

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

SOLUÇÃO ANALÍTICA DA EQUAÇÃO DE ORDENADAS DISCRETAS
MULTIDIMENSIONAL

por

Jorge R. S. Zabadal

Tese para a obtenção do título de

DOUTOR EM ENGENHARIA

Porto Alegre

1994

ESCOLA DE ENGENHARIA
BIBLIOTECA

SOLUÇÃO ANALÍTICA DA EQUAÇÃO DE ORDENADAS DISCRETAS
MULTIDIMENSIONAL

por

Jorge R. S. Zabadal
Engenheiro Químico, M.Sc.

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 Túllio M. B. de Vilhena

Aprovada por :

Prof. Dr. Liliane B. Barichello

Prof. Dr. Ricardo C. de Barros

Prof. Dr. Vilmar Trevisan

Prof. Dr. Sérgio V. Möller
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 26 de outubro de 1994

AGRADECIMENTOS

- Ao meu orientador, Professor Marco T. Vilhena, que sempre ofereceu apoio seguro nos momentos difíceis;
- Liliane e Paulinho, que me ensinaram a ter mais paciência;
- Cynthia, Edson e Luciano, que me pouparam muitos contratempos;
- Professor Vilmar Trevisan, pelas sugestões;
- CNEN, pelo suporte financeiro, e FAPERGS, pelo auxílio parcial.

RESUMO

Neste trabalho a formulação LTS_N para a solução de problemas de ordenadas discretas (SN) é estendida a duas e três dimensões, considerando meio heterogêneo, espalhamento anisotrópico e modelo de multigrupo. Para tal, o método LTS_N é aplicado às equações unidimensionais resultantes da integração das equações SN multidimensionais, gerando sistemas lineares para os fluxos angulares médios transformados. A solução desses sistemas fornece a transformada de Laplace da solução procurada, sem que nenhuma aproximação seja feita ao longo da sua obtenção. A posterior aplicação da transformada de Laplace inversa, efetuada através da técnica de expansão de Heaviside, fornece a solução analítica para os fluxos angulares médios e para os fluxos angulares transversos na fronteira do domínio.

As soluções geradas através do método LTS_N foram comparadas a resultados numéricos disponíveis na literatura, para problemas bidimensionais com espalhamento isotrópico e anisotrópico em coordenadas cartesianas, considerando meios homogêneos e heterogêneos. Problemas tridimensionais em coordenadas curvilíneas também são considerados.

ABSTRACT

"Analytical solution of the multidimensional discrete ordinates equation"

In this work, the LTSN formulation for the solution of discrete ordinates (SN) problems is extended to two and three dimensions, considering heterogeneous medium, anisotropic scattering and multigroup model. To this end, the LTSN method is applied to the one-dimensional equations resulting from the integration of the multidimensional SN equations, generating linear systems for the transformed average angular fluxes. Solving these systems, the Laplace transform of the solution are obtained, without any approximation along its derivation. Applying the inverse Laplace transform, by the Heaviside expansion technique, furnishes the analytical solution for the average angular fluxes and the transverse angular fluxes on the boundaries of the domain.

Solutions generated using LTSN method are compared with numerical results available in literature, for two-dimensional problems in Cartesian coordinates for isotropic and anisotropic scattering, considering homogeneous and heterogeneous media. Three-dimensional problems in curvilinear coordinates are also considered.

LISTA DE SÍMBOLOS

a, b, c limites superiores do domínio nas variáveis x , y e z , respectivamente.

g, g' índices do grupo de energia.

h_1, h_2, h_3 coeficientes métricos.

h_{ij} elemento genérico da transformada inversa das inversas das matrizes LTSN.

l índice do grau de anisotropia.

m índice da direção discreta.

r pólo de função racional na variável x , coordenada polar radial.

s, t pólos de função racional nas variáveis y e z , respectivamente.

u, v coordenadas curvilíneas.

x, y, z variáveis espaciais.

A coeficiente de Albedo.

$\bar{A}_x, \bar{A}_y, \bar{A}_z$ matrizes LTSN para as variáveis x , y e z , respectivamente.

$\bar{A}_x^{gg'}, \bar{A}_y^{gg'}, \bar{A}_z^{gg'}$ blocos das matrizes LTSN relativos aos grupos de energia g e g' .

B bloco de matriz.

G número de grupos de energia.

J, J_x, J_y corrente parcial e suas componentes nas variáveis x e y respectivamente

H função de Heaviside.

H_x, H_y, H_z transformadas de Laplace inversas das inversas das matrizes LTSN nas variáveis x, y e z , respectivamente.

L grau de anisotropia.

M número de direções discretas.

N ordem da quadratura angular.

P_l polinômio de Legendre de grau l .

P_l^l função de Legendre associada de grau l e ordem l .

Q termo de fonte.

α, β, γ coeficientes numéricos envolvendo cossenos diretores.

δ delta de Kronecker.

μ, η, ξ cossenos diretores.

θ coordenada polar angular.

$\psi_{mx}^g, \psi_{my}^g, \psi_{mz}^g$ fluxos angulares médios nas variáveis x, y e z , respectivamente, para o grupo de energia g .

ψ_m^g fluxo angular transverso na fronteira para problemas bidimensionais.

$\psi_m^x, \psi_m^y, \psi_m^z$ fluxos angulares transversos na fronteira para problemas tridimensionais.

$\psi_{\sim x0}, \psi_{\sim y0}, \psi_{\sim z0}$ vetores contendo os fluxos angulares transversos na fronteira, nas variáveis x, y e z , respectivamente.

$\psi_{\sim x}, \psi_{\sim y}, \psi_{\sim z}$ vetores contendo os fluxos angulares médios nas variáveis x, y e z , respectivamente.

$\bar{\psi}_{\sim x}, \bar{\psi}_{\sim y}, \bar{\psi}_{\sim z}$ vetores contendo as transformadas de Laplace dos fluxos angulares médios nas variáveis x, y e z , respectivamente.

$\bar{\psi}_{\sim x_0}, \bar{\psi}_{\sim y_0}, \bar{\psi}_{\sim z_0}$ vetores contendo as transformadas de Laplace dos fluxos angulares transversos na fronteira, nas variáveis x , y e z , respectivamente.

$\psi_{\sim x_0}^e, \psi_{\sim y_0}^e$ vetores contendo os fluxos angulares transversos que entram através da fronteira, nas variáveis x e y respectivamente.

$\psi_{\sim x_0}^s, \psi_{\sim y_0}^s$ vetores contendo os fluxos angulares transversos que saem através da fronteira, nas variáveis x e y respectivamente.

$\bar{\psi}_{\sim x_0}^e, \bar{\psi}_{\sim y_0}^e$ vetores contendo as transformadas de Laplace dos fluxos angulares transversos que entram através da fronteira, nas variáveis x e y respectivamente.

$\bar{\psi}_{\sim x_0}^s, \bar{\psi}_{\sim y_0}^s$ vetores contendo as transformadas de Laplace dos fluxos angulares transversos que saem através da fronteira, nas variáveis x e y respectivamente.

ϕ componente do vetor de condições de contorno, coordenada curvilínea, fluxo escalar.

$\bar{\phi}_{jx}, \bar{\phi}_{jy}, \bar{\phi}_{jz}$ componentes dos vetores contendo as transformadas de Laplace dos fluxos angulares transversos na fronteira, nas variáveis x , y e z , respectivamente.

ϕ^j fluxo escalar conhecido.

Φ^{ij} fluxo escalar obtido através de interpolação.

ρ coordenada curvilínea.

σ_s seção de choque de espalhamento.

$\sigma_1^{gg'}$ coeficiente da expansão da seção de choque de espalhamento em termos das funções de Legendre, envolvendo os grupos de energia g e g' .

$\sigma_{smn}^{gg'}$ seção de choque de espalhamento envolvendo os grupos de energia g e g' , e as direções discretas m e n .

α_t seção de choque total.

ϑ parâmetro que define o tipo de condição de contorno empregada.

ω_m peso da direção discreta m .

Ω vetor unitário que define a direção de propagação.

$\langle \varepsilon(v) \rangle$ valor esperado para o erro acumulado da variável v .

LISTA DE FIGURAS

2.1 - Problema de espalhamento isotrópico em uma placa	20
2.2 - Problemas em meio heterogêneo	23
3.1 - Transformação $w = e^z$	40
4.1 - Pontos originais e interpolados	44
5.1 - Domínio do problema original	56
5.2 - Domínio do problema em coordenadas cartesianas	57
5.3 - Isolinhas da função $\rho(r, \theta)$	60
5.4 - Sistema de coordenadas para um contorno arbitrário	61
5.5 - Problemas original e auxiliar	63
A.1 - Distribuição de probabilidades para a operação soma	84

LISTA DE TABELAS

2.1 - Corrente angular para $\sigma_t = 1\text{cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0,99\text{cm}^{-1}$	21
2.2 - Corrente angular para $\sigma_t = 1\text{cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0,5\text{cm}^{-1}$	22
2.3 - Corrente angular para o problema anisotrópico	24
2.4 - Corrente angular para o problema isotrópico	24
3.1 - Fluxo escalar em função da distância ao centro do reator	41
4.1 - Fluxo escalar no centro do reator	47
4.2 - Elementos do vetor σ ~	54
5.1 - Fluxo escalar nos pontos mapeados	64
6.1 - Tempo de processamento do programa	65

INDICE

RESUMO	iv
ABSTRACT	v
LISTA DE SÍMBOLOS	vi
LISTA DE FIGURAS	x
LISTA DE TABELAS	xi
1 - INTRODUÇÃO	1
2 - A FORMULAÇÃO LTS_N EM DUAS DIMENSÕES	5
2.1 - EQUAÇÕES S_N BIDIMENSIONAIS INTEGRADAS	5
2.2 - APLICAÇÃO DA FORMULAÇÃO LTS_N	9
2.3 - RESULTADOS NUMÉRICOS	19
2.3.1 - Problemas em meio homogêneo	19
2.3.1 - Problemas em meio heterogêneo	22
3 - A FORMULAÇÃO LTS_N EM TRÊS DIMENSÕES	25
3.1 - EQUAÇÕES S_N TRIDIMENSIONAIS INTEGRADAS	25
3.2 - APLICAÇÃO DA FORMULAÇÃO LTS_N	30
3.3 - RESULTADOS NUMÉRICOS	37
4 - O PROBLEMA INVERSO	42
4.1 - DETERMINAÇÃO DOS FLUXOS INCIDENTES	42
4.2 - RESULTADOS NUMÉRICOS	47
4.3 - DETERMINAÇÃO DAS SEÇÕES DE CHOQUE	48
4.4 - RESULTADOS NUMÉRICOS	53

5 - PROBLEMAS BIDIMENSIONAIS EM COORDENADAS CURVILÍNEAS	55
5.1 - RESULTADOS NUMÉRICOS	62
6 - TEMPO DE PROCESSAMENTO	65
7 - CONCLUSÕES	66
8 - REFERÊNCIAS	68
9 - BIBLIOGRAFIA CONSULTADA	71
APÊNDICES	73
A - A EQUAÇÃO DE TRANSPORTE	73
B - COEFICIENTES MÉTRICOS	78
C - ESTIMATIVA DO ERRO ACUMULADO NA INVERSÃO DAS MATRIZES LTS_N	80
C.1 - ESTIMATIVA DO ERRO PRODUZIDO NAS OPERAÇÕES ARITMÉTICAS	80
C.1.1 - Soma de números com precisão finita	81
C.1.2 - Produto de números com precisão finita	86
C.1.3 - Divisão de números com precisão finita	90
C.2 - OPERAÇÕES ENVOLVENDO POLINÔMIOS	91
C.3 - ERRO ACUMULADO NA ELIMINAÇÃO DE GAUSS	99
C.4 - INFLUÊNCIA DO ERRO ACUMULADO SOBRE AS RAÍZES ENCONTRADAS	104

1 INTRODUÇÃO

A teoria de transporte tem como objeto de estudo o transporte de partículas e de radiação em meios materiais. A pesquisa nesse campo encontra aplicações em diversas áreas, tais como física de plasma, medicina nuclear, astrofísica, engenharia ambiental e física de reatores.

Atualmente, particular atenção tem sido dada ao desenvolvimento de métodos de obtenção de soluções para a equação de transporte, seguindo basicamente duas linhas de abordagem : a abordagem probabilística, na qual se buscam soluções aproximadas para a equação de transporte na sua forma exata, e a abordagem determinística, na qual são formulados modelos aproximados para representar a equação de transporte, para os quais se buscam soluções exatas. Na abordagem probabilística destacam-se os métodos de Monte Carlo, onde os históricos das posições e velocidades de um determinado número de partículas são gerados através de simulações de eventos discretos, sendo utilizados para estimar o comportamento das partículas ao longo de sua trajetória. Na abordagem determinística, destacam-se os métodos de elementos finitos aplicáveis à primeira e à segunda forma da equação de Boltzmann, e os métodos baseados nas aproximações P_N (expansão em harmônicos esféricos) e S_N (método das ordenadas discretas). Na formulação P_N , os fluxos angulares são expandidos em termos das funções de Legendre nas variáveis angulares, e substituídos na

equação de transporte, resultando um sistema de equações que é resolvido para os coeficientes da expansão. Na formulação S_N , assume-se que as partículas sofrem espalhamento segundo um número finito de direções; a cada direção discreta está associada uma equação diferencial que depende apenas das variáveis espaciais. Nesse caso, o sistema resultante é geralmente resolvido através de métodos nos quais as variáveis espaciais são discretizadas.

