5 do espaço solução do problema de autovalores dado pela Eq.(3.4) . Assim, correspondendo ao autovalor de multiplicidade cinco $\frac{\sigma_t}{\mu_1}$, podemos escolher cinco autovetores linearmente independentes, que são obtidos de

$$w_1 \alpha_9 \left(\frac{-\sigma_t}{\mu_1} \right) + w_2 \alpha_{11} \left(\frac{-\sigma_t}{\mu_1} \right) + w_1 \alpha_{12} \left(\frac{-\sigma_t}{\mu_1} \right) + w_1 \alpha_{15} \left(\frac{-\sigma_t}{\mu_1} \right) + w_2 \alpha_{17} \left(\frac{-\sigma_t}{\mu_1} \right) + w_1 \alpha_{18} \left(\frac{-\sigma_t}{\mu_1} \right) = 0. \quad (3.17)$$

Também da Eq.(3.9) obtemos:

$$w_2 \alpha_2 \left(\frac{\sigma_t}{\mu_2} \right) + w_2 \alpha_4 \left(\frac{\sigma_t}{\mu_2} \right) + w_2 \alpha_{20} \left(\frac{\sigma_t}{\mu_2} \right) + w_2 \alpha_{22} \left(\frac{\sigma_t}{\mu_2} \right) = 0 \quad (3.18)$$

e,

$$w_2 \alpha_8 \left(\frac{-\sigma_t}{\mu_2} \right) + w_2 \alpha_{10} \left(\frac{-\sigma_t}{\mu_2} \right) + w_2 \alpha_{14} \left(\frac{-\sigma_t}{\mu_2} \right) + w_2 \alpha_{16} \left(\frac{-\sigma_t}{\mu_2} \right) = 0. \quad (3.19)$$

O conjunto solução de cada uma das Eqs.(3.18) e (3.19)(de 4 incógnitas cada) é um subespaço vetorial de dimensão 3 do espaço solução do problema de autovalores dado por (3.4). Assim, correspondendo aos autovalores de multiplicidade três $\pm \frac{\sigma_t}{\mu_2}$, podemos escolher, respectivamente, três autovetores linearmente independentes.

O Espectro LTS_6 Bidimensional fica completamente descrito com a determinação dos autovetores correspondentes aos autovalores simples, $\pm \frac{\sigma_t}{\mu_3}$, a partir de

$$w_1 \alpha_1 \begin{pmatrix} \frac{\sigma_t}{\mu_3} \\ \frac{\sigma_t}{\mu_3} \end{pmatrix} + w_1 \alpha_{19} \begin{pmatrix} \frac{\sigma_t}{\mu_3} \\ \frac{\sigma_t}{\mu_3} \end{pmatrix} = 0, \quad (3.20)$$

$$w_1 \alpha_7 \begin{pmatrix} -\frac{\sigma_t}{\mu_3} \\ -\frac{\sigma_t}{\mu_3} \end{pmatrix} + w_1 \alpha_{13} \begin{pmatrix} -\frac{\sigma_t}{\mu_3} \\ -\frac{\sigma_t}{\mu_3} \end{pmatrix} = 0. \quad (3.21)$$

Para fins de ilustração e comparação, utilizando Fortran90, MapleVI e Mathcad, reproduzimos os mesmos autovalores da matriz A_x , de multiplicidade ≥ 1 , dados por (3.11). Da mesma forma foram calculados e listados na Tabela 3.1 os autovalores reais simples que podem ser obtidos a partir de (3.8) para o caso 2 do problema ilustrativo, com $\sigma_s = 0.99$, $\sigma_t = 1$.

N	autovalores obtidos da equação 3.8
4	$\pm 0.1725106897, \pm 1.906007905$
6	$\pm 0.1725564824, \pm 1.207343377, \pm 2.852025917$
8	$\pm 0.1703698233, \pm 1.128498956, \pm 1.490624766, \pm 3.700657476$

Tabela 3.1 – Autovalores simples

3.4 Análise de Condicionamento das Matrizes

As palavras *condição* e *condicionamento* são usadas de maneira informal para indicar quão sensível é a solução de um problema com respeito a pequenas mudanças nos dados de entrada. Um problema é dito *mal condicionado* se pequenas alterações nos dados geram grandes alterações nas soluções. Para certos tipos de problemas se pode definir o **número**

de condicionamento, [Ortega, 1990], o qual pode indicar se o problema é bem ou mal condicionado.

3.4.1 Um Número de Condicionamento Para o Fluxo

Suponhamos que nosso problema consiste em estimar o fluxo angular médio, na direção discreta Ω_m , com respeito à variável x , num ponto x . Perguntamo-nos: qual é o efeito causado em $\Psi_{mx}(x)$ por uma pequena perturbação em x ? Se a pergunta refere-se aos erros absolutos, podemos recorrer ao teorema do valor médio e escrever:

$$\Psi_{mx}(x+h) - \Psi_{mx}(x) = \Psi'_{mx}(\xi)h \cong \Psi'_{mx}(x)h. \quad (3.22)$$

Assim, se Ψ'_x não é muito grande, o efeito sobre Ψ_x é pequeno. Usualmente, nessas questões, o erro relativo é que resulta significativo. Ao perturbar x em uma quantidade h , temos que $\frac{h}{x}$ é o *tamanho relativo da perturbação*. Igualmente, quando se perturba $\Psi_{mx}(x)$ e se obtém $\Psi_{mx}(x+h)$, o tamanho da perturbação é:

$$\frac{\Psi_{mx}(x+h) - \Psi_{mx}(x)}{\Psi_{mx}(x)} \approx \frac{h\Psi'_{mx}(x)}{\Psi_{mx}(x)} = \left[\frac{x\Psi'_{mx}(x)}{\Psi_{mx}(x)} \right] \left(\frac{h}{x} \right) \quad (3.23)$$

por conseguinte, o fator

$$\frac{x\Psi'_{mx}(x)}{\Psi_{mx}(x)} \quad (3.24)$$

serve como um *Número de Condição* para o problema de avaliar um fluxo angular médio, na m -ésima direção, com respeito à variável x , num ponto x de seu domínio.

Essa definição pode ser estendida para o fluxo expresso em forma matricial, com o objetivo de mostrar uma das razões que ajudou a melhorar os resultados para o problema ilustrativo utilizando a formulação **LTS_N2D – DiagExp**.

Em continuidade, definimos $\|A_x\|$ a *norma matricial do máximo das linhas*, isto é:

$$\|A_x\| = \|A_x\|_\infty = \max \left\{ \sum_{j=1}^M |a_x(i,j)|, 1 \leq i \leq M \right\}, \quad (3.25)$$

e seja $\|C\|$ a norma vetorial do máximo :

$$\|\mathbf{C}\| = \|\mathbf{C}\|_{\infty} = \max \{ C_j, j = 1 : M \} . \quad (3.26)$$

Vamos comparar o *Número de Condicionamento* do fluxo angular transverso expresso na forma (2.34) com a estimativa (2.38) .

- Para $\Psi(x, 0)$ dado por (2.34) temos:

$$\left\| \frac{x\Psi'(x, 0)}{\Psi(x, 0)} \right\| = \frac{\|x\mathbf{V}_x D_x e^{D_x x} \mathbf{C}\|}{\|\mathbf{V}_x e^{D_x x} \mathbf{C}\|} \leq \|x\| \|D_x\| = |x| \rho(A_x). \quad (3.27)$$

- Se $\Psi(x, 0)$ é escolhido como (2.38) temos:

$$\left\| \frac{x\Psi'(x, 0)}{\Psi(x, 0)} \right\| = \frac{\|-\lambda x \mathbf{F} e^{-\lambda x}\|}{\|\mathbf{F} e^{-\lambda x}\|} \leq \|x\| \lambda = |x| \lambda. \quad (3.28)$$

Observamos que:

- Se x próximo de zero, o *Número de Condicionamento* de $\Psi(x, 0)$, dado por (3.27), também está próximo do vetor nulo. Para x se aproximando de 20, valor máximo do nosso domínio de definição do problema ilustrativo, o número de condicionamento se aproxima de $20\rho(A_x)$. Assim, pequenos erros relativos em x , podem conduzir a erros relativos em $\Psi(x, 0)$ próximos de $20\rho(A_x)$.
- Da mesma forma, se x próximo de zero, o *Número de Condicionamento* de $\Psi(x, 0)$, dado por (3.28), também está próximo do vetor nulo e para x se aproximando de 20, o número de condicionamento se aproxima de 20λ . Assim, pequenos erros relativos em x , podem conduzir a erros relativos em $\Psi(x, 0)$ próximos de 20λ .

Os valores de λ , associados aos parâmetros materiais característicos do meio, utilizados na resolução do problema ilustrativo do capítulo 5, foram tais que $\lambda < \rho(A_x)$.

Logo para um mesmo valor da variável x , o *Número de Condicionamento* obtido em (3.28) é menor que (3.27).

Porém, o contrário ocorre no caso do valor de λ dado pela Eq. (2.44), pois nesse caso $\lambda \simeq \rho(A_x)$.

3.4.2 Análise do Condicionamento da Matriz $LTS_N 2D$

Nesta seção determinaremos o número de condicionamento da matriz $LTS_N 2D$ para o problema ilustrativo da Seção 5.1.

Uma das medidas utilizadas é dada por

$$Cond(A_x) = \|A_x\| \cdot \|A_x^{-1}\|. \quad (3.29)$$

Quanto maior o $Cond(A_x)$, mais sensível a perturbações será o problema associado à matriz A_x .

No cálculo do $Cond(A_x)$, podemos escolher qualquer norma matricial usual, [Ortega e W.C.Rheinboldt, 1970], podendo ser a norma do máximo das linhas (3.25).