Dentre os métodos baseados na formulação S_N para problemas multidimensionais, destacam-se os métodos espectro-nodais SGF-CN [1,2] (Spectral Green's Function Constant Nodal Method) e SGF-ExpN (Spectral Green's Function Exponential Nodal Method) [3], que possibilitam a obtenção de resultados precisos sem que se faça necessário utilizar malhas finas na discretização do domínio. O método SGF-CN considera os fluxos angulares constantes ao longo dos contornos dos nodos espaciais, enquanto no método SGF-ExpN são utilizadas funções exponenciais para aproximar os fluxos angulares ao longo dos contornos dos nodos espaciais.

Os métodos citados fornecem soluções numéricas para a equação S_N de transporte [4]. Essas soluções demandam, em geral, um esforço computacional bastante elevado, seja pela densidade da malha empregada, ou pelo número de iterações requeridas para atingir a convergência com precisão satisfatória. A geração de soluções exatas para equações de ordenadas discretas está restrita ao tratamento de problemas unidimensionais.

Recentemente, uma nova formulação foi desenvolvida visando a obtenção de soluções analíticas para as equações SN unidimensionais de transporte de nêutrons. Esse método, referido como LTSN, baseia-se na aplicação da transformada de Laplace sobre as equações de ordenadas discretas, com o objetivo de converter o sistema original de equações diferenciais em um sistema algébrico, cuja resolução e a posterior aplicação da transformada inversa, por via analítica, fornece a solução exata do problema. Com o método LTSN foram obtidas soluções analíticas para problemas unidimensionais considerando espalhamento anisotrópico, meio heterogêneo e modelo de multigrupo, além de soluções para problemas inversos [5,6,7,8,9].

Os métodos descritos neste trabalho constituem extensões da formulação LTSN a problemas multidimensionais. Nos capítulos 2 e 3 são descritas, respectivamente, as formulações LTSN para problemas bidimensionais e tridimensionais em coordenadas retangulares. O capítulo 4 trata da resolução dos problemas inversos em teoria de transporte : o cálculo das seções de choque total e de espalhamento, e a determinação dos fluxos angulares incidentes no contorno do domínio, para o caso bidimensional. No capítulo 5 é discutido um sistema de transformação de coordenadas que permite estender a aplicação da formulação LTSN bidimensional a problemas envolvendo domínios irregulares. O capítulo 6 contém uma avaliação do tempo de processamento requerido pelo programa SN.BAS, através do qual são obtidos os resultados numéricos apresentados nos

capítulos anteriores. O capítulo 7 encerra o trabalho, fornecendo conclusões e recomendações para o desenvolvimento de novos métodos baseados na formulação LTSN.

Os apêndices contêm informações suplementares sobre alguns tópicos abordados. No apêndice A é apresentada a dedução da equação de transporte na formulação SN; no apêndice B é feita uma revisão sucinta sobre coeficientes métricos utilizados em transformações de coordenadas; o apêndice C contém uma análise aproximada de propagação de erro.

2 A FORMULAÇÃO LTSN EM DUAS DIMENSÕES

Neste capítulo é apresentada a formulação LTSN para problemas bidimensionais em coordenadas retangulares. O tratamento de problemas bidimensionais consiste na aplicação da transformada de Laplace sobre as equações SN integradas transversalmente no interior do domínio, a fim de se obterem soluções analíticas para os fluxos angulares médios e para os fluxos angulares no contorno do domínio. O procedimento é descrito a seguir.

2.1 EQUAÇÕES SN BIDIMENSIONAIS INTEGRADAS

O problema de ordenadas discretas (SN) bidimensional em coordenadas retangulares, considerando espalhamento anisotrópico e modelo de multigrupo é dado pela equação [10]

$$\mu_m \frac{\partial \psi_m^g(x, y)}{\partial x} + \eta_m \frac{\partial \psi_m^g(x, y)}{\partial y} + \sigma_t^g \psi_m^g(x, y) = Q(x, y) + \sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^M \sigma_{smn}^{gg'} \omega_n \psi_n^{g'}(x, y), \quad (2.1.1)$$

para $g' = 1, 2, \dots, G$, $m = 1, 2, \dots, M$, onde $M = N(N+1)/2$ (ver apêndice A), sujeita às seguintes condições de contorno, que abrangem fluxo de entrada conhecido, reflexão especular e reflexão isotrópica :

$$\psi_m^g(x, 0) = H(-\vartheta) F_m(x) + A \sum_{j_1}^{j_\vartheta} \psi_j^g(x, 0) \quad (2.1.2)$$

$$\psi_m^g(x, b) = H(-\vartheta) G_m(x) + A \sum_{j_1}^{j_\vartheta} \psi_j^g(x, b) \quad (2.1.3)$$

$$\psi_m^g(0, y) = H(-\vartheta) F_m(y) + A \sum_{j_1}^{j_\vartheta} \psi_j^g(0, y) \quad (2.1.4)$$

$$\psi_m^g(a, y) = H(-\vartheta) G_m(y) + A \sum_{j_1}^{j_\vartheta} \psi_j^g(a, y) \quad , \quad (2.1.5)$$

para $0 \leq x \leq a$ and $0 \leq y \leq b$, e $m=1, 2, \dots, M$. Na equação (2.1.1), ψ_m é o fluxo angular na direção definida pelos cossenos diretores μ_m e η_m ; σ_t e σ_s são, respectivamente, as seções de choque total e de espalhamento, Q representa o termo de fonte, e o índice superior g especifica o grupo de energia. Neste trabalho, a seção de choque diferencial de espalhamento é expressa como [11] :

$$\sigma_{smn}^{gg'}(\mu_m, \mu_n) = \frac{1}{4\pi} \sum_{\ell=0}^L (2\ell+1) \sigma_\ell^{gg'} P_\ell(\mu_m) P_\ell(\mu_n) \quad (2.1.6)$$

onde $P_\ell(\mu)$ são os polinômios de Legendre de grau ℓ , os índices inferiores m e n referem-se, respectivamente, às direções

incidente e espalhada, e os índices superiores g e g' representam, respectivamente, o grupo de energia no qual se encontra o nêutron antes e depois do espalhamento. Nas equações (2.1.2), (2.1.3) (2.1.4) e (2.1.5), a quantidade A representa o albedo, H é a função de Heaviside, e o valor de ϑ especifica o tipo de condição de contorno considerada: 0 para fluxo de entrada conhecido, 1 para reflexão especular e $M/2$ para reflexão isotrópica. No tratamento de meios heterogêneos, essas equações são também válidas para descrever condições de contorno em problemas de multi-região. Nesse caso, o valor de ϑ é igual a 1, e a condição de contorno passa a representar a transferência de nêutrons entre duas regiões vizinhas, condição que impõe a continuidade da solução nas interfaces.

Integrando a equação (2.1.1) em x , entre os limites 0 e a , e dividindo por a , resulta a seguinte equação unidimensional na variável y [3]:

$$\frac{\mu_m}{a} \left[\psi_m^g(a, y) - \psi_m^g(0, y) \right] + \eta_m \frac{d\psi_{my}^g(y)}{dy} + \sigma_t \psi_{my}^g(y) =$$

$$Q_y^g(y) + \sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^M \sigma_{\theta mn}^{gg'} \omega_n \psi_{ny}^g(y) \quad , \quad m = 1, 2, \dots, M \quad , \quad (2.1.7)$$

onde

$$\psi_{my}^g(y) = \frac{1}{a} \int_0^a \psi_m^g(x, y) dx \quad (2.1.8)$$

e

$$Q_y(y) = \frac{1}{a} \int_0^a Q(x, y) dx \quad (2.1.9)$$

De forma análoga, integrando a equação (2.1.1) em y entre os limites 0 e b , e dividindo por b , obtém-se a seguinte equação unidimensional na variável x [3] :

$$\mu_m \frac{d\psi_{mx}^g(x)}{dx} + \frac{\eta_m}{b} \left[\psi_m^g(x, b) - \psi_m^g(x, 0) \right] + \sigma_t \psi_{mx}^g(x) =$$

$$Q_x(x) + \sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^M \sigma_{smn}^{gg'} \omega_n \psi_{nx}^g(x) \quad , \quad m = 1, 2, \dots, M \quad (2.1.10)$$

onde

$$\psi_{mx}^g(x) = \frac{1}{b} \int_0^b \psi_m^g(x, y) dy \quad (2.1.11)$$

e

$$Q_x(x) = \frac{1}{b} \int_0^b Q(x,y) dy \quad . \quad (2.1.12)$$

Nessas equações, $\psi_{mx}^g(x)$ e $\psi_{my}^g(y)$ são os fluxos angulares médios na direção discreta Ω_m , e $\psi_m^g(a,y)$, $\psi_m^g(0,y)$, $\psi_m^g(x,b)$ e $\psi_m^g(x,0)$ são os fluxos angulares incidentes e emergentes dos contornos.

A fim de encontrar a solução analítica para o problema de ordenadas discretas integrado transversalmente, aplica-se a formulação LTSN às equações unidimensionais resultantes.

2.2 APLICAÇÃO DA FORMULAÇÃO LTSN

Aplicando-se a transformada de Laplace em (2.1.7) resulta

$$\begin{aligned} \frac{\mu_m}{a} \left[\bar{\psi}_m^g(a,s) - \bar{\psi}_m^g(0,s) \right] + \eta_m \left[s \bar{\psi}_{my}^g(s) - \psi_{my}^g(0) \right] + \sigma_t \bar{\psi}_{my}^g(s) = \bar{Q}_y(s) \\ + \sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^M \sigma_{smn}^{gg'} \omega_n \bar{\psi}_{ny}^g(s) \quad , \quad m = 1, 2, \dots, M \quad , \quad (2.2.1) \end{aligned}$$

onde a barra indica a transformada de Laplace na variável y . De maneira análoga, aplicando-se a transformada de Laplace na equação (2.1.10), resulta

$$\frac{\eta_m}{b} \left[\bar{\psi}_m^g(s, b) - \bar{\psi}_m^g(s, 0) \right] + \mu_m \left[s \bar{\psi}_{mx}^g(s) - \psi_{mx}^g(0) \right] + \sigma_t \bar{\psi}_{mx}^g(s) = \bar{Q}_x(s) + \sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^M \sigma_{smn}^{gg'} \omega_n \bar{\psi}_{nx}^g(s), \quad m = 1, 2, \dots, M \quad (2.2.2)$$

As equações (2.2.1) e (2.2.2) constituem sistemas lineares cujas representações em forma matricial são dadas por :

$$\bar{A}_x \bar{\psi}_x = \bar{\psi}_{x0}, \quad (2.2.3)$$

onde a matriz \bar{A}_x é expressa como

$$\bar{A}_x = \begin{bmatrix} \bar{A}_x^{11} & \bar{A}_x^{12} & \dots & \bar{A}_x^{1G} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \bar{A}_x^{G1} & \bar{A}_x^{G2} & \dots & \bar{A}_x^{GG} \end{bmatrix}, \quad (2.2.4)$$

na qual $\bar{A}_x^{gg'}$ são blocos $G \times G$ da matriz \bar{A}_x , dados por

$$\bar{A}_x^{gg'} = \begin{bmatrix} \delta_{gg'} (\eta_1 s + \sigma_t) - \sigma_{s11}^{gg'} \omega_1 & -\sigma_{s12}^{gg'} \omega_2 & \dots & -\sigma_{s1M}^{gg'} \omega_M \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\sigma_{sM1}^{gg'} & \dots & \delta_{gg'} (\eta_1 s + \sigma_t) - \sigma_{sMM}^{gg'} \omega_M & \dots \end{bmatrix}, \quad (2.2.5)$$

e os vetores coluna $\bar{\psi}_x$ e $\bar{\psi}_{x0}$ são definidos como

$$\bar{\psi}_{\sim x} = \text{col} [\bar{\psi}_{\sim 1x}^g, \dots, \bar{\psi}_{\sim Mx}^g] \quad (2.2.6)$$

e

$$\bar{\psi}_{\sim x0} = \text{col} [\bar{\phi}_{1x}, \dots, \bar{\phi}_{Mx}] \quad , \quad (2.2.7)$$

cujo elemento genérico é dado por

$$\bar{\phi}_{jx} = \mu_j \psi_{jx}^g(0) - \frac{\eta_j}{b} \left\{ \bar{\psi}_j^g(s, b) - \bar{\psi}_j^g(s, 0) \right\} + \bar{Q}_x(s) \quad j = 1, \dots, M \quad (2.2.8)$$

e o respectivo sistema em y resulta :

$$\bar{A}_y \bar{\psi}_{\sim y} = \bar{\psi}_{\sim y0} \quad , \quad (2.2.9)$$

onde a matriz A_y é definida como

$$\bar{A}_y = \begin{bmatrix} \bar{A}_y^{11} & \bar{A}_y^{12} & \dots & \bar{A}_y^{1G} \\ & & \vdots & \\ \bar{A}_y^{G1} & \bar{A}_y^{G2} & \dots & \bar{A}_y^{GG} \end{bmatrix} \quad , \quad (2.2.10)$$

em que \bar{A}_y^{gg} são blocos $G \times G$ da matriz A_y , dados por

$$\bar{A}_y^{gg'} = \begin{bmatrix} \delta_{gg'}(\mu_1 s + \sigma_1) - \sigma_{e11}^{gg'} \omega_1 & -\sigma_{e12}^{gg'} \omega_2 & \dots & -\sigma_{e1M}^{gg'} \omega_M \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\sigma_{eM1}^{gg'} & \dots & \delta_{gg'}(\mu_1 s + \sigma_1) - \sigma_{eMM}^{gg'} \omega_M & \dots \end{bmatrix}, \quad (2.2.11)$$

$$\bar{\psi}_y = \text{col} [\bar{\psi}_{1y}^g, \dots, \bar{\psi}_{My}^g] \quad (2.2.12)$$

e

$$\bar{\psi}_{y0} = \text{col} [\bar{\phi}_{1y}, \dots, \bar{\phi}_{My}] \quad , \quad (2.2.13)$$

com

$$\bar{\phi}_{jy} = \eta_M \psi_{jy}^g(0) - \frac{\mu_j}{\alpha} \left\{ \bar{\psi}_j^g(a, s) - \bar{\psi}_j^g(0, s) \right\} - \bar{Q}_y(s), \quad j = 1, \dots, M. \quad (2.2.14)$$

Cabe ressaltar que as matrizes dos sistemas (2.2.3) e (2.2.9) apresentam a mesma estrutura da matriz LTSN unidimensional [5]. No entanto, tendo em vista uma maior eficiência computacional, a inversão das matrizes (2.2.4) e (2.2.10) é efetuada através do método de Gauss-Jordan, com o auxílio de operações simbólicas. Uma vez que as matrizes \bar{A}_x e \bar{A}_y contêm polinômios em s , as sucessivas etapas da eliminação de Gauss geram funções racionais, isto é, expressões do tipo $p(s)/q(s)$, onde p e q são polinômios. As operações de eliminação (soma, divisão e multiplicação) são então

definidas de modo a operar sobre funções racionais (ver apêndice C).

Encontradas as matrizes inversas \bar{A}_x^{-1} , \bar{A}_y^{-1} , obtêm-se então expressões para os fluxos angulares médios transformados em termos dos fluxos angulares nos contornos do domínio e dos fluxos angulares médios :

$$\bar{\psi}_{\sim x} = \bar{A}_x^{-1} \bar{\psi}_{\sim x 0} \quad (2.2.15)$$

e

$$\bar{\psi}_{\sim y} = \bar{A}_y^{-1} \bar{\psi}_{\sim y 0} \quad (2.2.16)$$

Os fluxos angulares são então obtidos invertendo-se os fluxos angulares transformados em (2.2.15) e (2.2.16), e são escritos como

$$\psi_{\sim x} = H_x * \psi_{\sim x 0} \quad (2.2.17)$$

e

$$\psi_{\sim y} = H_y * \psi_{\sim y 0} \quad (2.2.18)$$

onde $H_x = L^{-1}[\bar{A}_x^{-1}]$, $H_y = L^{-1}[\bar{A}_y^{-1}]$, e o asterisco denota convolução.

Os elementos das matrizes H_x e H_y são obtidos analiticamente, utilizando a técnica de expansão de Heaviside, uma vez que a transformada inversa de $a_{ij} = p(s)/q(s)$, elemento genérico de \bar{A}_x^{-1} ou \bar{A}_y^{-1} , é dada por

$$h_{ij} = \sum_{k=1}^{nr} \sum_{l=1}^{nk} \frac{u^{nr-l} e^{r_k u}}{(nk-l)!(l-1)!} \frac{d^{l-1}}{ds^{l-1}} \left(\frac{p(r_k)}{q(r_k)} \right), \quad (2.2.19)$$

onde r_k são as raízes de $q(s)$, nr é o número de raízes, nk é a multiplicidade das raízes, e u representa a variável espacial (x ou y).

As equações (2.2.17) e (2.2.18) constituem expressões para os fluxos angulares médios em função dos fluxos angulares transversos e dos fluxos angulares médios na fronteira. A inversão de Heaviside, por sua vez, fornece a base de dimensão $M \times G$ para as soluções das equações (2.2.3) e (2.2.4). Dessa forma, os fluxos angulares médios podem ser escritos em termos dos elementos da base, como

$$\psi_{mx}^g(x) = \sum_{i=1}^{MG} A_{mi} x^{k_i} e^{r_{mi} x}, \quad (2.2.20)$$

$$\psi_{my}^g(y) = \sum_{i=1}^{MG} B_{mi} y^{l_i} e^{s_{mi} y}. \quad (2.2.21)$$

Os fluxos angulares transversos na fronteira também podem ser expressos em função dos elementos da base :

$$\psi_m^g(x, 0) = \sum_{i=1}^{MG} C_{mi} x^{k_i} e^{r_{mi} x} , \quad (2.2.22)$$

$$\psi_m^g(0, y) = \sum_{i=1}^{MG} D_{mi} y^{l_i} e^{s_{mi} y} , \quad (2.2.23)$$

$$\psi_m^g(x, b) = \sum_{i=1}^{MG} E_{mi} x^{k_i} e^{r_{mi} x} , \quad (2.2.24)$$

$$\psi_m^g(a, y) = \sum_{i=1}^{MG} F_{mi} y^{l_i} e^{s_{mi} y} . \quad (2.2.25)$$

Nestas equações, r_i e s_i são os pólos correspondentes às variáveis x e y , com multiplicidades $k_i + 1$ e $l_i + 1$ respectivamente. Assim, a determinação de todos os fluxos angulares reduz-se ao cálculo dos coeficientes A_{mi} , B_{mi} , C_{mi} , D_{mi} , E_{mi} e F_{mi} . Calculados os valores desses coeficientes, estará determinada explicitamente a solução do problema, representada pelas equações (2.2.20) e (2.2.21).

A fim de determinar os coeficientes, são utilizadas as equações (2.2.16) e (2.2.17) e as condições de contorno (2.1.2), (2.1.3), (2.1.4) e (2.1.5). Observando-se as equações (2.2.20) e (2.2.21), verifica-se que a simples aplicação das condições de

contorno sobre os sistemas (2.2.16) e (2.2.17) não seria suficiente para determinar todas as constantes de forma única, pois o número de equações do sistema resultante seria menor do que o número de coeficientes a calcular. É preciso então introduzir equações auxiliares para obter o fechamento do sistema.

Inicialmente o número de equações auxiliares é calculado a partir do número de coeficientes a determinar e do número de equações já obtidas através da aplicação das condições de contorno. A princípio, o número de coeficientes parece ser $6(GM)^2$, pois existem 6 conjuntos de coeficientes (A_{mi}, \dots, F_{mi}) , M direções discretas, G grupos de energia e MG termos em cada expansão. Contudo, considerando as condições de contorno representadas pelas equações (2.1.2), (2.1.3), (2.1.4) e (2.1.5), verifica-se que apenas os fluxos angulares transversos que saem do domínio são desconhecidos. Os fluxos que entram no domínio são dados, nessas equações, pelas funções F_m , G_m , F_m e G_m , caso a condição de contorno seja do tipo fluxo transverso de entrada conhecido, ou são expressos em termos dos fluxos transversos que saem do domínio, no caso de reflexão especular ou isotrópica. Assim, o número de fluxos transversos desconhecidos é de $GM/2$, e o número total de coeficientes a determinar é de $4(GM)^2$. É importante observar que os termos $\psi_{mx}(0)$ e $\psi_{my}(0)$, presentes nas equações (2.2.8) e (2.2.14) respectivamente, não introduzem coeficientes adicionais a determinar, pois são obtidos das definições dos fluxos angulares médios em x e y :

$$\psi_{mx}^g(0) = \frac{1}{b} \int_0^b \psi_m^g(0, y) dy \quad (2.2.26)$$

e

$$\psi_{my}^g(0) = \frac{1}{a} \int_0^a \psi_m^g(x, 0) dx \quad , \quad (2.2.27)$$

e portanto, envolvem os mesmos coeficientes dos fluxos angulares nos contornos, multiplicados por constantes devido à integração das exponenciais presentes, e à divisão pelo valor de a ou de b.

Estabelecido o número total de coeficientes a determinar para obter as expressões dos fluxos angulares médios e nos contornos do domínio, resta agora construir um sistema linear compatível (com o mesmo número de equações e incógnitas) , baseado na aplicação das condições de contorno, do qual serão obtidos os valores numéricos desses coeficientes. Aplicando as condições de contorno sobre as equações (2.2.17) e (2.2.18), em $x=a$ e $y=b$, resulta

$$\tilde{\psi}_a = \left[H_x * \tilde{\psi}_{x0} \right]_{x=a} \quad (2.2.28)$$

e

$$\tilde{\psi}_b = \left[H_y * \tilde{\psi}_{y0} \right]_{y=b} \quad , \quad (2.2.29)$$

que totalizam $2GM$ equações. Havendo $4(GM)^2$ coeficientes a

determinar, devem ser utilizadas $4(GM)^2 - 2GM$ equações auxiliares para obter o fechamento do sistema. Utilizando-se a definição dos fluxos angulares médios em $x=a$ e $y=b$,

$$\psi_{mx}^g(a) = \frac{1}{b} \int_0^b \psi_m^g(a, y) dy \quad (2.2.30)$$

e

$$\psi_{my}^g(b) = \frac{1}{a} \int_0^a \psi_m^g(x, b) dx \quad , \quad (2.2.31)$$

são incorporadas $2GM$ equações adicionais para o sistema. As $4(GM)^2 - 4GM$ equações restantes são obtidas usando a propriedade de diferenciabilidade das soluções encontradas. Dessa forma, derivando-se as equações (2.2.17) e (2.2.18), e aplicando-se as expressões resultantes em $x=a$ e $y=b$, resulta :

$$\left[\frac{d^k}{dx^k} \begin{matrix} \psi_x \\ \sim x \end{matrix} \right]_{x=a} = \left[\frac{d^k}{dx^k} \left[H_x * \begin{matrix} \psi_{x0} \\ \sim x0 \end{matrix} \right] \right]_{x=a} \quad k = 1, 2, \dots, 2(GM)^2 - 2GM \quad (2.2.32)$$

e

$$\left[\frac{d^k}{dy^k} \begin{matrix} \psi_y \\ \sim y \end{matrix} \right]_{y=b} = \left[\frac{d^k}{dy^k} \left[H_y * \begin{matrix} \psi_{y0} \\ \sim y0 \end{matrix} \right] \right]_{y=b} \quad k = 1, 2, \dots, 2(GM)^2 - 2GM \quad (2.2.33)$$

Essas relações fornecem $4(GM)^2 - 4GM$ novas equações. Assim, o

sistema formado por (2.2.28), (2.2.29), (2.2.30), (2.2.31), (2.2.32) e (2.2.33) contém as $4(GM)^2$ equações necessárias para determinar os valores numéricos dos coeficientes.

O sistema construído a partir da aplicação das condições de contorno possui apenas componentes numéricas, e portanto não requer o emprego de operações simbólicas para a sua resolução. Esse sistema é resolvido pelo método de Gauss com refinamento.

2.3 RESULTADOS NUMÉRICOS

Nesta seção são apresentados os resultados numéricos obtidos através do emprego da formulação LTSN em duas dimensões, para problemas em meios homogêneos e heterogêneos. Esses resultados são comparados com dados disponíveis na literatura [2,3].

2.3.1 Problemas em meio homogêneo

Inicialmente, a formulação LTSN bidimensional foi aplicada na resolução de um problema com espalhamento isotrópico em uma placa quadrada medindo 20cm de lado, com uma fonte emitindo 1 nêutron/cm²s localizada junto a um de seus vértices. A placa é mostrada na figura 2.1 .