Citamos aqui a matriz de Hilbert de ordem M , $Hilbert(M)$, apenas a título de um exemplo típico de matriz mal condicionada. Tem-se que, por exemplo,

- $Cond(Hilbert(4)) = 28375$,
- $Cond(Hilbert(12)) \cong .411544 \times 10^{17}$ e
- $Cond(Hilbert(24)) \cong .814326 \times 10^{35}$.

Nas Tabelas 3.2 e 3.3 apresentamos os valores de $Cond(A_x)$, da matriz A_x dos casos 1 e 2 do problema ilustrativo do capítulo 5.

Verificamos que $Cond(A_x)$ parece ser "pequeno", mas não sentimos segurança em afirmar que A_x é bem condicionada, ou que A_x é mal condicionada. Para podermos decidir, escolhemos utilizar uma outra medida de condicionamento, o Determinante Normalizado da Matriz A_x , cuja ordem de grandeza é menor do que a ordem de grandeza do $Cond(A_x)$.

Por definição, o Determinante Normalizado da Matriz A_x é dado por

$$Norm(A_x) = \frac{det(A_x)}{\alpha_1 \alpha_2 \dots \alpha_M}, \quad (3.30)$$

onde, para $k = 1 : M$, definimos

$$\alpha_k = \sqrt{\sum_{j=1}^M a_x^2(k, j)} \quad (3.31)$$

e o valor que pode ocorrer é limitado :

$$-1 < Norm(A_x) < 1. \quad (3.32)$$

Quanto mais afastado de ± 1 , isto é, quanto mais próximo de zero estiver o $Norm(A_x)$, mais mal condicionada será a matriz A_x .

Apresentamos na Tabela 3.2 e na Tabela 3.3 os valores do $Norm(A_x)$ para o problema ilustrativo caso1 e caso2 respectivamente. Analisando esses dados concluímos que:

- A matriz A_x é bem condicionada para problema homogêneo de transporte bastante absorvedor ($\sigma_a = 0.5$).
- para o caso de baixa absorção, a seção de choque de espalhamento $\sigma_s = 0.99$, a matriz A_x pode apresentar problemas de condicionamento.

N	$Cond(A_x)$	$Norm(A_x)$	$\rho(A_x)$
2	2.500000001	0.7573964493	1.732050807
4	5.633409668	0.736448439	2.856969806
6	7.903163424	0.7315842640	3.750438332
8	9.955594930	0.7284236728	4.582575490
12	13.33645456	0.7210524774	5.980410567
16	16.27164442	0.7113439131	7.196481209

Tabela 3.2 – Medidas de condicionamento e raio espectral para $\sigma_t =$

$$1 \text{ e } \sigma_s = 0.5$$

N	$Cond(A_x)$	$Norm(A_x)$	$\rho(A_x)$
2	149.5000041	0.01777659201	1.732050808
4	274.4824985	0.01685418214	2.8569698064
6	373.3190829	0.01663858789	3.750438332
8	466.7946257	0.01644280187	4.582575490
12	623.5124769	0.01586203252	5.980410567
16	763.4330309	0.01506389348	7.196481209

Tabela 3.3 – Medidas de condicionamento e raio espectral para $\sigma_t = 1$ e $\sigma_s = 0.99$

No caso das medidas de condicionamento, a melhor função, que produziu menor resíduo, foi uma parábola, com concavidade para baixo, o que nos impede de fazer estimativas para valores crescentes de N .

Para $\sigma_s = 0.5$, função do tipo linear foi a que produziu o segundo menor resíduo para a função $Cond_{A_x}(N)$:

$$Cond_{A_x}(N) \cong 1.887N + 0.406$$

e para o Determinante Normalizado (vide figura 3.4) obtivemos

$$Norm_{A_x}(N) \cong 0.765N^{-0.0233}$$

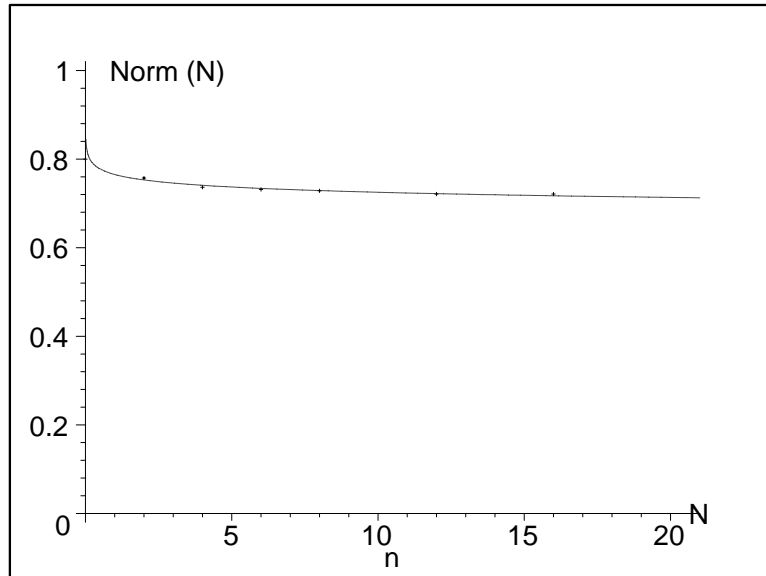


Figura 3.4 – Decrescimento do determinante normalizado $Norm_{A_x}(N)$ para $\sigma_s = 0.5$

Para $\sigma_s = 0.99$, a função do tipo potência foi a que produziu o segundo menor resíduo para a função $Cond_{A_x}(N)$:

$$Cond_{A_x}(N) \cong 90.220N^{0.780}$$

, e para o Determinante Normalizado :

$$Norm_{A_x}(N) \cong -0.000172N + 0.0178,$$

representado geometricamente na figura 3.5.

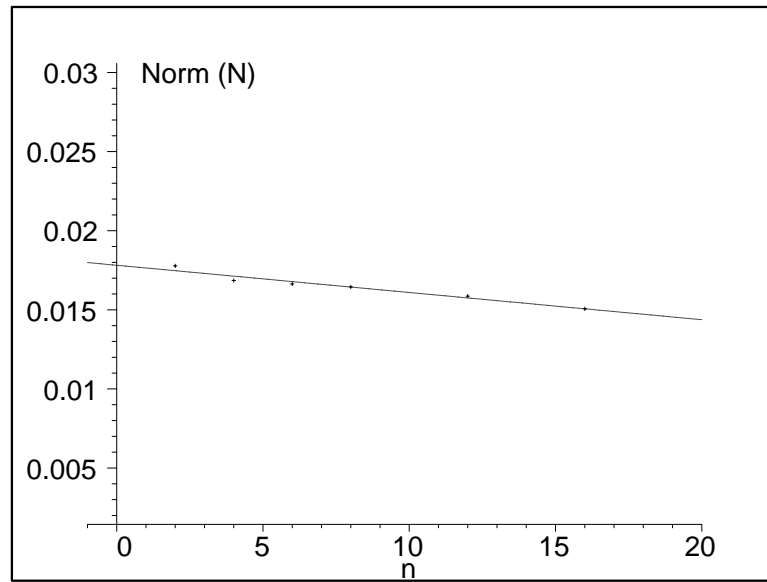


Figura 3.5 – Decréscimo do determinante normalizado $Norm_{A_x}(N)$ para $\sigma_s = 0.99$

ESTUDO DA CONVERGÊNCIA DAS APROXIMAÇÕES LTS_N PARA ELEVADA ORDEM DE QUADRATURA

O método proposto nesta tese gera aproximações cuja análise pode ser colocada no marco das ferramentas da análise funcional, e assim ter uma idéia geral sobre a convergência das aproximações obtidas com os métodos $LTS_{N2D} - \text{Diag}$ e $LTS_{N2D} - \text{DiagExp}$. Como referência citamos os trabalhos desenvolvidos por [Pazos e Vilhena, 1998], [Pazos e Vilhena, 1999a], [Pazos e Vilhena, 1999b], que estudaram a convergência do método LTS_N unidimensional e LTS_N bidimensional espectral. Para tanto, devemos definir os chamados erros no fluxo aproximado e na fórmula da quadratura, depois estabelecer uma relação entre eles para finalmente tentar dar uma estimativa global do erro no fluxo aproximado.

Consideremos a equação do problema de transporte monoenergético estacionário bidimensional em geometria retangular

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial \psi}{\partial x}(x, y, \mu, \eta) + \eta \frac{\partial \psi}{\partial y}(x, y, \mu, \eta) + \sigma_t \psi(x, y, \mu, \eta) = \\ = q(x, y, \mu, \eta) + \int_V \psi(x, y, \mu', \eta') k(\mu, \eta, \mu', \eta') d\mu' d\eta'. \end{aligned} \quad (4.1)$$

Na Eq. (4.1) :

$(x, y) \in [0, a] \times [0, b]$, são as variáveis da geometria retangular,

$\psi(x, y, \mu, \eta)$ representa o fluxo angular de partículas na posição (x, y) migrando na direção (μ, η) ,

σ_t é a seção de choque total ,

$k(\mu, \eta, \mu', \eta')$ o núcleo de espalhamento,

$q(x, y, \mu, \eta)$ a fonte,

$V = \{ (\mu, \eta) \mid \mu^2 + \eta^2 \leq 1 \}$.

As condições de contorno abrangem fluxo de entrada conhecido e reflexão especular.

Vamos denotar com $\mathbf{X} = [0, a] \times [0, b]$ nosso espaço de configuração, o espaço base é $\mathbf{E} = L^1(\mathbf{X} \times \mathbf{V})$. Os espaços aproximantes são $\mathbf{E}_M = \prod_{m=1}^M L^1(X \times \{(\mu_m, \eta_m)\})$.