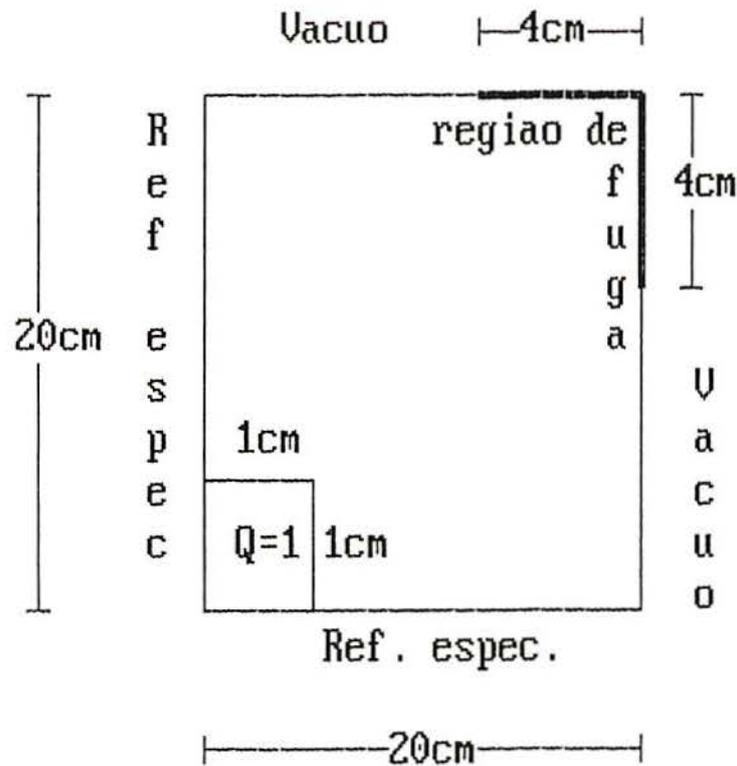


Figura 2.1 - problema de espalhamento isotrópico em uma placa

As quadraturas angulares de ordem 2, 4 e 6 foram utilizadas para calcular a corrente parcial emergente do trecho do contorno indicado na figura como região de fuga. A corrente parcial (J), que representa a fuga de nêutrons ao longo de um trecho do contorno do domínio, é calculada a partir dos fluxos angulares transversos emergentes do contorno :

$$J_x = \sum_{m=1}^{GM/2} \mu_m \omega_m \int_{y_{min}}^{y_{max}} \psi_m(x_0, y) dy \quad (2.3.1.1)$$

calculado ao longo de interfaces verticais, e

$$J_y = \sum_{m=1}^{GM/2} \eta_m \omega_m \int_{x_{min}}^{x_{max}} \psi_m(x, y_0) dx \quad (2.3.1.2)$$

sobre interfaces horizontais. Nessas equações, x_0 pode assumir os valores 0 e a, e y_0 , os valores 0 e b. Nas definições das correntes parciais são tomados apenas os valores de m correspondentes a fluxos de saída; por essa razão a soma que define J possui GM/2 parcelas. Os valores dos limites de integração para o problema são $x_{min} = y_{min} = 16\text{cm}$ e $x_{max} = y_{max} = 20\text{cm}$.

Valores de J sobre a região de fuga indicada na figura 5 são comparados com resultados obtidos a partir dos métodos LN e SGF-ExpN [3]. As tabelas 2.1 e 2.2 mostram os resultados numéricos obtidos para dois valores de seção de choque de espalhamento [12]. No primeiro, $\sigma_s = 0,99 \text{ cm}^{-1}$ e no segundo, $\sigma_s = 0,5 \text{ cm}^{-1}$. Em ambos os casos, a seção de choque total σ_t é igual a 1 cm^{-1} .

Tabela 2.1 - Corrente parcial emergente para $\sigma_t = 1$ e $\sigma_s = 0,99$

LTSN		LN (N=4)		SGF-ExpN (N=4)	
Ordem da quadratura	J	Nodos espaciais J		Nodos espaciais J	
4	$4,8 \cdot 10^{-9}$	5	$3,0 \cdot 10^{-2}$	5	$5,2 \cdot 10^{-9}$
		10	$1,2 \cdot 10^{-2}$	10	$4,3 \cdot 10^{-9}$
		20	$6,0 \cdot 10^{-3}$	20	$4,2 \cdot 10^{-9}$

Tabela 2.2 - Corrente parcial emergente para $\sigma_t = 1$ e $\sigma_s = 0,5$

LTSN		LN (N=4)		SGF-ExpN (N=4)	
Ordem da quadratura	J	Nodos espaciais		Nodos espaciais	
4	$4,7 \cdot 10^{-12}$	10	$3,0 \cdot 10^{-10}$	10	$5,0 \cdot 10^{-12}$
		20	$3,0 \cdot 10^{-11}$	20	$2,2 \cdot 10^{-12}$
		40	$6,0 \cdot 10^{-12}$	40	$1,4 \cdot 10^{-12}$

Os valores obtidos para a corrente angular através do método LTSN, que usa pontos de quadratura de Stamm'ler [13], apresentam razoável concordância com os calculados através dos métodos LN e SGF-ExpN, que usa pontos de quadratura do programa TWODANT [3]. É possível que a discrepância verificada entre os resultados se deva ao fato de que nenhuma aproximação foi feita no desenvolvimento da formulação LTSN para os fluxos angulares transversos, utilizados na avaliação da corrente parcial emergente.

2.3.2 Problemas em meio heterogêneo

Nos dois problemas seguintes, a formulação LTSN bidimensional é empregada para obter a solução da equação de transporte SN em meios heterogêneos. A placa mostrada na figura 2.2 contém uma fonte que emite 1 nêutron/cm²s, e apresenta diferentes seções de choque na região da fonte e no restante de sua extensão.

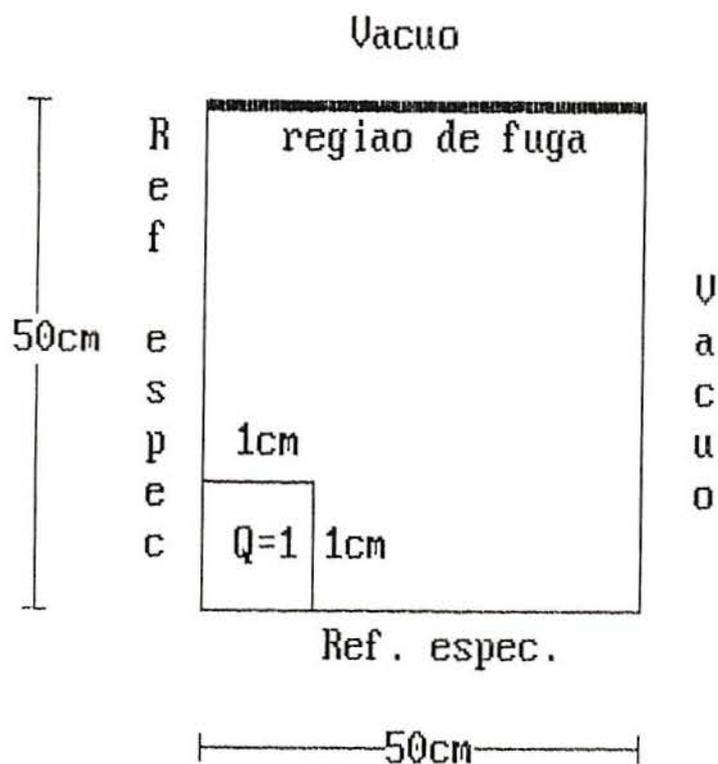


Figura 2.2 - Problemas em meio heterogêneo

O primeiro problema heterogêneo, que considera espalhamento linearmente anisotrópico, tem $\sigma_t = 0,8 \text{ cm}^{-1}$, $\sigma_{s0} = 0,4 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_{s1} = 0,2 \text{ cm}^{-1}$ na região da fonte, e $\sigma_t = 1 \text{ cm}^{-1}$, $\sigma_{s0} = 0,95 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_{s1} = 0,5 \text{ cm}^{-1}$ no restante da placa. No segundo problema, para o qual o espalhamento é isotrópico, $\sigma_t = 0,8 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0$ na região da fonte, e para o restante da placa $\sigma_t = 1 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0,9 \text{ cm}^{-1}$. A tabela 2.3 apresenta os valores obtidos para a corrente parcial emergente da região de fuga indicada na figura 2.2, para o problema envolvendo espalhamento linearmente anisotrópico [12]. A tabela 2.4 mostra os valores correspondentes para o problema de espalhamento isotrópico [12].

Tabela 2.3 - Corrente parcial de fuga para o problema anisotrópico

LTSN		LN (N=4)		SGF-CN (N=4)	
Ordem da	J	Nodos		Nodos	
quadratura		espaciais	J	espaciais	J
4	$2,0 \cdot 10^{-5}$	20	$1,1 \cdot 10^{-5}$	20	$2,5 \cdot 10^{-6}$
		50	$3,3 \cdot 10^{-6}$	50	$2,6 \cdot 10^{-6}$

Tabela 2.4 - Corrente parcial de fuga para o problema isotrópico

LTSN		LN (N=4)		SGF-CN (N=4)	
Ordem da	J	Nodos		Nodos	
quadratura		espaciais	J	espaciais	J
4	$2,2 \cdot 10^{-6}$	20	$1,2 \cdot 10^{-6}$	20	$3,5 \cdot 10^{-6}$
		50	$3,0 \cdot 10^{-8}$	50	$8,0 \cdot 10^{-8}$

Os valores obtidos para a corrente parcial são comparados aos resultados fornecidos pelos métodos LN e SGF-CN [2], sendo utilizados os mesmos conjuntos de quadratura empregados nos problemas em meio homogêneo. A maior discrepância entre os resultados se deve às dimensões da placa (50x50), que ocasiona erro de arredondamento no método LTSN, exigindo aritmética de precisão estendida para a obtenção de resultados mais precisos.

É importante enfatizar que nenhuma aproximação foi empregada no desenvolvimento da formulação LTSN bidimensional. Essa característica do método LTSN é também verificada na solução de problemas tridimensionais. Este tópico constitui o tema de discussão do próximo capítulo.

3 A FORMULAÇÃO LTSN EM TRÊS DIMENSÕES

O tratamento de problemas tridimensionais segue essencialmente o mesmo sistema de resolução da formulação LTSN em duas dimensões. É descrita a seguir a solução do problema de ordenadas discretas em três dimensões.

3.1 EQUAÇÕES SN TRIDIMENSIONAIS INTEGRADAS

O problema tridimensional de ordenadas discretas, considerando modelo de multigrupo e espalhamento anisotrópico em um paralelepípedo ($0 \leq x \leq a$, $0 \leq y \leq b$, $0 \leq z \leq c$), é escrito como :

$$\begin{aligned}
 (1 - \xi_m^2)^{1/2} \left[\mu_m \frac{\partial \psi_m^g(x, y, z)}{\partial x} + \eta_m \frac{\partial \psi_m^g(x, y, z)}{\partial y} \right] + \xi_m \frac{\partial \psi_m^g(x, y, z)}{\partial z} + \\
 \sigma_t \psi_m^g(x, y, z) = Q(x, y, z) + \sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^M \sigma_{smn}^{gg'} \omega_n \psi_n^g(x, y, z), \quad m = 1, 2, \dots, M,
 \end{aligned}
 \tag{3.1.1}$$

sujeito às seguintes condições de contorno, que abrangem os mesmos tipos considerados no modelo bidimensional (ver seção 2.1) :

$$\psi_m^y(x, 0) = H(-\vartheta) F_m^y(x) + A \sum_{j_1}^{j_\vartheta} \psi_j^y(x, 0) \quad (3.1.2)$$

$$\psi_m^y(x, b) = H(-\vartheta) G_m^y(x) + A \sum_{j_1}^{j_\vartheta} \psi_j^y(x, b) \quad (3.1.3)$$

$$\psi_m^z(x, 0) = H(-\vartheta) U_m^z(x) + A \sum_{j_1}^{j_\vartheta} \psi_j^z(x, 0) \quad (3.1.4)$$

$$\psi_m^z(x, b) = H(-\vartheta) V_m^z(x) + A \sum_{j_1}^{j_\vartheta} \psi_j^z(x, b) \quad (3.1.5)$$

$$\psi_m^x(0, y) = H(-\vartheta) F_m^x(y) + A \sum_{j_1}^{j_\vartheta} \psi_j^x(0, y) \quad (3.1.6)$$

$$\psi_m^x(a, y) = H(-\vartheta) G_m^x(y) + A \sum_{j_1}^{j_\vartheta} \psi_j^x(a, y) \quad (3.1.7)$$

$$\psi_m^z(0, y) = H(-\vartheta) U_m^z(y) + A \sum_{j_1}^{j_\vartheta} \psi_j^z(0, y) \quad (3.1.8)$$

$$\psi_m^z(a, y) = H(-\vartheta) V_m^z(y) + A \sum_{j_1}^{j_\vartheta} \psi_j^z(a, y) \quad (3.1.9)$$

$$\psi_m^x(0, z) = H(-\vartheta) \mathcal{F}_m^x(z) + A \sum_{j_1}^{j_\vartheta} \psi_j^x(0, z) \quad (3.1.10)$$

$$\psi_m^x(a, z) = H(-\vartheta) \mathcal{G}_m^x(z) + A \sum_{j_1}^{j_\vartheta} \psi_j^x(a, z) \quad (3.1.11)$$

$$\psi_m^y(0, z) = H(-\vartheta) \mathcal{U}_m^y(z) + A \sum_{j_1}^{j_\vartheta} \psi_j^y(0, z) \quad (3.1.12)$$

$$\psi_m^y(a, z) = H(-\vartheta) \mathcal{V}_m^y(z) + A \sum_{j_1}^{j_\vartheta} \psi_j^y(a, z) \quad (3.1.13)$$

Na equação (3.1.1), o termo ξ_m corresponde ao terceiro cosseno diretor, e o número de direções discretas passa a ser $M=N(N+2)$ (ver apêndice A), permanecendo as mesmas definições do caso bidimensional para os demais parâmetros (ver seção 2.1), exceto para a seção de choque de espalhamento, escrita em termos das funções de Legendre associadas [11] :

$$\sigma_s^{gg'}(\mu, \xi, \mu', \xi') = \frac{1}{4\pi} \sum_{\ell=0}^L (2\ell+1) \sigma_\ell^{gg'} \left[P_\ell^1(\mu) P_\ell^1(\mu') + \sum_{l=0}^{\ell} \frac{(\ell-l)!}{(\ell+l)!} P_\ell^l(\mu) P_\ell^l(\mu') \cos[l(\phi-\phi')] \right] \quad (3.1.14)$$

A exemplo do modelo bidimensional, as condições de contorno são também aplicáveis a modelos de multi-região, impondo a continuidade das soluções nas interfaces.