As soluções são estudadas nos subespaços:

$$W = \left\{ \psi \in \mathbf{E} \mid \mu \frac{\partial \psi}{\partial x} + \eta \frac{\partial \psi}{\partial y} \in \mathbf{E} \right\}$$

e

$$W_M = \left\{ \{\psi_m\} \in \mathbf{E}_M \mid \mu_m \frac{\partial \psi_m}{\partial x} + \eta_m \frac{\partial \psi_m}{\partial y} \in L^1(\mathbf{X}), \quad \forall m = 1, 2, \dots, M \right\}. \quad (4.2)$$

Fixando a direção $\Omega_m = (\mu_m, \eta_m)$, definimos a função *erro no fluxo aproximado* como

$$\epsilon_m(x, y) = \psi(x, y, \mu_m, \eta_m) - \Psi_m(x, y), \quad (4.3)$$

e a função *erro na fórmula da quadratura* por

$$\tau_m(x, y) = \int_V \sigma_s(\mu_m, \eta_m, \mu', \eta') \psi(x, y, \mu', \eta') d\mu' d\eta' - \sum_{n=1}^M \omega_n k_{mn} \Psi_n(x, y, \mu_m, \eta_m). \quad (4.4)$$

Com essas definições obtém-se a seguinte equação entre esses erros :

$$\mu_m \frac{\partial \epsilon_m}{\partial x}(x, y) + \eta_m \frac{\partial \epsilon_m}{\partial y}(x, y) + \sigma_t \epsilon_m(x, y) = \sum_{n=1}^M w_n k_{mn} \epsilon_n(x, y) + \tau_m(x, y). \quad (4.5)$$

Integramos a Eq. (4.5) com respeito a x no intervalo $[0, a]$ e dividimos por a . Integramos a Eq. (4.5) com respeito a y no intervalo $[0, b]$ e dividimos por b . Obtemos as *equações nodais para o erro*, unidimensionais, nas variáveis y e x respectivamente:

$$\eta_m \frac{d\epsilon_{my}}{dy}(y) + \frac{\mu_m}{a} [\epsilon_m(a, y) - \epsilon_m(0, y)] + \sigma_t \epsilon_{my}(y) = \tau_{my}(y) + \sum_{n=1}^M w_n k_{mn} \epsilon_{ny}(y)$$

$$\mu_m \frac{d\epsilon_{mx}}{dx}(x) + \frac{\eta_m}{a} [\epsilon_m(x, b) - \epsilon_m(x, 0)] + \sigma_t \epsilon_{mx}(x) = \tau_{mx}(x) + \sum_{n=1}^M w_n k_{mn} \epsilon_{nx}(x).$$
(4.6)

Na Eq.(4.6) definimos os chamados *erros médios do fluxo* na direção discreta $\Omega_m = (\mu_m, \eta_m)$ da forma seguinte :

$$\epsilon_{my}(y) = \frac{1}{a} \int_0^a \epsilon_m(x, y) dx,$$

$$\epsilon_{mx}(x) = \frac{1}{b} \int_0^b \epsilon_m(x, y) dy.$$
(4.7)

Também, definimos na Eq.(refoq46) *erros médios na fórmula de quadratura*

$$\tau_y(y) = \frac{1}{a} \int_0^a \tau(x, y) dx,$$

$$\tau_x(x) = \frac{1}{b} \int_0^b \tau(x, y) dy.$$
(4.8)

Agora, definimos o produto escalar e a norma :

$$\epsilon_y = (\epsilon_{my})_{m=1:M},$$

$$\langle \epsilon_y | \gamma_y \rangle = \sum_{m=1}^M w_m \int_0^b \epsilon_{my}(y) \gamma_{my}(y) dy,$$
(4.9)

$$\|\epsilon_y\|^2 = \langle \epsilon_y | \epsilon_y \rangle,$$

sendo que a última norma é denominada *erro ponderado do fluxo* em y .

De forma similar

$$\begin{aligned}\epsilon_x &= (\epsilon_{mx})_{m=1:M}, \\ \langle \epsilon_x | \gamma_x \rangle &= \sum_{m=1}^M w_m \int_0^a \epsilon_{mx}(x) \gamma_{mx}(x) dx, \\ \|\epsilon_x\|^2 &= \langle \epsilon_x | \epsilon_x \rangle,\end{aligned}\tag{4.10}$$

onde, a última expressão é o *erro ponderado do fluxo* em x .

Na Eq. (4.6) multiplicamos a primeira equação por ϵ_{my} e pelo peso w_m , somemos em relação a m e integremos em relação a y :

$$\begin{aligned}\int_0^b \sum_{m=1}^M w_m \eta_m \epsilon_{my} \frac{d\epsilon_{my}}{dy} dy + \int_0^b \sum_{m=1}^M \frac{\mu_m}{a} w_m \epsilon_{my} [\epsilon_m(a, y) - \epsilon_m(0, y)] dy + \sigma_t \|\epsilon_y\|^2 &= \\ = \int_0^b \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^M w_m w_n k_{mn} \epsilon_{my} \epsilon_{ny} dy + \int_0^b \sum_{m=1}^M w_m \epsilon_{my} \tau_{my} dy.\end{aligned}\tag{4.11}$$

Utilizando a notação

$$\beta_{my}(y) = \frac{\mu_m}{a} [\epsilon_m(a, y) - \epsilon_m(0, y)],$$

reescrevemos a última equação na seguinte forma

$$\begin{aligned}\sum_{m=1}^M \frac{w_m \eta_m}{2} [\epsilon_y^2(mb) - \epsilon_{my}^2(0)] + \langle \epsilon_y | \beta_y \rangle + \sigma_t \|\epsilon_y\|^2 &= \\ = \int_0^b \sum_{m=1}^M \sum_{n=1}^M w_m w_n k_{mn} \epsilon_{my} \epsilon_{ny} dy + \int_0^b \sum_{m=1}^M w_m \epsilon_{my} \tau_{my} dy.\end{aligned}\tag{4.12}$$

Aplicamos inequações de Cauchy-Schwarz nos dois termos da direita desta expressão e obtemos

$$\langle \epsilon_y | \beta_y \rangle + \sigma_t \|\epsilon_y\|^2 \leq K_0^M \|\epsilon_y\|^2 + K_1^M \|\epsilon_y\| \cdot \|\tau_y\| + \sum_{m=1}^M \frac{w_m \eta_m}{2} [\epsilon_y^2(mb) - \epsilon_{my}^2(0)],\tag{4.13}$$

onde K_0^M e K_1^M são parâmetros associados ao núcleo de espalhamento e aos pesos da quadratura, [Pazos e Vilhena, 1999a], [Pazos e Vilhena, 1999b], [Pazos et al., 2001]. No

nosso caso, $K_1^M = 1$ e $K_0^M = \max \{ k_{mn} \} b^2 \sum_{m=1}^M w_m$.

Utilizaremos a seguinte inequação

$$\|\epsilon_y\| \cdot \|\tau_y\| \leq \frac{1}{2} \left(\delta \|\epsilon_y\|^2 + \frac{\|\tau_y\|^2}{\delta} \right) \quad (4.14)$$

e assim a inequação (4.13) se escreve

$$\left\langle \epsilon_y \mid \left(\sigma_t - K_0^M - K_1^M \frac{\delta}{2} \right) \epsilon_y \right\rangle + \langle \epsilon_y \mid \beta_y \rangle \leq \frac{1}{2\delta} \|\tau_y\|^2 + \text{const} \cdot M^{-2} \|F_2\|_{L^2(e^{-2\lambda_0 y} dy)}, \quad (4.15)$$

onde F_2 depende das condições de fronteira nos lados superior e inferior do retângulo.

Escolhendo $\delta > 0$ de forma que

$$K_0^M + K_1^M \frac{\delta}{2} = \frac{\sigma_t}{2},$$

encontramos a seguinte relação entre os erros relativos a y :

$$\frac{\sigma_t}{2} \langle \epsilon_y \mid \epsilon_y \rangle \leq \frac{K_1^M}{2(\sigma_t - 2K_0^M)} \|\tau_y\|^2 + \sum_{k=1}^2 c_k M^{-2} \|F_k\|_{L^2}^2, \quad (4.16)$$

onde as constantes reais c_k e as funções F_k dependem das condições de fronteira. Quando dividimos por σ_t obtemos a seguinte relação entre o erro ponderado no fluxo aproximado em y e o erro ponderado na fórmula de quadratura também em y :

$$\|\epsilon_y\|^2 \leq c_0 \|\tau_y\|^2 + \sum_{k=1}^2 c_k M^{-2} \|F_k\|_{L^2}^2, \quad (4.17)$$

sendo c_0 a constante definida por

$$c_0 = \frac{K_1^M}{\sigma_t(\sigma_t - 2K_0^M)}.$$

Obtemos uma relação similar entre $\|\epsilon_x\|$ e $\|\tau_x\|$. Em continuidade, definimos o *erro global do fluxo aproximado* como

$$\epsilon = \sqrt{\epsilon_x^2 + \epsilon_y^2}, \quad (4.18)$$

e o *erro global na fórmula de quadratura*

$$\tau = \sqrt{\tau_x^2 + \tau_y^2}, \quad (4.19)$$

Finalmente, obtemos a seguinte relação entre os erros globais :

$$\epsilon^2 \leq c_0 \tau^2 + \sum_{k=1}^2 c_k M^{-2} \|F_k\|_{L^2}^2, \quad (4.20)$$

Para N suficientemente grande (isto é M muito maior) o segundo termo da direita será dominado pelo primeiro termo. Com a escolha apropriada de quadratura, [Stamm'ler e Abbate, 1983] e [Lewis e W. F. Miller, 1984], e com condições de fronteira adequadas, a seqüência converge à solução exata, prevista pela teoria de semigrupos fortemente contínuos.

RESULTADOS NUMÉRICOS

Neste capítulo apresentamos os resultados numéricos gerados pelos novos métodos **LTS_N2D – Diag** e **LTS_N2D – DiagExp** para elevadas ordens de quadratura angular. Esses métodos foram utilizados na resolução de um problema ilustrativo, primeiramente investigado por R. C. Barros e E.W.Larsen, [Barros e Larsen, 1991], para o caso em que a constante de decaimento λ nas aproximações exponenciais para os termos de fuga transversal foi identificada com a seção de choque macroscópica de absorção σ_a do meio.

Em sua tese de doutorado, [Mello, 2000] estendeu esse estudo para valores de λ identificados com outros parâmetros do meio material, já descritos na seção 2.3 e comparou seus resultados com os gerados, dentre outros citados, pelo método *LN* com grade espacial fina: 8G4 se $\sigma_a = 0.5$ e 4G4 se $\sigma_a = 0.01$.

As formulações **LTS_N2D – Diag** e **LTS_N2D – DiagExp** foram primeiramente utilizadas para estimar numericamente a fuga de nêutrons, para o caso de quadratura angular com $N = 4$. Comparamos com os resultados gerados por [Zabadal, 1994] e por [Mello, 2000] para o mesmo problema, conforme pode ser visto na tabela 5.2 e tabela 5.5. Nos cálculos também utilizamos três diferentes valores para λ : σ_a , L^{-1} e $\frac{1}{\rho(A_x)}$.

No método **LTS_N2D – DiagExp**, realizamos uma tentativa de cálculo utilizando um valor de λ maior, a partir da Eq(2.44) porém, os valores obtidos para os casos 1 e 2 do nosso problema não foram satisfatórios.

Utilizamos o *Erro Relativo* para estimar a diferença entre duas aproximações da corrente na região de fuga, com a notação:

$$Erro\ Relativo_{(N,N+2k)} \cong \left| \frac{J_N - J_{N+2k}}{J_N} \right| \cong \left| \frac{J_N - J_{N+2k}}{J_{N+2k}} \right|. \quad (5.1)$$

onde, o valor assumido por k na tabela 5.4 e na tabela 5.7 é 2 ou 4, conforme necessário.

O algoritmo **LTS_N2D – DiagExp** mostrou-se mais eficiente, na precisão dos resultados e no tempo computacional. Apresentamos na tabela 5.3 e tabela 5.6, os valores para a fuga de nêutrons, obtidos para as ordens de quadraturas: $N = 6$, $N = 8$ e $N = 12$. Notamos que erro relativo percentual entre $N = 8$ e $N = 12$ é pequeno. (vide tabela 5.4 e tabela 5.7).

Utilizamos o conjunto de quadratura angular com simetria de nível, dado por [Lewis e W. F. Miller, 1984]. As $M = \frac{N(N+2)}{2}$ direções angulares Ω_m são ordenadas conforme exemplificado na figura 2.1 para $N = 4$ e na figura 3.3 para $N = 6$.

5.1 Problema Ilustrativo

Consideremos o problema de transporte de nêutrons, com espalhamento isotrópico, numa placa quadrada de 20 cm de lado. Na região $(0, 1) \times (0, 1)$ existe uma fonte de nêutrons de intensidade unitária. A figura 5.1 representa geometricamente a situação, e mostra as condições de contorno usadas: as faces pontilhadas têm contorno reflexivo e as demais, vácuo.

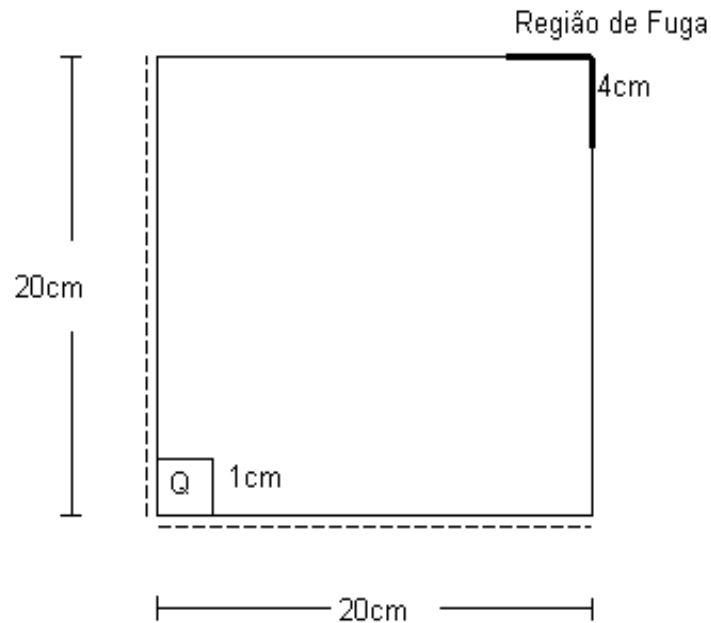


Figura 5.1 – Domínio do problema ilustrativo: as faces pontilhadas têm contorno reflexivo e as demais, vácuo.

O problema é tratado de duas formas:

- Caso 1: A seção de choque total é de $\sigma_t = 1\text{cm}^{-1}$ e o valor da seção de choque espalhamento é $\sigma_s = 0.5\text{cm}^{-1}$ ($\sigma_a = 0.5\text{cm}^{-1}$). Temos aqui um problema homogêneo de transporte bastante absorvedor.
- Caso 2: O problema é tratado com parâmetros materiais difusivos, isto é, baixa absorção. A seção de choque total é $\sigma_t = 1\text{cm}^{-1}$ e a seção de choque espalhamento é $\sigma_s = 0.99\text{cm}^{-1}$ ($\sigma_a = 0.01\text{cm}^{-1}$).

Nosso objetivo é estimar a fuga de nêutrons expressa pela corrente parcial na região de fuga, $J_N = J_x + J_y$, a partir dos fluxos angulares transversos emergentes do contorno :

$$J_x = \sum_{n=1}^{M/2} w_n \mu_n \int_{16}^{20} \psi_n(20, y) dy, \quad (5.2)$$

e

$$J_y = \sum_{n=1}^{M/2} w_n \mu_n \int_{16}^{20} \psi_n(x, 20) dx. \quad (5.3)$$

Na implementação computacional dos dois métodos utilizamos integração numérica de Simpson no cálculo das convoluções, e para resolver o sistema linear, a rotina para Decomposição em Valores Singulares, inclusa na *IMSL Libraries Reference* e, as modificações (2.45) e (2.47).

No anexo A incluímos o arquivo fonte original para o algoritmo **LTS₈2D – DiagExp**, para o problema ilustrativo - caso 2.

Utilizando um microcomputador PentiumIII - 866 MHz, 128 Mb RAM, obtivemos os resultados numéricos para a fuga de nêutrons, gerados pelos métodos **LTS_N2D – Diag** e **LTS_N2D – DiagExp**.

Os resultados numéricos obtidos para o problema ilustrativo-caso1 estão listados na tabela 5.2 e na tabela 5.3. Registramos na tabela 5.4 o erro relativo percentual entre duas aproximações . O menor valor para esse erro ocorreu com $\lambda = 1/\rho(A)$.

Na tabela 5.5 e na tabela 5.6 apresentamos os resultados numéricos para o segundo caso do problema ilustrativo.

Podemos ver na tabela 5.7 que o erro relativo percentual entre duas aproximações diminui, à medida que N aumenta, assumindo menor valor para $\lambda = \sigma_a$.

O problema de mal-condicionamento das matrizes A_x e A_y , detectado no capítulo 3, não influenciou o resultado. Provavelmente essa questão foi superada pela diagonalização dessas matrizes.

Registramos o tempo computacional necessário na execução dos algoritmos, implementados no sistema de computação algébrica e simbólica *Maple6.02a* para o problema ilustrativo-caso 1. O tempo de execução para o caso 2 está muito próximo dos valores registrados na tabela 5.1.

Ordem de Quadratura	Tempo Computacional(s)	Tempo Computacional(s)
N	LTS_N2D – DiagExp	LTS_N2D – Diag
4	6.36	88.79
6	74.77	302.91
8	971.62	5337.03
12	86739.85	--

Tabela 5.1 – Tempo de execução computacional no sistema de computação algébrica e simbólica *Maple6.02a*

Método	λ	Fuga de Nêutrons : $J_N(cm^{-2}s^{-1})$
LN(8G4) [Mello, 2000]		$0,1178 \times 10^{-11}$
LTS₄2D [Zabadal, 1994]		$0,4700 \times 10^{-11}$
SGF – ExpN(4G4) [Mello, 2000]	σ_a	0.1280×10^{-11}
	L^{-1}	0.1369×10^{-11}
	$1/\rho(A)$	0.1340×10^{-11}
LTS₄2D – Diag		0.3141×10^{-5}
LTS₄2D – Exp	σ_a	0.2497×10^{-11}
	L^{-1}	0.1422×10^{-10}
	$1/\rho(A)$	0.3597×10^{-11}

Tabela 5.2 – Resultados numéricos para o problema ilustrativo-caso1 para $N = 4$

N	λ	LTS_N2D – DiagExp : $J_N(cm^{-2}s^{-1})$
6	σ_a	0.2147×10^{-11}
	L^{-1}	0.9122×10^{-11}
	$1/\rho(A)$	0.3410×10^{-11}
8	σ_a	0.1489×10^{-11}
	L^{-1}	0.2883×10^{-11}
	$1/\rho(A)$	0.1863×10^{-11}
12	σ_a	0.1417×10^{-11}
	L^{-1}	0.2735×10^{-11}
	$1/\rho(A)$	0.1825×10^{-11}