Note-se que no modelo tridimensional os fluxos angulares transversos possuem índices superiores relativos a variáveis espaciais, ao invés do índice referente ao grupo de energia, que foi suprimido para simplificar a notação. Isto ocorre porque, no caso tridimensional, são usados fluxos angulares médios nas faces do domínio, definidos por integrais simples, e fluxos angulares médios nas direções paralelas às arestas do domínio, definidos por integrais duplas. Este aspecto da formulação será mostrado a seguir.

Procedendo de forma similar ao caso bidimensional, a equação (3.1.1) é transformada em um sistema de três equações unidimensionais. Integrando a equação (3.1.1) nas variáveis y (entre 0 e b) e z (entre 0 e c), e dividindo por bc , obtém-se :

$$\begin{aligned}
 & (1 - \xi_m^2)^{1/2} \left[\mu_m \frac{d\psi_{mx}}{dx} + \frac{\eta_m}{b} \left(\psi_m^y(x, b) - \psi_m^y(x, 0) \right) \right] + \frac{\xi_m}{c} \left(\psi_m^z(x, c) - \psi_m^z(x, 0) \right) \\
 & + \alpha_{t, mx} \psi_{mx} = Q_x + \sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^M \alpha_{smn}^{gg'} \omega_n \psi_{nx} \quad , \quad (3.1.15)
 \end{aligned}$$

onde

$$\psi_{mx}(x) = \frac{1}{bc} \int_0^b \int_0^c \psi_m(x, y, z) \, dydz \quad (3.1.16)$$

e

$$Q_x(x) = \frac{1}{bc} \int_0^b \int_0^c Q(x, y, z) \, dydz \quad (3.1.17)$$

Integrando a equação (3.1.1) em x (de 0 a a) e em z (de 0 a c), e dividindo por ac, resulta :

$$\begin{aligned} (1 - \xi_m^2)^{1/2} \left[\frac{\mu_m}{a} \left(\psi_m^x(a, y) - \psi_m^x(0, y) \right) + \eta_m \frac{d\psi_{my}}{dy} \right] + \frac{\xi_m}{c} \left(\psi_m^z(y, c) - \psi_m^z(y, 0) \right) \\ + \sigma_t \psi_{my} = Q_x + \sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^M \sigma_{emn}^{gg'} \omega_n \psi_{ny} \quad , \end{aligned} \quad (3.1.18)$$

onde

$$\psi_{my}(y) = \frac{1}{ac} \int_0^a \int_0^c \psi_m(x, y, z) \, dx dz \quad (3.1.19)$$

e

$$Q_y(y) = \frac{1}{ac} \int_0^a \int_0^c Q(x, y, z) \, dx dz \quad (3.1.20)$$

Resultado análogo obtém-se pela integração da equação (3.1.1) em x e y, e dividindo por ab :

$$(1 - \xi_m^z)^{1/2} \left[\frac{\mu_m}{a} \left(\psi_m^x(a, z) - \psi_m^x(0, z) \right) + \frac{\eta_m}{b} \left(\psi_m^y(b, z) - \psi_m^y(0, z) \right) \right] + \xi_m \frac{d\psi_{mz}}{dz} + \sigma_t \psi_{mz} = Q_z + \sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^M \sigma_{smn}^{gg'} \omega_n \psi_{nz} \quad , \quad (3.1.21)$$

onde

$$\psi_{mz}(z) = \frac{1}{ab} \int_0^a \int_0^b \psi_m(x, y, z) \, dx dy \quad (3.1.22)$$

e

$$Q_z(z) = \frac{1}{ab} \int_0^a \int_0^b Q(x, y, z) \, dx dy \quad . \quad (3.1.23)$$

Integradas as equações SN tridimensionais, aplica-se a formulação LTSN, tal como na seção 2.2 .

3.2 APLICAÇÃO DA FORMULAÇÃO LTSN

Aplicando-se a transformada de Laplace sobre a equação (3.1.15), resulta o seguinte sistema linear :

$$\bar{A}_x \bar{\psi}_{\tilde{x}} = \bar{\psi}_{x0} \quad , \quad (3.2.1)$$

onde a matriz \bar{A}_x é dada por

$$\bar{A}_x = \begin{bmatrix} \bar{A}_x^{11} & \bar{A}_x^{12} & \dots & \bar{A}_x^{1G} \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ \bar{A}_x^{G1} & \bar{A}_x^{G2} & \dots & \bar{A}_x^{GG} \end{bmatrix}, \quad (3.2.2)$$

na qual $\bar{A}_x^{gg'}$ são blocos $G \times G$ da matriz \bar{A}_x , dados por

$$\bar{A}_x^{gg'} = \begin{bmatrix} \delta_{gg'} [(1-\xi_1^2)^{1/2} \eta_1 s + \sigma_t] - \sigma_{s11}^{gg'} \omega_1 & -\sigma_{s12}^{gg'} \omega_2 & \dots & -\sigma_{s1M}^{gg'} \omega_M \\ & & & \\ & & & \\ & & & \\ -\sigma_{sM1}^{gg'} & \dots & \delta_{gg'} [(1-\xi_M^2)^{1/2} \eta_1 s + \sigma_t] - \sigma_{sMM}^{gg'} \omega_M & \end{bmatrix} \quad (3.2.3)$$

e os vetores-coluna $\bar{\psi}_{\sim x}$ e $\bar{\psi}_{\sim x0}$ são expressos como

$$\bar{\psi}_{\sim x} = \text{col} [\bar{\psi}_{1x}, \dots, \bar{\psi}_{Mx}] \quad (3.2.4)$$

e

$$\bar{\psi}_{\sim x0} = \text{col} [\bar{\phi}_{1x}, \dots, \bar{\phi}_{Mx}] \quad (3.2.5)$$

cujo elemento genérico é definido como

$$\bar{\phi}_{jx} = \alpha_j \psi_{jx}(0) + \frac{\beta_j}{b} \left[\bar{\psi}_j^y(s, 0) - \bar{\psi}_j^y(s, b) \right] + \frac{\gamma_j}{c} \left[\bar{\psi}_j^z(s, 0) - \bar{\psi}_j^z(s, c) \right] + \bar{Q}_x$$

$$j = 1, \dots, M \quad , \quad (3.2.6)$$

onde $\alpha_j = (1 - \xi_j^2)^{1/2} \mu_j$, $\beta_j = (1 - \xi_j^2)^{1/2} \eta_j$ e $\gamma_j = \xi_j$.

Analogamente, pela aplicação da transformada de Laplace sobre as equações (3.1.18) e (3.1.21), são produzidos, respectivamente, os seguintes sistemas lineares :

$$\bar{A}_y \bar{\psi}_{\sim y} = \bar{\psi}_{\sim y 0} \quad , \quad (3.2.7)$$

onde

$$\bar{A}_y = \begin{bmatrix} \bar{A}_y^{11} & \bar{A}_y^{12} & \dots & \bar{A}_y^{1\sigma} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \bar{A}_y^{\sigma 1} & \bar{A}_y^{\sigma 2} & \dots & \bar{A}_y^{\sigma \sigma} \end{bmatrix} \quad , \quad (3.2.8)$$

em que $\bar{A}_y^{gg'}$ são blocos $G \times G$ da matriz \bar{A}_y , dados por

$$\bar{A}_y^{gg'} = \begin{bmatrix} \delta_{gg'} [(1-\xi_1^2)^{1/2} \mu_1 s + \sigma_t] - \sigma_{s11}^{gg'} \omega_1 & -\sigma_{s12}^{gg'} \omega_2 & \dots & -\sigma_{s1M}^{gg'} \omega_M \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots \\ -\sigma_{sM1}^{gg'} & \dots & \delta_{gg'} [(1-\xi_M^2)^{1/2} \mu_1 s + \sigma_t] - \sigma_{sMM}^{gg'} \omega_M & \dots \end{bmatrix} \quad (3.2.9)$$

$$\bar{\psi}_{\sim y} = \text{col} [\bar{\psi}_{1y}, \dots, \bar{\psi}_{My}] \quad (3.2.10)$$

e

$$\bar{\psi}_{\sim y0} = \text{col} [\bar{\phi}_{1y}, \dots, \bar{\phi}_{My}] \quad , \quad (3.2.11)$$

para o qual

$$\bar{\phi}_{jy} = \frac{\alpha_j}{a} [\bar{\psi}_j^x(0, s) - \bar{\psi}_j^x(a, s)] + \beta_j \psi_{jy}(0) + \frac{\gamma_j}{c} [\bar{\psi}_j^z(s, 0) - \bar{\psi}_j^z(s, c)] + \bar{Q}_y$$

$$j = 1, \dots, M \quad (3.2.12)$$

e

$$\bar{A}_z \bar{\psi}_{\sim z} = \bar{\psi}_{\sim z0} \quad , \quad (3.2.13)$$

onde

$$\bar{A}_z = \begin{bmatrix} \bar{A}_z^{11} & \bar{A}_z^{12} & \dots & \bar{A}_z^{1G} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \bar{A}_z^{G1} & \bar{A}_z^{G2} & \dots & \bar{A}_z^{GG} \end{bmatrix}, \quad (3.2.14)$$

onde $\bar{A}_z^{gg'}$ são blocos $M \times M$ da matriz \bar{A}_z , definidos de forma análoga aos blocos correspondentes às variáveis x e y :

$$\bar{A}_z^{gg'} = \begin{bmatrix} \delta_{gg'} [\xi_1 s + \sigma_l] - \sigma_{s11}^{gg'} \omega_1 & -\sigma_{s12}^{gg'} \omega_2 & \dots & -\sigma_{s1M}^{gg'} \omega_M \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -\sigma_{sM1}^{gg'} & \dots & \delta_{gg'} [\xi_1 s + \sigma_l] - \sigma_{sMM}^{gg'} \omega_M & \dots \end{bmatrix}, \quad (3.2.15)$$

sendo os vetores $\bar{\psi}_{\sim z}$ e $\bar{\psi}_{\sim z0}$ também definidos de forma análoga aos vetores correspondentes nas variáveis x e y :

$$\bar{\psi}_{\sim z} = \text{col} [\bar{\psi}_{1z}, \dots, \bar{\psi}_{Mz}] \quad (3.2.16)$$

e

$$\bar{\psi}_{\sim z0} = \text{col} [\bar{\phi}_{1z}, \dots, \bar{\phi}_{Mz}] \quad , \quad (3.2.17)$$

em que

$$\phi_{jz} = \frac{\alpha_j}{a} \left[\bar{\psi}_j^x(0,s) - \bar{\psi}_j^x(a,s) \right] + \frac{\beta_j}{b} \left[\bar{\psi}_j^y(0,s) - \bar{\psi}_j^y(b,s) \right] + \gamma_j \psi_{jz}(0) + \bar{Q}_z$$

$$j = 1, \dots, M \quad . \quad (3.2.18)$$

Observa-se que a forma dos sistemas obtidos é essencialmente a mesma dos problemas unidimensional e bidimensional, modificando-se apenas o número de sistemas resultantes e a ordem das matrizes envolvidas. Assim, o método de Gauss-Jordan com operações simbólicas (discutido na seção 2.2) pode ser aplicado aos sistemas (3.2.1), (3.2.7) e (3.2.13) para a inversão das respectivas matrizes. Da mesma forma, a técnica de expansão de Heaviside pode também ser aplicada para inverter a transformada de Laplace após a inversão das matrizes, obtendo-se expressões analíticas para os fluxos angulares médios nas faces do domínio e nas direções paralelas às arestas do domínio. A exemplo do caso bidimensional, esse procedimento conduz às seguintes formulações para os fluxos angulares médios e para os fluxos transversos na fronteira :

$$\psi_{mx}(x) = \sum_{l=1}^M C_{ml} x^{n_{ml}-1} e^{r_{ml}x} \quad (3.2.19)$$

$$\psi_{my}(y) = \sum_{l=1}^M D_{ml} y^{o_{ml}-1} e^{s_{ml}y} \quad (3.2.20)$$

$$\psi_{mz}(z) = \sum_{l=1}^M E_{ml} z^{p_{ml}-1} e^{t_{ml}z} \quad (3.2.21)$$

$$\psi_m^y(x, 0) = \sum_{l=1}^M \mathcal{E}_{ml} x^{r_{ml}-1} e^{r_{ml}x} \quad (3.2.22)$$