Tabela 5.3 – Resultados numéricos para o problema ilustrativo-caso1
para $N > 4$

N, N+k	λ	<i>Erro Relativo</i> _(N,N+k) <i>Percentual</i>
4, 6	σ_a	14.29
	L^{-1}	35.85
	$1/\rho(A)$	5.48
6, 8	σ_a	44.19
	L^{-1}	68.39
	$1/\rho(A)$	45.36
8, 12	σ_a	4.83
	L^{-1}	5.13
	$1/\rho(A)$	2.03

Tabela 5.4 – Erro relativo percentual no cálculo da fuga de nêutrons
do caso1 do problema ilustrativo para $N > 4$ pelo
método **LTS_N2D – DiagExp**

Método	λ	Fuga de Nêutrons : $J_N(cm^{-2}s^{-1})$
LN(4G4)[Mello, 2000]		$0,4154 \times 10^{-2}$
LTS ₄ 2D[Zabadal, 1994]		$0,4800 \times 10^{-2}$
CCN(4G4)[Mello, 2000]		$0,1143 \times 10^{-1}$
SGF – ExpN(2G4)[Mello, 2000]	σ_a	0.4181×10^{-2}
	L^{-1}	0.4212×10^{-2}
	$1/\rho(A)$	0.4229×10^{-2}
LTS ₄ 2D – Diag		0.2467×10^{-3}
LTS ₄ 2D – DiagExp	σ_a	0.1177×10^{-1}
	L^{-1}	0.3531×10^{-1}
	$1/\rho(A)$	0.1208×10^{-1}

Tabela 5.5 – Resultados numéricos para o problema ilustrativo-caso2
para $N = 4$

N	λ	LTS _N 2D – DiagExp : $J_N(cm^{-2}s^{-1})$
6	σ_a	0.5478×10^{-2}
	L^{-1}	0.5289×10^{-2}
	$1/\rho(A)$	0.6777×10^{-2}
8	σ_a	0.4145×10^{-2}
	L^{-1}	0.4530×10^{-2}
	$1/\rho(A)$	0.4429×10^{-2}
12	σ_a	0.4141×10^{-2}
	L^{-1}	0.4257×10^{-2}
	$1/\rho(A)$	0.4330×10^{-2}

Tabela 5.6 – Resultados numéricos para o problema ilustrativo-caso2
para $N > 4$

$N, N+k$	λ	<i>Erro Relativo</i> _(N,N+k) <i>Percentual</i>
4, 6	σ_a	53.45
	L^{-1}	85.02
	$1/\rho(A)$	43.89
6, 8	σ_a	24.33
	L^{-1}	14.35
	$1/\rho(A)$	34.64
8, 12	σ_a	0.096
	L^{-1}	0.60
	$1/\rho(A)$	0.44

Tabela 5.7 – Erro relativo percentual no cálculo da fuga de nêutrons do caso 2 do problema ilustrativo para $N > 4$ pelo método **LTS_N2D – DiagExp**

CONCLUSÕES

Propomos na presente tese gerar uma solução numérica da equação bidimensional do transporte para elevadas ordens de quadratura angular no modelo de ordenadas discretas (S_N).

Foi estabelecida a convergência do método desenvolvido, que ocorre com condições de fronteira e quadratura angular adequadas.

Outro grande avanço foi a obtenção de bons resultados numéricos para o problema de ordenadas discretas bidimensional, com fonte fixa, isotrópico, estacionário e para ordem de quadratura angular $N = 12$.

Nesse trabalho de tese, a partir de [Zabadal et al., 1993], conseguimos uma

- otimização no cálculo da solução geral devido à diagonalização da matriz de transporte LTS_N .

$$\mathcal{L}^{-1}\{(sI - A_x)^{-1}\} = V_x \mathcal{L}^{-1}\{(sI - D_x)^{-1}\} V_x^{-1} = V_x e^{D_x x} V_x^{-1};$$

- e a otimização no cálculo da solução específica do problema. O sistema linear que precisa ser resolvido de $4M^2 = N^4 + 2N^3 + 4N^2$ passa a ter $6M = 3N^2 + 6N$ equações. Por exemplo, se $N = 12$, o sistema linear final diminui de 24768 para 504 equações.

Isso foi possível com a criação de um novo algoritmo para o método LTS_N bidimensional, o qual utiliza o método da diagonalização da matriz de transporte. Descrevemos o espectro da matriz LTS_N Bidimensional, da forma $sI - A_x$, mostrando ser possível diagonalizar a matriz A_x .

Primeiramente deduzimos o método **LTS_N2D – Diag**, que utiliza a diagonalização da matriz LTS_N bidimensional, e os termos de fuga transversal, que surgem nas equações S_N integradas transversalmente, foram expressos como combinação linear dos autovetores multiplicados por exponenciais dos respectivos autovalores. Porém, esse método, quando aplicado na resolução de um problema ilustrativo disponível na literatura para comparação, não se mostrou eficiente.

Melhores resultados foram obtidos com o método **LTS_N2D – DiagExp** no qual propomos uma aproximação exponencial para os termos de fuga transversal. Com isso o problema ilustrativo pode ser resolvido satisfatoriamente para um conjunto de quadratura **S₁₂**.

Procuramos fortalecer nosso trabalho realizando uma análise de condicionamento. Determinando um *número de condicionamento* para o termo de fuga transversal, mostramos que a aproximação exponencial para os termos de fuga transversal é mais bem condicionada do que a representação pelo fluxo angular médio da formulação **LTS_N2D – Diag**, quando $\lambda < \rho(A_x)$. Concluimos também que a matriz de transporte LTS_N tem problemas de condicionamento se houver baixa absorção, como ocorre no caso 2 do problema ilustrativo ($\sigma_a = 0.01$).

Realizamos um estudo sobre a convergência das aproximações LTS_N bidimensionais para elevada ordem de quadratura. Definimos os chamados erros no fluxo aproximado e na fórmula da quadratura e estabelecemos uma relação entre eles. Uma estimativa global do erro no fluxo aproximado foi apresentada.

Percebemos que o presente estudo é apenas um *marco* inicial para uma seqüência de trabalhos que podem ser desenvolvidos. A fim de obter resultados numéricos para maiores valores de N sentimos ser necessário o estudo de um conjunto de quadratura para o problema de ordenadas discretas bidimensional. Segundo [Lewis e W. F. Miller, 1984] pesos negativos começam a aparecer a partir de $N = 22$.

Outras perspectivas de continuidade e aplicações do presente trabalho incluem estender nosso estudo a problemas de transporte de nêutrons com espalhamento linearmente anisotrópico e a problemas tridimensionais. Também, pretendemos aplicar os algoritmos **LTS_N2D – Diag** e **LTS_N2D – DiagExp** em problemas de espalhamento isotrópico em meios heterogêneos.

ANEXO A

Matriz $sI - A_x$ para $N = 4$

ANEXO B

Código Fonte para o Problema Ilustrativo com $N = 8$

No presente documento apresentamos um exemplo da implementação computacional do método **LTS_N2D – DiagExp** no sistema de computação algébrica e simbólica Maple6.02a.

```
> restart;
> zt :=1:  zs:=.99:  N:=8:  M:=N*(N+2)/2:

> va:=.9511897:  vb:=.7867958:vc:=.5773503:vd:=.2182179:K:=vd:
> u :=[va,vb,vb,vc,vc,vc,vd,vd,vd,vd, \
> -va,-vb,-vb,-vc,-vc,-vc,-vd,-vd,
> \ -vd,-vd,-va,-vb,-vb,-vc,-vc,-vc,
> -vd,-vd,-vd,-vd , va,vb,vb,vc,vc,vc,vd,vd,vd,vd]:
> w3 :=0.0925926:  w2 :=0.0907407:  w1:=.1209877:

> w :=[w1,w2,w2,w1,w2,w3,w2,w2,w2,w1,
> w1,w2,w2,w1,w2,w3,w2, \ w2,w2,w1,w1,
> w2,w2,w1,w2,w3,w2,w2,w2,w1,w1,w2,w2,\ w1,w2,w3,w2,w2,w2,w1]:

> SP:=sum('w[k]', 'k'=1..M);
                                     3.9999996

> Ax :=Matrix(M):
> for i to M do
> for j to M do
```



```

> if i=j then Ax[i,j]
> :=-(SP*zt-zs*w[j])/(SP*u[i])
> elif i<>j then Ax[i,j] :=(zs*w[j])/(SP*u[i])
> fi
> od;
> od: i:='i': j:='j':

> LinearAlgebra[ConditionNumber](Ax);
466.7946257

```

Cálculo dos autovalores e autovetores

```

> R, Vx:=LinearAlgebra[Eigenvectors](Ax):
> evalm(R);

[-3.700657476 + 0. I, 3.700657476 + 0. I, 1.490624766 + 0. I, .1703698233 + 0. I,
-1.490624766 + 0. I, -.1703698233 + 0. I, -1.128498956 + 0. I,
-1.051315001 + 0. I, 1.128498956 + 0. I, 1.051315001 + 0. I, 4.582575490 + 0. I,
-4.582575490 + 0. I, -4.582575490 + 0. I, 4.582575490 + 0. I,
-1.270977806 + 0. I, 1.270977806 + 0. I, -1.270977806 + 0. I, 1.270977806 + 0. I,
-1.270977806 + 0. I, 1.270977806 + 0. I, 1.732050715 + 0. I, -1.732050715 + 0. I,
-1.732050715 + 0. I, 1.732050715 + 0. I, 1.732050715 + 0. I, -1.732050715 + 0. I,
-1.732050715 + 0. I, 1.732050715 + 0. I, 1.732050715 + 0. I, -1.732050715 + 0. I,
-4.582575490 + 0. I, 4.582575490 + 0. I, -4.582575490 + 0. I, 4.582575490 + 0. I,
-4.582575490 + 0. I, 4.582575490 + 0. I, 4.582575490 + 0. I, -4.582575490 + 0. I,
-4.582575490 + 0. I, 4.582575490 + 0. I]
> K-1/Re(R[40]);
0.

```

Definindo o parâmetro K para estimativas do fluxo nas fronteiras

Para tirar a prova que a matriz Ax é Diagonalizável: $Vx \cdot D \cdot Vx^{-1} = Ax$

```

> dx:=LinearAlgebra[DiagonalMatrix](R):
> Vxinv:=LinearAlgebra[MatrixInverse](Vx):
> Prova:=evalm(Vx.dx.Vxinv):

```

Matriz Diagonal exp(Dx)

```

> Dxp:=Matrix(M):

> for i to M do for j to M do
> if Re(dx[i,j]) > 0 then Dxp[i,j]:=exp(dx[i,j]*x);
> elif Re(dx[i,j]) < 0 then Dxp[i,j]:=0; fi
> od;od;i:='i': j:='j':
> #evalm(Dxp);
> Dxpa:=Matrix(M):
> for i to M do
> for j to M do
> Dxpa[i,j]:=subs(x=20, Dxp[i,j])
> od;od;i:='i': j:='j':
> #evalm(Dxpa);
> Dxpax:=Matrix(M):
> for i to M do
> for j to M do
> Dxpax[i,j]:=subs(x=x-20, Dxp[i,j]);
> od;od;i:='i': j:='j':
> #evalm(Dxpax);

```

Matriz Diagonal dos autovalores negativos

```

> Dxn:=Matrix(M):
> for i to M do for j to M do
> if Re(dx[i,j]) < 0 then Dxn[i,j]:=exp(dx[i,j]*x);
> elif Re(dx[i,j]) > 0 then Dxn[i,j]:=0; fi
> od;od;i:='i': j:='j':
> #evalm(Dxn);

```

Matriz Produto $Px := Vx \cdot Dx \cdot p \cdot a \cdot Dxp \cdot (x-a) \cdot Vx(-1) + Vx \cdot Dxn \cdot x \cdot Vx(-1)$

```
> Px:=evalm((Vx . Dxp . Dxp . Vxinv) + (Vx . Dxn . Vxinv )):
```

Matriz Produto Px:=Vx Dx xVx(-1)

```
> #Px:=Matrix(M,evalm(Vx.Dx.Vxinv));
```

```
> #Px[1,3];
```

Matriz Ay

```
> n :=[ -vd,-vd,-vd,-vd,-vc, -vc, -vc,
```

```
> -vb,-vb,- va, -vd,-vd,-vd,-vd,
```

```
> -vc, -vc, -vc, -vb,-vb,- va,
```

```
> vd,vd,vd,vd,vc, vc, vc, vb,vb, va,vd,vd,
```

```
> vd,vd,vc, vc, vc, vb,vb, va]:
```

```
> Ay :=Matrix(M):
```

```
> for i to M do
```

```
> for j to M do
```

```
> if i=j then Ay[i,j]
```

```
> :=-(3.9999996*zt-zs*w[j])/(SP*n[i])
```

```
> elif i<>j then Ay[i,j] :=(zs*w[j])/(SP*n[i])
```

```
> fi
```

```
> od;
```

```
> od:i:='i':j:='j':
```

```
> LinearAlgebra[ConditionNumber] (Ay);
```

Cálculo dos autovalores e autovetores de A_y

```
> S, Vy:=LinearAlgebra[Eigenvectors](Ay):
```

Para tirar a prova que a matriz A_y é Diagonalizável: $Vy*D*Vy^{-1} = Ay$

```
> dy:=LinearAlgebra[DiagonalMatrix](S):
```

```
> Vyinv:=LinearAlgebra[MatrixInverse](Vy):
```

```
> #ProvaAy:=evalm(Vy.dy.Vyinv-Ay):
```

```
> Dyp:=Matrix(M):
```

```
> for i to M do for j to M do
```

```
> if Re(dy[i,j]) > 0 then Dyp[i,j]:=exp(dy[i,j]*y);
```

```
> elif Re(dy[i,j]) < 0 then Dyp[i,j]:=0; fi
```

```
> od;od;i:='i': j:='j':
```

```
> #evalm(Dyp);
```

```
> Dypb:=Matrix(M):
```

```
> for i to M do
```

```
> for j to M do
```

```
> Dypb[i,j]:=subs(y=20, Dyp[i,j])
```

```
> od;od;i:='i': j:='j':
```

```
> #evalm(Dypb);
```

Criando a Matriz $\exp(Dxp(x-a))$

```
> Dypyb:=Matrix(M):
```

```
> for i to M do
```

```
> for j to M do
```

```
> Dypyb[i,j]:=subs(y=y-20, Dyp[i,j]);
```

```
> od;od;i:='i': j:='j':
```

```
> #evalm(Dypyb);
```

Matriz Diagonal dos autovalores negativos

```
> Dyn:=Matrix(M):
> for i to M do for j to M do
> if Re(dy[i,j]) < 0 then Dyn[i,j]:=exp(dy[i,j]*y);
> elif Re(dy[i,j]) > 0 then Dyn[i,j]:=0; fi
> od;od;i:='i': j:='j':
> #evalm(Dyn);
```

Matriz Produto $P_y := V_y \cdot D_y p b \cdot D_y p (y-b) \cdot V_y(-1) + V_y \cdot D_y n y \cdot V_y(-1)$

```
> Py:=evalm((Vy . Dypb . Dypyb . Vyinv) + (Vy . Dyn . Vyinv )):
```

Definindo as incógnitas

```
> A:=Vector(M): B:=Vector(M): C:=Vector(M):
> Da:=Vector(M):
> E:=Vector(M): F:=Vector(M):
> for i to M do
> A[i]:=a[i];B[i]:=b[i];C[i]:=c[i];
> Da[i]:=d[i];E[i]:=e[i];F[i]:=f[i];
> od;i:='i':
```

Definição dos Fluxos Angulares Médios e Fluxos na Fronteira

```

> fix:=evalm((Vx . Dxp. Dxp. A )+ (Vx . Dxn. A)):
> fiy:=evalm((Vy . Dypb. Dypb. B )+ (Vy . Dyn. B)):
> #fixo:=evalm((Vx . Dxp. Dxp. C )+ (Vx . Dxn. C)):
> #fiyo:=evalm((Vy . Dypb. Dypb. Da)+ (Vy . Dyn. Da)):
> #fixb:=evalm((Vx . Dxp. Dxp. E )+ (Vx . Dxn. E)):
> #fiay:=evalm((Vy . Dypb. Dypb. F )+ (Vy . Dyn. F)):

```

Nova definição dos Fluxos angulares transversos (na Fronteira)

```

> fixo:=Vector(M):

> for i to M do
>   fixo[i]:=exp(-K*x)*C[i]
>   od:i:'i':
> fiyo:=Vector(M):
> for i to M do
>   fiyo[i]:=exp(-K*y)*Da[i]
>   od:i:'i':
> fixb:=Vector(M):

> for i to M do
>   fixb[i]:=exp(-K*x)*E[i]
>   od:i:'i':
> fiay:=Vector(M):

> for i to M do
>   fiay[i]:=exp(-K*y)*F[i]
>   od:i:'i':

```

Gerando os vetores Fyo, Fxo, Sx e Sy da Solução Geral

```

> FIY0:=Vector(M):
> for i to M/4 do
> FIY0[i]:=(1/20)*evalf(int(fixo[((3*M)/4)+i],x=0..20));
> FIY0[(M/4)+i]:=(1/20)*int(fixo[(M/2)+i],x=0..20);
> FIY0[(M/2)+i]:=(1/20)*int(fixo[(M/2)+i],x=0..20);
> FIY0[((3*M)/4)+i]:=(1/20)*int(fixo[((3*M)/4)+i],x=0..20);
> od:i:='i':

> #evalm(FIY0);
> FIX0:=Vector(M):
> for i to M/4 do
> FIX0[i]:=(1/20)*int(fioy[i],y=0..20);
> FIX0[(M/4)+i]:=(1/20)*int(fioy[i],y=0..20);
> FIX0[(M/2)+i]:=(1/20)*int(fioy[((3*M)/4)+i],y=0..20);
> FIX0[((3*M)/4)+i]:=(1/20)*int(fioy[((3*M)/4)+i],y=0..20);
> od:i:='i':

> #evalm(FIX0);
> FIXA:=Vector(M):
> for i to M/4 do
> FIXA[i]:=(1/20)*int(fiay[i],y=0..20);
> FIXA[((3*M)/4)+i]:=(1/20)*int(fiay[((3*M)/4)+i],y=0..20);
> od:
> i:='i':
> #evalm(FIXA);

```

```

> FIYB:=Vector(M):
> for i to M/2 do
> FIYB[(M/2)+i]:=(1/20)*int(fixb[(M/2)+i],x=0..20)
> od:
> i:='i':

> #evalm(FIYB);

```

Definição dos termos de Fonte $S_x(x)$ e $S_y(y)$

```

> fixocc:=Vector(M):
> for i to M/4 do fixocc[i]:=fixo[((3*M)/4)+i]od :
> for i to M/4 do fixocc[(M/4)+i]:=fixo[(M/4)+i] od:
> for i to M/4 do fixocc[(M/2)+i]:=fixo[(M/4)+i] od:
> for i to M/4 do fixocc[((3*M)/4)+i]:=fixo[((3*M)/4)+i] od:
> i:='i':

```

```

> fixbcc:=Vector(M):
> for i to M/2 do
> fixbcc[i]:=0 od:
> for i to M/2 do fixbcc[(M/2)+i]:=fixb[(M/2)+i] od:
> i:='i':

```

```

> SX:=Vector(M):
> for i to M do
> SX[i]:=((Heaviside(x)-Heaviside(x-1))/20*u[i])-(n[i]/(20*u[i])) \
> *(fixbcc[i]-fixocc[i]);