$$\psi_m^y(x, b) = \sum_{l=1}^M C_{ml} x^{n_{ml}-1} e^{r_{ml}x} \quad (3.2.23)$$

$$\psi_m^z(x, 0) = \sum_{l=1}^M C_{ml} x^{N_{ml}-1} e^{R_{ml}x} \quad (3.2.24)$$

$$\psi_m^z(x, c) = \sum_{l=1}^M C_{ml} x^{n_{ml}-1} e^{r_{ml}x} \quad (3.2.25)$$

$$\psi_m^x(0, y) = \sum_{l=1}^M \mathcal{D}_{ml} y^{o_{ml}-1} e^{o_{ml}y} \quad (3.2.26)$$

$$\psi_m^x(a, y) = \sum_{l=1}^M D_{ml} y^{o_{ml}-1} e^{s_{ml}y} \quad (3.2.27)$$

$$\psi_m^z(y, 0) = \sum_{l=1}^M D_{ml} y^{O_{ml}-1} e^{S_{ml}y} \quad (3.2.28)$$

$$\psi_m^z(y, c) = \sum_{l=1}^M D_{ml} y^{o_{ml}-1} e^{s_{ml}y} \quad (3.2.29)$$

$$\psi_m^x(0, z) = \sum_{l=1}^M \mathcal{G}_{ml} z^{p_{ml}-1} e^{t_{ml}z} \quad (3.2.30)$$

$$\psi_m^x(a, z) = \sum_{l=1}^M E_{ml} z^{p_{ml}-1} e^{t_{ml}z} \quad (3.2.31)$$

$$\psi_m^y(0, z) = \sum_{l=1}^M E_{ml} z^{p_{ml}-1} e^{T_{ml}z} \quad (3.2.32)$$

$$\psi_m^y(b, z) = \sum_{l=1}^M E_{ml} x^{p_{ml}-1} e^{t_{ml}x} \quad (3.2.33)$$

Seguindo um procedimento análogo ao do caso bidimensional, os coeficientes $C_1, \mathcal{G}_1, C_1, C_1, C_1, D_1, \dots, E_1$ são determinados pela aplicação das condições de contorno, através da resolução de um sistema linear pelo método de Gauss com refinamento. Nesse caso, o sistema gerado contém $9(6M)^2$ equações, e requer $3(6M)^2 - 36M$ derivações sobre as soluções encontradas.

3.3 RESULTADOS NUMÉRICOS

A formulação LTSn tridimensional foi utilizada na resolução da equação de transporte Sn para um problema em coordenadas cilíndricas. Um reator de altura 6cm e 5cm de raio contém no seu centro uma fonte de raio 2,5 cm emitindo 1 nêutron/cm³s. As faces

externas do reator apresentam condição de contorno de superfície livre (vácuo), e as seções de choque total e de espalhamento, válidas para o interior da fonte e para o restante do reator, são, respectivamente, $\sigma_t = 1 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0,5 \text{ cm}^{-1}$. A respectiva equação de transporte SN é dada por

$$(1-\xi^2)^{1/2} \left[\frac{\mu_m}{h_1} \frac{\partial \psi_m^g(u,v,w)}{\partial u} + \frac{\eta_m}{h_2} \frac{\partial \psi_m^g(u,v,w)}{\partial v} \right] + \frac{\xi_m}{h_3} \frac{\partial \psi_m^g(u,v,w)}{\partial w} + \sigma_t^g \psi_m^g(u,v,w) = Q(u,v,w) + \sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^M \sigma_{smn}^{gg'} \omega_n \psi_n^g(u,v,w) \quad (3.3.1)$$

onde u , v e w são coordenadas curvilíneas a definir, e h_1 e h_2 são seus coeficientes métricos (ver apêndice B). A fim de possibilitar a aplicação da formulação LTSN ao problema envolvendo um reator cilíndrico, foram efetuadas as seguintes mudanças de variável :

$$x = e^u \cos v \quad (3.3.2)$$

$$y = e^u \sin v \quad (3.3.3)$$

$$z = w \quad (3.3.4)$$

Essas equações definem as coordenadas curvilíneas u , v e w em termos das coordenadas cartesianas x , y e z . Nas variáveis x , y e z , a equação de transporte é escrita como

$$\begin{aligned}
(1-\xi^2)^{1/2} & \left[\mu_m \frac{\partial \psi_m^g(x,y,z)}{\partial x} + \eta_m \frac{\partial \psi_m^g(z,y,z)}{\partial y} \right] + \xi_m \frac{\partial \psi_m^g(z,y,z)}{\partial z} \\
+ \sigma_l^g \psi_m^g(x,y,z) & = Q(x,y,z) + \sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^M \sigma_{smn}^{gg'} \omega_n \psi_n^{g'}(x,y,z) \quad , \quad (3.3.5)
\end{aligned}$$

que coincide com a equação (3.1.1), e os limites do domínio passam a ser $-\infty < x < \ln 5$, $-\pi < y < \pi$ e $0 < z < 6$ (cm). A condição de contorno de superfície livre passa a ser aplicada nas faces $x = \ln 5$, $z = 0$ e $z = 6$, havendo condição de reflexão especular em $x = -\infty$, $y = -\pi$ e $y = \pi$, que correspondem ao interior do domínio original. A mudança de variáveis, que corresponde à transformação $w = e^z$ no plano complexo, é mostrada na figura 3.1. O emprego da transformação $w = e^z$ constitui um caso particular do método de obtenção de soluções para problemas em coordenadas curvilíneas, descrito no capítulo 5.

Para evitar o limite infinito em u , foi substituído o intervalo $0 < r < 5$ no problema original, por $\delta < r < 5$, sendo δ um valor pequeno para o qual seja possível extrapolar a solução obtida para o centro do reator. Assim, o limite inferior de u passou a ser o valor finito $\ln \delta$.

A solução gerada pela quadratura LTSz nas novas variáveis foi reconvertida às variáveis u , v e w , e comparada com valores numéricos obtidos através dos sistemas ETEFEH e DOT [11], para o fluxo escalar em função da coordenada radial. Os resultados são apresentados na tabela 3.1 [14,15].

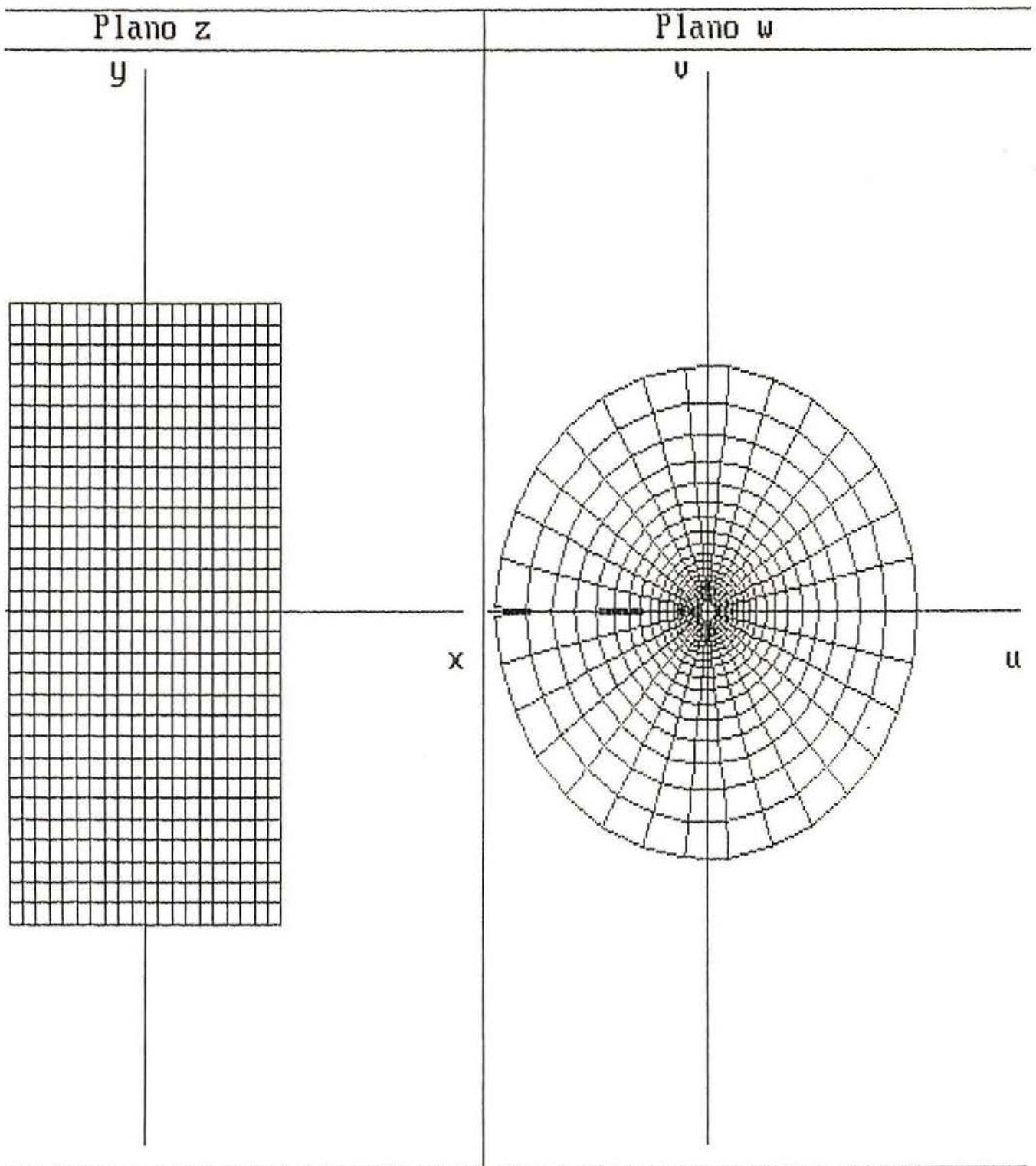


Figura 3.1 - Transformação $w = e^z$

Tabela 3.1 - Fluxo escalar em função da distância ao centro do reator

r (cm)	Fluxo escalar (nêutrons/cm ² s)		
	ETEFEH	DOT	LTSz
0,0	1,00	1,00	1,04
1,0	0,96	0,96	1,01
2,0	0,73	0,80	0,87
3,0	0,21	0,21	0,17
4,0	0,05	0,05	0,01

Os valores foram obtidos para uma secção em $z=3\text{cm}$. Uma vez que o método LTSn não fornece diretamente valores para o fluxo no interior do domínio, os resultados tabelados foram obtidos por interpolação, utilizando polinômios de Lagrange.

Os resultados apresentam boa concordância com os valores calculados através dos sistemas ETEFEH e DOT, considerando a baixa ordem de quadratura angular e o pós-processamento requerido. Futuramente, com o uso de aproximações de ordem superior, em fase de implementação para computadores de grande porte, resultados de maior precisão são esperados.

Nos capítulos 2 e 3 foi descrito o tratamento de problemas de ordenadas discretas multidimensionais, que consiste na obtenção de expressões analíticas para os fluxos angulares médios e para os fluxos angulares transversos na fronteira, em função das variáveis espaciais. Além de problemas formulação LTSn é também aplicável na obtenção de soluções para problemas inversos em teoria de transporte, como será mostrado no próximo capítulo.

4 OS PROBLEMAS INVERSOS

O caráter analítico da formulação LTSN permite que sejam obtidas soluções para problemas inversos SN em teoria de transporte. Neste trabalho são considerados dois tipos de problema inverso. O primeiro consiste na determinação dos fluxos angulares que incidem no domínio, uma vez conhecidos os fluxos escalares no seu interior. No segundo tipo de problema inverso, são calculadas as seções de choque que caracterizam o meio, uma vez determinados os fluxos angulares emergentes do domínio.

4.1 DETERMINAÇÃO DOS FLUXOS INCIDENTES

As equações (2.2.3) e (2.2.9) estabelecem relações entre os fluxos angulares na fronteira e os fluxos angulares médios. A partir de valores conhecidos para o fluxo escalar em n pontos do domínio, sendo $n \geq M$, são calculados os fluxos angulares que incidem no contorno do domínio, utilizando os sistemas (2.2.3) e (2.2.9). Para tal, isolam-se nesses sistemas os fluxos de entrada no domínio, obtendo-se

$$\bar{\psi}_{x0}^e = \bar{A}_x \bar{\psi}_x - \bar{\psi}_{x0}^s \quad (4.1.1)$$

$$\bar{\psi}_{y0}^e = \bar{A}_y \bar{\psi}_{\sim y} - \bar{\psi}_{\sim y0}^s, \quad (4.1.2)$$

onde o vetor de termos independentes foi dividido em duas parcelas, onde figuram os índices "e" e "s"; a primeira contém apenas os fluxos angulares incidentes, e a segunda, os fluxos angulares emergentes, os fluxos angulares médios na fronteira e a fonte. Aplicando a transformada inversa sobre as equações (4.1.1) e (4.1.2), resulta

$$\bar{\psi}_{x0}^e = \bar{A}_x * \bar{\psi}_{\sim x} + \bar{\psi}_{\sim x0}^s \quad (4.1.3)$$

e

$$\bar{\psi}_{y0}^e = \bar{A}_y * \bar{\psi}_{\sim y} + \bar{\psi}_{\sim y0}^s \quad (4.1.4)$$

A fim de determinar as componentes dos vetores $\bar{\psi}_{x0}^e$ e $\bar{\psi}_{y0}^e$, é preciso calcular previamente os fluxos médios e os fluxos transversos de saída, presentes nos vetores do membro direito. Ambos os termos são calculados com base nos valores fornecidos para o fluxo escalar nos n pontos interiores do domínio.