```



```

> od:

> fioycc:=Vector(M):
> for i to M/4 do    fioycc[i]:=fioy[i];
> fioycc[(M/4)+i]:=fioy[i];
> fioycc[(M/2)+i]:=fioy[((3*M)/4)+i];
> fioycc[((3*M)/4)+i]:=fioy[((3*M)/4)+i];
> od:          i:='i':

> fiaycc:=Vector(M):
> for i to M/4 do
> fiaycc[i]:=fiay[i] od:
> for i to M/2 do fiaycc[(M/4)+i]:=0 od:
> for i to M/4 do fiaycc[((3*M)/4)+i]:=fiay[((3*M)/4)+i]od:
> i:='i':

> SY:=Vector(M):
> for i to M do
> SY[i]:=((Heaviside(y)-Heaviside(y-1))/20*n[i])-(u[i]/(20*n[i]))*(fiaycc[i]-fioy
> od:i:='i':

```

Construindo o Cálculo das Convoluções

```

> CNx:=evalm(Vx .Dxn . Vxinv):
> Pxconv:=Matrix(M):
> for i to M do

```

```

> for j to M do
> Pxconv[i,j]:=subs(x=20-t,CNx[i,j]);
> od:
> od: i:='i':j:='j':
> #Pxconv[1,3];

> SXconv:=Vector(M):
> for i to M do
> SXconv[i]:=subs(x=t,SX[i]);
> od: i:='i':
> #SXconv[3];
> PXSX:= Pxconv . SXconv:
> #int(PXSX[3],t=0..x);
> CONVX:=Vector(M):
> for i to M do
> CONVX[i]:=student[simpson]((PXSX[i],t=0.01..20));

> od:i:='i':j:='j':
> #evalm(CONVX);
> CNy:=evalm(Vy .Dyn . Vyinv):
> Pyconv:=Matrix(M):

> for i to M do
> for j to M do
> Pyconv[i,j]:=subs(y=20-t,CNy[i,j]);
> od:
> od: i:='i':j:='j':
> #Pyconv[1,3];

```

```

> SYconv:=Vector(M):
> for i to M do
> SYconv[i]:=subs(y=t,SY[i]);
> od:i:='i':

> PYSY:= Pyconv . SYconv:
> #SYconv[3];

> #int(PYSY[3],t=0..y):
> CONVY:=Vector(M):
> for i to M do
> CONVY[i]:=student[simpson](PYSY[i],t=0.01..20);

> od:i:='i':j:='j':

> #evalm(CONVY);

```

Construindo as Soluções Gerais: SGX e SGY

```

> PRODX:=evalm(Px &* FIXO):
> #PRODX[3];
> #FIXO[1];
> PRODY:=evalm(Py &* FIYO):

```

Solucao geral em x=20

```

> SGX:= Vector(M):

> for i to M do

```

```

> SGX[i]:=evalf(subs(x=20,PRODX[i])+CONVX[i]):
> od:i:='i':
> #evalm(SGX);

> SGY:= Vector(M):

> for i to M do
> SGY[i]:=evalf(subs(y=20,PRODY[i])+CONVY[i]):
> od:i:='i':

> #evalm(SGY);

```

Gerando o sistema de $6M = 24$ equações

```

> eq:=array(1..6*M):
> for i from 1 to M do
> eq[i] :=FIY0[i]=evalf(subs(y=0, fiy[i]));
> eq[i+M]:= FIX0[i]=evalf(subs(x=0, fix[i]));
> eq[i+2*M] :=FIYB[i]=evalf(subs(y=20, fiy[i]));
> eq[i+3*M] :=FIXA[i]=evalf(subs(x=20, fix[i]));
> eq[i+4*M] :=SGX[i]=evalf(subs(x=20, fix[i]));
> eq[i+5*M] :=SGY[i]=evalf(subs(y=20, fiy[i]));
> od: i:='i':
> #print(eq);
> eqs :=[seq(eq[i],i=1..6*M)]:i:='i':

> coefs :=Vector(6*M):

```

```

> for i to M do
>   coefs[i]:=A[i];
>   coefs[M+i]:=B[i];
>   coefs[2*M+i]:=C[i];
>   coefs[3*M+i]:=Da[i];
>   coefs[4*M+i]:=E[i];
>   coefs[5*M+i]:=F[i];
>   od:i:='i':
> L := [seq(coefs[i],i=1..6*M)]:

> (SE, TI):=LinearAlgebra[GenerateMatrix]( eqs,L):
> LinearAlgebra[ConditionNumber](SE);
                                Float( $\infty$ )

> #?SingularValues
> S:= LinearAlgebra[SingularValues](SE,
>   outputoptions['S']=[readonly]):
> U, Vt :=
> LinearAlgebra[SingularValues](SE, output=['U', 'Vt']):
> Tent:=U .(LinearAlgebra[ DiagonalMatrix]( S[1..6*M])) . Vt:

> Solucao1:=LinearAlgebra[LinearSolve](Tent, TI):

> #evalm(Solucao1);
> As:= Vector(M):
> for i to M do
>   As[i]:= Solucao1[i];
>   od: i:='i':

```

```
> ffix:=evalm((Vx . Dxp. Dxp. As )+ (Vx . Dxn. As)):
```

```
> Bs:= Vector(M):
```

```
> for i to M do
```

```
> Bs[i]:= Solucao1[M+i];
```

```
> od: i:='i':
```

```
> ffiy:=evalm((Vy . Dypb. Dypb. Bs )+ (Vy . Dyn. Bs)):
```

```
> Cs:= Vector(M):
```

```
> for i to M do
```

```
> Cs[i]:= Solucao1[2*M+i];
```

```
> od: i:='i':
```

```
> ffixo:=evalm(exp(-K*x)*Cs):
```

```
> Das:= Vector(M):
```

```
> for i to M do
```

```
> Das[i]:= Solucao1[3*M+i];
```

```
> od: i:='i':
```

```
> ffiyo:=evalm(exp(-K*y)*Das);
```

```
> Es:= Vector(M):
```

```
> for i to M do
```

```
> Es[i]:= Solucao1[4*M+i];
```

```
> od: i:='i':
```

```

> ffixb:=evalm(exp(-K*x)* Es );

> Fs:=Vector(M):
> for i to M do
> Fs[i]:= Solucao1[5*M+i];
> od:i='i':
> ffiay:=evalm(exp(-K*y)*Fs ):

```

Cálculo da Corrente na Região de Fuga

```

> Jxv:=Vector(M):
> for i to M/4 do
> Jxv[i]:=value(u[i]*w[i]*Int(ffiay[i],y=16..20)):

> Jxv[(3*M/4)+i]:=value(u[(3*M/4)+i]*w[(3*M/4)+i]*
> Int(ffiay[(3*M/4)+i],y=16..20)):
> od: i:='i':Jx:=sum('Jxv[i]', 'i'=1..M);


$$Jx := .002091510024$$


```

```

> Jyv:=Vector(M):
> for i from (M/2)+1 to M do
> Jyv[i]:=value(u[i]*w[i]*Int(ffixb[i],x=16..20)):

> od:i:='i':Jy:=sum('Jyv[i]', 'i'=1..M);

```

$$Jy := .002337781990$$

```

> J:=Jx+Jy;

```

$J := .004429292014$

> time():

971.627

Representação Geométrica dos Círculos de Gerschgorin

> with(linalg):with(plottools):

> with(plots):

> autov:= { seq([Re(R[i]),0],i=1..M) }:

> for i to M do

> raio[i]:=sum('abs(Ax[i,k])', 'k'=1..M)-abs(Ax[i,i]);

> od:

> for i to M do

> c1[i] :=

> circle([Ax[i,i],0],raio[i],thickness=2,color=blue):

> od:

> circ1 :=[seq(c1[i],i=1..M)]:

> plots[display]({plots[display](circ1),

> pointplot(autov,color=red,thickness=2)},title='Círculos de

> Gerschgorin N=8');

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Abreu, M. P., 1998. "On the spectrum of the one-speed Slab-geometry Discrete Ordinates Operator in Neutron Transport Theory", **Annals of Nuclear Energy**, vol. 25(15), pp. 1209–1219.

Barros, R. C., 1990. "A Spectral Nodal Method for the Solution of Discrete Ordinates Problems in a One and Two Dimensional Cartesian Geometry", Tese de doutorado, University of Michigan.

Barros, R. C., 1997. "On the Equivalence of Discontinuous Finite Element Methods for the Angular Discretization of the Linearized Boltzmann Equation in Slab Geometry", **Ann.Nuclear Energy**, vol. 24(13), pp. 1013–1026.

Barros, R. C. and Larsen, E. W., 1991. "A Spectral Nodal Method for the Solution of the S_N Equations in X,Y-Geometry for Highly Absorbing Deep Penetration Problems", **VIII Encontro Nacional de Física de Reatores e Termo-hidráulica**, vol. 1(1), pp. 423–428.

Barros, R. C. and Larsen, E. W., 1992. "A Spectral Nodal Method for One-group X,Y-geometry Discrete Ordinates Problems", **Nuclear Science and Engineering**, vol. 111(34), pp. 34–45.

Barros, R. C., Yavuz, M., Abreu, M. P., Filho, H. A., and Mello, J. A. M., 1998. "Progress in spectral Nodal Methods Applied to Discrete Ordinates Transport Problems", **Progress in Nuclear Energy**, vol. 33(1/2), pp. 117–154.

Bell, G. I. and Glasstone, S., 1985. "Nuclear Reactor Theory". Krieger Publishing Company, Malabar, Florida.

Biasotto, E., 1988. "**Estabilidade de Equações Diferenças**", Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Matemática do Instituto de Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Carpenter, D. C., 1998, A Bibliography on Finite Element and Related Methods Analysis in Reactor Physics Computations (1971-1997). Technical Report WAPD-TM-1635, Bettis Atomic Power Laboratory, West Mifflin, Pennsylvania.