Inicialmente interpolam-se os fluxos escalares em M pontos vizinhos de cada ponto do conjunto original, dispostos como mostra a figura 4.1.

- Pontos originais
 - Pontos interpolados
- (Exemplo para $M=4$)

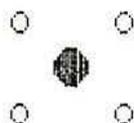
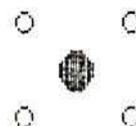
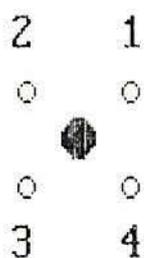
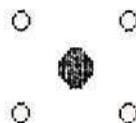


Figura 4.1 - Pontos originais e interpolados

Em seguida, calculam-se os fluxos angulares nos pontos do conjunto original, utilizando-se os valores interpolados dos fluxos escalares nos pontos vizinhos :

$$\begin{aligned}
\psi_1^1 &= \frac{\Phi^{11}}{\sum_{i=1}^M \Phi^{1i}} \phi_1^1, & \psi_2^1 &= \frac{\Phi^{12}}{\sum_{i=1}^M \Phi^{1i}} \phi_2^1, & \dots, & & \psi_M^1 &= \frac{\Phi^{1M}}{\sum_{i=1}^M \Phi^{1i}} \phi_M^1, \\
\psi_1^2 &= \frac{\Phi^{21}}{\sum_{i=1}^M \Phi^{2i}} \phi_1^2, & \psi_2^2 &= \frac{\Phi^{22}}{\sum_{i=1}^M \Phi^{2i}} \phi_2^2, & \dots, & & \psi_M^2 &= \frac{\Phi^{2M}}{\sum_{i=1}^M \Phi^{2i}} \phi_M^2, \\
& & & & & & & \vdots \\
\psi_1^n &= \frac{\Phi^{n1}}{\sum_{i=1}^M \Phi^{ni}} \phi_1^n, & \psi_2^n &= \frac{\Phi^{n2}}{\sum_{i=1}^M \Phi^{ni}} \phi_2^n, & \dots, & & \psi_M^n &= \frac{\Phi^{nM}}{\sum_{i=1}^M \Phi^{ni}} \phi_M^n,
\end{aligned} \tag{4.1.5}$$

onde ϕ representa os fluxos escalares previamente conhecidos do conjunto original de pontos, e Φ os respectivos valores interpolados. O primeiro índice superior se refere ao ponto do conjunto original. O segundo índice superior, relativo ao ponto vizinho, é o mesmo sub-índice da direção discreta, como mostra a figura 1. Os fluxos angulares obtidos nos pontos dados são então extrapolados para as fronteiras, a fim de obter os fluxos transversos de saída. Os mesmos valores dos fluxos angulares, integrados numericamente sobre a região, produzem os fluxos médios

$$\psi_{mx} = \frac{1}{a} \int_0^a \psi_m^k \omega_k dy \tag{4.1.6}$$

e

$$\psi_{my} = \frac{1}{b} \int_0^b \psi_m^k \omega_k dx \tag{4.1.7}$$

Os fluxos médios e os fluxos transversos de saída, descritos pelas equações (4.1.6) e (4.1.7), são então substituídos nos sistemas de equações (4.1.3) e (4.1.4), obtendo-se as seguintes expressões para os fluxos incidentes em termos das variáveis x e y :

$$\psi_m(x, 0) = \sum_{i=1}^M A_{mi} x^{k_{mi}} e^{r_{mi} x}, \quad (4.1.8)$$

$$\psi_m(x, b) = \sum_{i=1}^M B_{mi} x^{k_{mi}} e^{r_{mi} x}, \quad (4.1.9)$$

$$\psi_m(0, y) = \sum_{i=1}^M C_{mi} y^{l_{mi}} e^{s_{mi} y}, \quad (4.1.10)$$

$$\psi_m(a, y) = \sum_{i=1}^M D_{mi} y^{l_{mi}} e^{s_{mi} y}, \quad (4.1.11)$$

onde as constantes A_{mi} , B_{mi} , C_{mi} e D_{mi} são conhecidas, ao contrário do que se verifica no método direto. Ocorre que no problema inverso os fluxos angulares médios são previamente determinados; a substituição das equações (4.1.6) e (4.1.7) nos sistemas (4.1.3) e (4.1.4) é uma operação análoga à aplicação das condições de contorno para a obtenção das constantes no método direto.

4.2 RESULTADOS NUMÉRICOS

A partir do problema do reator cilíndrico resolvido na seção 3.3 através da formulação LTSN em três dimensões, foi solucionado um problema inverso envolvendo a determinação dos fluxos angulares incidentes no domínio [17]. Nesse problema, os fluxos angulares médios e os fluxos angulares transversos emergentes do domínio são utilizados para calcular os fluxos angulares incidentes, conhecidos os valores das seções de choque total e de espalhamento. É empregada no problema a aproximação LTSz. Os fluxos incidentes a calcular são $\psi_1(r=0, \theta=0, z)$ e $\psi_4(r=0, \theta=0, z)$, posição correspondente ao eixo do reator. A determinação dos fluxos incidentes é efetuada através da resolução das equações (4.1.3) e (4.1.4). A partir dos fluxos angulares obtidos, são calculados valores numéricos para o fluxo escalar no eixo central do reator, os quais são comparados aos dados gerados pelo programa ETEFEH [11] na tabela 4.1.

Tabela 4.1 - Fluxo escalar no centro do reator

r(cm)	Fluxo escalar (nêutrons/cm ² s)	
	ETEFEH	LTSz
0	1,00	1,07
1,0	0,96	1,05
2,0	0,73	0,79
3,0	0,21	0,008

A concordância entre os resultados é aceitável, considerando a ordem de aproximação utilizada (LTS₂), o que indica a viabilidade da aplicação da formulação LTSN a problemas dessa natureza. O sistema ETEFEH, tomado como padrão, emprega uma malha composta de 384 elementos hexaédricos, e utiliza formulação PN.

Além do cálculo dos fluxos angulares incidentes, o método LTSN pode ser utilizado na determinação dos valores das seções de choque total e de espalhamento. O método através do qual são determinados esses parâmetros é apresentado a seguir.

4.3 DETERMINAÇÃO DAS SEÇÕES DE CHOQUE

Dados os valores dos fluxos angulares médios e transversos na fronteira, estima-se as seções de choque total e de espalhamento para o meio a partir do reagrupamento dos termos da transformada de Laplace inversa das equações LTSN. Aplicando-se a transformada inversa sobre a equação (2.2.3) e colocando em evidência as seções de choque, resulta

$$B_x \sigma \sim = C_x \quad , \quad (4.3.1)$$

onde B_x é uma matriz $(GM)^2 \times GM$, escrita como

$$B_x = \begin{bmatrix} b & & & \\ & b & & \\ & & \ddots & \\ & & & b \end{bmatrix} \quad , \quad (4.3.2)$$

cujos elementos b representam vetores-linha de ordem GM , dados por

$$b = [\psi_{1x}^1, \dots, \psi_{Mx}^1, \psi_{1x}^2, \dots, \psi_{Mx}^2, \dots, \psi_{1x}^G, \dots, \psi_{Mx}^G] , \quad (4.3.3)$$

σ é o vetor das seções de choque, de ordem $(GM)^2$, definido como

$$\begin{aligned} \sigma = \text{col} & \left[\sigma_t - \omega_1 \sigma_s^{11}, -\omega_2 \sigma_s^{11}, \dots, -\omega_M \sigma_s^{11}, -\omega_1 \sigma_s^{11}, \sigma_t - \omega_2 \sigma_s^{11}, \dots \right. \\ & \dots, -\omega_M \sigma_s^{11}, \dots, \sigma_t - \omega_1 \sigma_s^{12}, \sigma_t - \omega_1 \sigma_s^{12}, -\omega_2 \sigma_s^{12}, \dots, -\omega_M \sigma_s^{12}, -\omega_1 \sigma_s^{12}, \\ & \sigma_t - \omega_2 \sigma_s^{12}, \dots, -\omega_M \sigma_s^{12}, \dots, \sigma_t - \omega_M \sigma_s^{12}, \dots, \sigma_t - \omega_1 \sigma_s^{GG}, -\omega_2 \sigma_s^{GG}, \dots, \\ & \left. -\omega_M \sigma_s^{GG}, -\omega_1 \sigma_s^{GG}, \sigma_t - \omega_2 \sigma_s^{GG}, \dots, -\omega_M \sigma_s^{GG}, \dots, \sigma_t - \omega_M \sigma_s^{GG} \right] , \quad (4.3.4) \end{aligned}$$

e o vetor de termos independentes, de ordem MG , é expresso como

$$\begin{aligned} C_x = \text{col} & \left[\mu_1 \frac{d\psi_{1x}^1}{dx} + Q_x - \frac{\eta_1}{b} \left[\psi_1(x, b) - \psi_1(x, 0) \right] , \dots , \right. \\ & \mu_M \frac{d\psi_{Mx}^1}{dx} + Q_x - \frac{\eta_M}{b} \left[\psi_M(x, b) - \psi_M(x, 0) \right] , \dots , \\ & \mu_1 \frac{d\psi_{1x}^M}{dx} + Q_x - \frac{\eta_1}{b} \left[\psi_1(x, b) - \psi_1(x, 0) \right] , \dots , \\ & \left. \mu_M \frac{d\psi_{Mx}^M}{dx} + Q_x - \frac{\eta_M}{b} \left[\psi_M(x, b) - \psi_M(x, 0) \right] \right] . \quad (4.3.5) \end{aligned}$$

No caso tridimensional é empregada a equação (3.2.1), havendo no

vetor C_x duas parcelas análogas ao terceiro termo, correspondentes às condições de contorno nas variáveis y e z .

Uma vez que as matrizes B_x e C_x são de ordem $GM \times (GM)^2$, o sistema (3.2.13) resulta indeterminado. De fato, existem, $(GM)^2$ seções de choque de espalhamento a calcular, além da seção de choque total. A exemplo do procedimento adotado na determinação dos coeficientes numéricos dos fluxos angulares, são utilizadas as derivadas dos fluxos para obter o fechamento do sistema. Se cada equação for derivada $GM-1$ vezes, será obtido um sistema de $(GM)^2$ equações, representado por

$$\underset{\sim}{B} \underset{\sim}{\sigma} = \underset{\sim}{C} \quad , \quad (4.3.6)$$

onde B é uma matriz $(GM)^2 \times (GM)^2$, escrita como

$$B = \begin{bmatrix} B & & & \\ & B & & \\ & & \ddots & \\ & & & B \end{bmatrix} \quad (4.3.7)$$

e o vetor coluna $\underset{\sim}{C}$ é dado por

$$\begin{aligned}
\tilde{C} = \text{col} & \left[\mu_1 \frac{d\psi_{1x}^1}{dx} + Q_x - \frac{\eta_1}{b} \left[\psi_1^1(x, b) - \psi_1^1(x, 0) \right] , \dots , \right. \\
& \mu_1 \frac{d^M \psi_{1x}^1}{dx^M} + \frac{d^{M-1}}{dx^{M-1}} \left\{ Q_x - \frac{\eta_1}{b} \left[\psi_1^1(x, b) - \psi_1^1(x, 0) \right] \right\} , \dots , \\
& \mu_2 \frac{d\psi_{2x}^1}{dx} + Q_x - \frac{\eta_2}{b} \left[\psi_2^1(x, b) - \psi_2^1(x, 0) \right] , \dots , \\
& \mu_2 \frac{d^M \psi_{2x}^1}{dx^M} + \frac{d^{M-1}}{dx^{M-1}} \left\{ Q_x - \frac{\eta_2}{b} \left[\psi_2^1(x, b) - \psi_2^1(x, 0) \right] \right\} , \dots , \\
& \mu_M \frac{d^M \psi_{Mx}^1}{dx^M} + \frac{d^{M-1}}{dx^{M-1}} \left\{ Q_x - \frac{\eta_M}{b} \left[\psi_M^1(x, b) - \psi_M^1(x, 0) \right] \right\} , \dots , \\
& \mu_1 \frac{d\psi_{1x}^0}{dx} + Q_x - \frac{\eta_1}{b} \left[\psi_1^0(x, b) - \psi_1^0(x, 0) \right] , \dots , \\
& \mu_1 \frac{d^M \psi_{1x}^0}{dx^M} + \frac{d^{M-1}}{dx^{M-1}} \left\{ Q_x - \frac{\eta_1}{b} \left[\psi_1^0(x, b) - \psi_1^0(x, 0) \right] \right\} , \dots , \\
& \mu_2 \frac{d\psi_{2x}^0}{dx} + Q_x - \frac{\eta_2}{b} \left[\psi_2^0(x, b) - \psi_2^0(x, 0) \right] , \dots , \\
& \mu_2 \frac{d^M \psi_{2x}^0}{dx^M} + \frac{d^{M-1}}{dx^{M-1}} \left\{ Q_x - \frac{\eta_2}{b} \left[\psi_2^0(x, b) - \psi_2^0(x, 0) \right] \right\} , \dots , \\
& \mu_M \frac{d^M \psi_{Mx}^0}{dx^M} + \frac{d^{M-1}}{dx^{M-1}} \left\{ Q_x - \frac{\eta_M}{b} \left[\psi_M^0(x, b) - \psi_M^0(x, 0) \right] \right\} \left. \right] , \quad (4.3.8)
\end{aligned}$$