Case, K. M. and Zweifel, P. F., 1967. "**Linear Transport Theory**". Addison-Wesley Publishing Co, Massachusetts.

Chandrasekhar, S., 1960. "**Radiative Transfer**". Dover Publications, Inc., New York.

Duderstadt, J. J. and Martin, W. R., 1979. "**Transport Theory**". John Wiley & Sons, Inc., New York.

Gonçalves, G. A., 1999. "**Solução LTS_N da Equação Adjunta de Transporte de Nêutrons com Fonte Arbitrária para Elevada Ordem de Quadratura numa Placa Homogênea**", Dissertação de mestrado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Hauser, E. B., 2000. "Formulação LTS_N Bidimensional para o Problema de Ordenadas Discretas Bidimensional com Elevada Quadratura", **Tendências em Matemática Aplicada-SBMAC**, vol. 1, pp. 111–123.

Hauser, E. B., de Vilhena, M. T. M. B., and Barros, R. C., 2001a. "Análise Espectral da matriz LTS_N para o Problema de Ordenadas Discretas Bidimensional", **XXIV Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional**, vol. 1, pp. 569.

Hauser, E. B., de Vilhena, M. T. M. B., and Pazos, R. P., 2001b. "Tópicos sobre a Convergência do Método LTS_N Nodal Bidimensional pra Elevada Ordem de Quadratura", **XXIV Congresso Nacional de Matemática Aplicada e Computacional-SBMAC**, vol. 1, pp. 357.

Lewis, E. E. and W. F. Miller, J., 1984. "**Computational Methods of Neutron Transport**". John Wiley & Sons, Inc., New York.

Mello, J. A. M., 2000. "**Modelagem Espectro-Nodal Exponencial para Problemas Monoenergéticos de Penetração Profunda segundo a Teoria de Transporte de Nêutrons na Formulação de Ordenadas Discretas em Geometria Cartesiana Bidimensional**", Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Nuclear, Universidade Federal de Janeiro, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

Mello, J. A. M. and Barros, R. C., 2002. "An Exponential Spectral Nodal Method for One-Speed X,Y- geometry Deep Penetration Discrete Ordinates Problems (Aceito para publicação)", **Annals of Nuclear Energy**.

N.K.Gupta, 1981. "Nodal methods for three-dimensional simulators", **Progress In Nuclear Energy**, vol. 1(7), pp. 127–149.

Ortega, J. M., 1990. "**Numerical Analysis: A Second Course**". SIAM, Filadelfia.

Ortega, J. M. and W.C.Rheinboldt, 1970. "**Iterative Solution of Non Linear Equations in Several Variables**". Academic Press, New York.

Pazos, R. P., Thompson, M., and Vilhena, M. T. M. B., 2001. "Error Bounds for Spectral Collocation Method in Linear Boltzmann Equation", **Atas do 53th Seminário Brasileiro de Análise**, vol. 1, pp. 209–328.

Pazos, R. P. and Vilhena, M. T. M. B., 1998. "Convergence of the LTS_N Method: Approach of C_0 Semi-Groups", **Progress in Nuclear Energy**, vol. 34(1), pp. 77–86.

Pazos, R. P. and Vilhena, M. T. M. B., 1999a. "Convergence in Transport Theory", **Applied and Numerical mathematics**, vol. 30, pp. 79–92.

Pazos, R. P. and Vilhena, M. T. M. B., 1999b. "Convergence of the Spectral Approximations for Steady-State Two-dimensional Transport Problem", **Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications—International Conference, Madrid, Spain**, vol. 2, pp. 1770.

R.D.Lawrence, 1986. "Progress in Nodal methods for the solution of the neutron diffusion and transport equations", **Progress In Nuclear Energy**, vol. 1(17), pp. 271–301.

Segatto, C. F. and Vilhena, M. T. M. B., 1997. "Solução Genérica da Equação de Transporte Unidimensional para Elevadas Ordens de Quadraturas", **Anais do XI ENFIR- Encontro Nacional de Física de Reatores e Termohidráulica-Poços de Caldas – MG**, vol. 1, pp. 238–242.

Segatto, C. F. and Vilhena, M. T. M. B., 1999. "The State-of-the-art of the LTS_N Method", **Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications-International Conference, Madrid, Spain**, vol. 2, pp. 1618–1631.

Segatto, C. F., Vilhena, M. T. M. B., and Gomes, M. G., 1999. "The One-Dimensional LTS_N Solution In a Slab With High Degree of Quadrature", **Annals of Nuclear Energy**, vol. 26, pp. 925–934.

Stamm'ler, R. J. J. and Abbate, M. J., 1983. "**Methods of Steady-State Reactor Physics in Nuclear Design**". Academic Press, London.

Vilhena, M. T. M. B. and Barichello, L. B., 1991. "A New Analytical Approach to Solve the Neutron Transport Equation", **Kerntechnik**, vol. 56(5), pp. 334–336.

Vilhena, M. T. M. B., Barichello, L. B., Zabadal, J., Segatto, C. F., and Cardona, A. V., 1998. "General Solution of One-dimensional Approximations To the Transport Equation", **Progress in Nuclear Energy**, vol. 33, pp. 99–115.

Vilhena, M. T. M. B., Barichello, L. B., Zabadal, J., Segatto, C. F., Cardona, A. V., and Pazos, R. P., 1999. "Solutions to the multidimensional linear transport equation by the spectral method", **Progress In Nuclear Energy**, vol. 3-4(35), pp. 275–291.

Warsa, J. S., 2000, "**Analytical Solution of the Discrete Ordinates Transport Equation**", Los Alamos National Laboratory, <http://www.mapleapps.com/categories/engineering/nuclear/html/transport.html>.

Yavuz, M., 1998. "Methods for Computing SN Eigenvalues and Eigenvectors of Slab Geometry Transport Problems", **Annals of Nuclear Energy**, vol. 25(1), pp. 149–160.

Zabadal, J., 1994. "**Solução Analítica da Equação de Ordenadas Discretas Multidimensional**", Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Zabadal, J., Vilhena, M. T. M. B., and Barichello, L. B., 1993. "Solução da Equação de Ordenada Discreta em Duas Dimensões pelo Método LTS_N ", **Anais do IX ENFIR-Encontro Nacional de Física de Reatores e Termohidráulica**, vol. 1, pp. 90–92. Caxambú, MG.

Zabadal, J., Vilhena, M. T. M. B., and Barichello, L. B., 1995. "Solution For Two-Dimensional One Group Discrete Ordinates Problem by the LTS_N Method", **Annals of Nuclear Energy**, vol. 22(2), pp. 131–134.

Zabadal, J., Vilhena, M. T. M. B., and Barichello, L. B., 1997. "An Analytical Solution for the Two-Dimensional Discrete Ordinate Problem In a Convex Domain", **Progress in Nuclear Energy**, vol. 31(3), pp. 225–228.

APÊNDICE I

Método da Diagonalização

A determinação de $\mathcal{L}^{-1}\{(sI - A_x)^{-1}\}$ utiliza, conforme detalhado no capítulo 3, o fato de que a matriz A_x pode ser decomposta em uma matriz diagonal pela relação (2.23)

$$A_x = \mathbf{V}_x \mathbf{D}_x \mathbf{V}_x^{-1},$$

onde, \mathbf{D}_x é a matriz diagonal dos autovalores de A_x e \mathbf{V}_x a matriz dos respectivos autovetores. Desta forma,

$$\begin{aligned} \mathcal{L}^{-1}\{(sI - A_x)^{-1}\} &= \mathcal{L}^{-1}\left\{\left(s\mathbf{V}_x \mathbf{V}_x^{-1} - \mathbf{V}_x \mathbf{D}_x \mathbf{V}_x^{-1}\right)^{-1}\right\} = \\ &= \mathcal{L}^{-1}\left\{\left(\mathbf{V}_x (sI - \mathbf{D}_x) \mathbf{V}_x^{-1}\right)^{-1}\right\} = \mathbf{V}_x \mathcal{L}^{-1}\{(sI - \mathbf{D}_x)^{-1}\} \mathbf{V}_x^{-1}. \end{aligned} \tag{I.1}$$

Considerando \mathbf{D}_x dada por

$$\mathbf{D}_x = \begin{bmatrix} r_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & r_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & r_M \end{bmatrix}, \tag{I.2}$$

então

$$s\mathbf{I} - \mathbf{D}_x = \begin{bmatrix} s - r_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & s - r_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & s - r_M \end{bmatrix}. \quad (\text{I.3})$$

Assim a inversa da matriz $(s\mathbf{I} - \mathbf{D}_x)$ é

$$(s\mathbf{I} - \mathbf{D}_x)^{-1} = \begin{bmatrix} s - r_1 & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & s - r_2 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & s - r_M \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \frac{1}{s - r_1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & \frac{1}{s - r_2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & \frac{1}{s - r_M} \end{bmatrix}. \quad (\text{I.4})$$

A transformada inversa de Laplace da matriz (I.4) é obtida aplicando a transformada inversa de Laplace em cada elemento da matriz, obtendo

$$\mathcal{L}^{-1}\{s\mathbf{I} - \mathbf{D}_x\} = \begin{bmatrix} e^{xr_1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & e^{xr_2} & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & 0 & e^{xr_M} \end{bmatrix} = e^{\mathbf{D}_x x}. \quad (\text{I.5})$$

Assim, fica bem determinada a forma (2.25) utilizada na construção dos algoritmos **LTS_N2D – Diag** e **LTS_N2D – DiagExp**:

$$\mathcal{L}^{-1}\{(sI - A_x)^{-1}\} = \mathbf{V}_x e^{\mathbf{D}_x x} \mathbf{V}_x^{-1}. \quad (\text{I.6})$$