em que B representa um bloco GMxGM da matriz, dado por :

$$B = \begin{bmatrix} \psi_{1x}^1 & \dots & \psi_{Mx}^1 & \dots & \psi_{1x}^G & \dots & \psi_{Mx}^G \\ \frac{d\psi_{1x}^1}{dx} & \dots & \frac{d\psi_{Mx}^1}{dx} & \dots & \frac{d\psi_{1x}^G}{dx} & \dots & \frac{d\psi_{Mx}^G}{dx} \\ \vdots & & & & & & \\ \frac{d^{(M-1)}\psi_{1x}^1}{dx^{M-1}} & \dots & \frac{d^{(M-1)}\psi_{Mx}^1}{dx^{M-1}} & \dots & \frac{d^{(M-1)}\psi_{1x}^M}{dx^{M-1}} & \dots & \frac{d^{(M-1)}\psi_{Mx}^M}{dx^{M-1}} \end{bmatrix} \quad (4.3.9)$$

Aplica-se a equação resultante em $x=a$, obtendo-se um sistema numérico desacoplado, formado por GM subsistemas de ordem GM , cujas matrizes são iguais, diferindo nos vetores de termos independentes. Os subsistemas são resolvidos através do método de Gauss-Jordan. Em seguida, ajusta-se um polinômio $P(\mu, \mu')$ aos elementos de σ para os quais $i=j$, que já foram explicitamente determinados por não estarem acompanhados do termo σ_i no vetor solução σ . Aplica-se então o polinômio encontrado em uma das direções discretas, a fim de determinar indiretamente o valor de σ_i : calcula-se inicialmente $\sigma_{s_{ii}} \approx P(\mu_i, \mu_i)$, substitui-se o resultado na posição correspondente do vetor solução, e isola-se a seção de choque total, através da seguinte relação:

$$\sigma_i = \sigma(i) + \omega_i P(\mu_i, \mu_i) \quad , \quad (4.3.10)$$

onde $\alpha(i)$ representa a i -ésima componente do vetor σ .

O método pode ser aplicado a problemas de espalhamento isotrópico ou anisotrópico de qualquer grau; o grau de anisotropia é determinado automaticamente na etapa de ajuste. Os valores obtidos para as seções de choque podem ser utilizados como aproximações iniciais para um processo de refinamento iterativo envolvendo as equações (2.2.3) e (2.2.9), a fim de melhorar a precisão dos resultados.

4.4 RESULTADOS NUMÉRICOS

A formulação LTSN foi novamente utilizada na resolução de um problema inverso envolvendo o reator cilíndrico mencionado na seção 3.3. Os fluxos angulares determinados na seção 3.3, através do uso da quadratura LTSz em três dimensões, são agora utilizados no cálculo das seções de choque total e de espalhamento, fazendo uso da equação (4.3.6) e utilizando também a quadratura LTSz [17]. Os elementos $\delta_{ij} \sigma_t - \omega_j \sigma_{s_{ij}}$ do vetor σ são mostrados na tabela 4.2. Os elementos da tabela para os quais $i=j$ foram submetidos a um ajuste polinomial, gerando o polinômio de grau zero $\sigma_s = 0,3638$, que é o valor estimado da seção de choque de espalhamento. O valor exato corresponde a $\sigma_s = 0,5$.

Tabela 4.2 - Elementos do vetor σ_{\sim}

$i \setminus j$	1	2	3	4
1	0,4976	0,3331	0,3829	0,3497
2	0,3535	0,4639	0,2982	0,3766
3	0,4126	0,3603	0,4755	0,3277
4	0,3656	0,3843	0,4213	0,5187

A seção de choque total foi obtida calculando a média dos valores individuais obtidos aplicando-se a equação (4.3.6) aos elementos de σ para os quais $i=j$. Os valores individuais encontrados foram $\sigma_{t1} = 0,8614$, $\sigma_{t2} = 0,8277$, $\sigma_{t3} = 0,8393$ e $\sigma_{t4} = 0,8825$, resultando como estimativa para a seção de choque total o valor médio $\sigma_t = 0,8527$, sendo o seu valor exato igual a $\sigma_t = 1$.

Além de fornecer a solução da equação de ordenadas discretas multidimensional em coordenadas retangulares, bem como a solução de problemas inversos, o método LTSN permite a obtenção de soluções para problemas bidimensionais em coordenadas curvilíneas, através do uso de transformações conformes. O tratamento de problemas em coordenadas curvilíneas é discutido a seguir.

5 - PROBLEMAS BIDIMENSIONAIS EM COORDENADAS CURVILÍNEAS

A formulação LTSn bidimensional em coordenadas retangulares pode ser utilizada para a obtenção da solução de problemas envolvendo geometrias irregulares, através do emprego de transformações conformes. Essa técnica permite a resolução da equação de transporte em domínios convexos pelo método LTSn, dispensando a necessidade de discretização do domínio.

Considere-se a seguinte equação bidimensional nas coordenadas curvilíneas ortogonais u e v :

$$\frac{1}{h_1} \mu_m \frac{\partial \psi_m^g(u, v)}{\partial u} + \frac{1}{h_2} \eta_m \frac{\partial \psi_m^g(u, v)}{\partial v} + \sigma_l^g \psi_m^g(u, v) = Q(u, v) + \sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^M \sigma_{smn}^{gg'} w_n \psi_n^{g'}(u, v), \quad (5.1)$$

sujeita a condições de contorno análogas às apresentadas na seção 2.1, aplicadas sobre o contorno curvilíneo do domínio mostrado na figura 5.1. Nessa equação, h_1 e h_2 são os coeficientes métricos que relacionam as coordenadas curvilíneas u e v às coordenadas cartesianas x e y (ver apêndice B), expressos como :

$$h_1 = \left[\left(\frac{\partial x}{\partial u} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial u} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (5.2)$$

e

$$h_2 = \left[\left(\frac{\partial x}{\partial v} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial v} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (5.3)$$

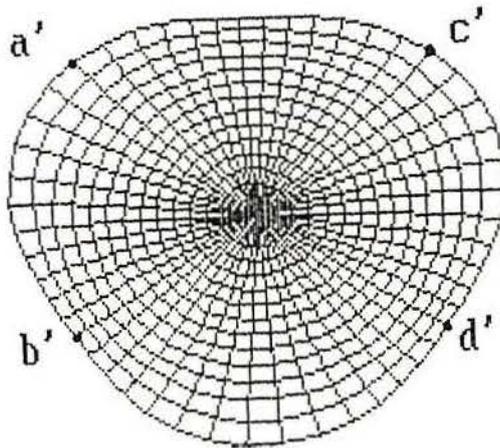


Figura 5.1 - Domínio do problema original

Aplicando-se a transformação de coordenadas do sistema (u, v) para o sistema (x, y) , isto é, as transformações $u(x, y)$ e $v(x, y)$ na equação (5.1), obtém-se a seguinte equação transformada em coordenadas cartesianas :

$$\mu_m \frac{\partial \psi_m^g(x, y)}{\partial x} + \eta_m \frac{\partial \psi_m^g(x, y)}{\partial y} + \sigma_t^g \psi_m^g(x, y) = Q(x, y) + \sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^M \sigma_{smn}^{gg'} w_n \psi_n^g(x, y) \quad m = 1, 2, \dots, M \quad (5.4)$$

Esta equação está sujeita às mesmas condições de contorno do problema original, aplicadas sobre os pontos correspondentes à imagem do contorno original no plano x-y, mostrado na figura 5.2 .

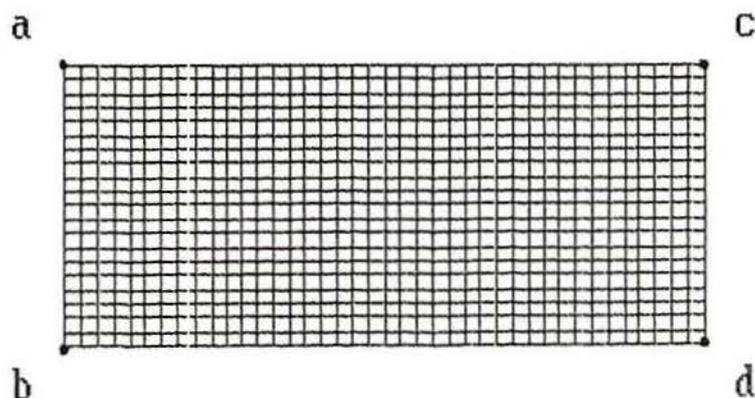


Figura 5.2 - Domínio do problema em coordenadas cartesianas

A equação (5.4) pode ser então resolvida pela aplicação direta da formulação LTSN bidimensional em coordenadas cartesianas, descrita no capítulo 2 . Obtida a solução para o problema em coordenadas cartesianas, aplicam-se as funções $u(x,y)$ e $v(x,y)$ para transferir a solução do problema original ao plano u-v.

A obtenção das funções $u(x,y)$ e $v(x,y)$, que definem a transformação utilizada, é realizada em duas etapas. Na primeira, parte-se de uma placa para chegar a um círculo, utilizando uma transformação conforme conhecida [9]. Em seguida, parte-se do círculo para chegar ao domínio desejado, utilizando-se as equações

paramétricas que definem o contorno do domínio e as condições de Cauchy-Riemann em coordenadas polares :

$$\frac{\partial \rho}{\partial r} = \frac{\rho}{r} \frac{\partial \phi}{\partial \theta} \quad (5.5)$$

$$\frac{\partial \rho}{\partial \theta} = -\rho r \frac{\partial \phi}{\partial r} \quad , \quad (5.6)$$

onde $\rho = (u^2 + v^2)^{1/2}$ e $\phi = \text{tg}^{-1}(v/u)$. Isolando ρ e ϕ no sistema (43) obtém-se, respectivamente, $\nabla^2 \rho = 0$ e $\nabla^2 \phi = 0$. Impondo a condição de contorno $\rho(r_0, \theta) = \rho_0(\theta)$, onde r_0 é o raio do círculo, e exigindo que a função $\rho(r, \theta)$ seja limitada em $r=0$, obtém-se a solução

$$\rho(r, \theta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \rho_0(\theta) d\theta + \frac{1}{\pi} \sum_{\nu=1}^{\infty} \left(\frac{r}{r_0}\right)^{\nu} \left[\cos \nu \theta \int_0^{2\pi} \rho_0(\theta) \cos \nu \theta d\theta + \sin \nu \theta \int_0^{2\pi} \rho_0(\theta) \sin \nu \theta d\theta \right] . \quad (5.7)$$

Nesta equação, $\rho_0(\theta)$ representa a função paramétrica radial do contorno do domínio. Expressão análoga é encontrada para ϕ impondo-se que $\phi(0, \theta)$ seja finita e que $\phi(r_0, \theta) = \phi_0(\theta)$, sendo $\phi_0(\theta)$ a função paramétrica angular do contorno :

$$\phi(r, \theta) = \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} \phi_0(\theta) d\theta + \frac{1}{\pi} \sum_{\nu=1}^{\infty} \left(\frac{r}{r_0}\right)^{\nu} \left[\cos \nu \theta \int_0^{2\pi} \phi_0(\theta) \cos \nu \theta d\theta + \sin \nu \theta \int_0^{2\pi} \phi_0(\theta) \sin \nu \theta d\theta \right] . \quad (5.8)$$

As equações (5.7) e (5.8) apresentam o inconveniente de requerer um grande número de termos para representar adequadamente a mudança de coordenadas. Contudo é possível obter expressões aproximadas para as funções $\rho(r, \theta)$ e $\phi(r, \theta)$, observando o comportamento das soluções encontradas. A forma da equação (5.7) revela que $\rho(r, \theta)$ reduz-se à expansão em série de Fourier da função paramétrica $\rho_0(\theta)$ em $r=r_0$ (restrição imposta pela condição de contorno), e suas isolinhas perdem gradativamente o formato do domínio à medida que r decresce, tendendo a circunferências concêntricas. A figura 5.3 ilustra o comportamento das isolinhas da função $\rho(r, \theta)$.

Considerando então uma nova definição para a função $\rho(r, \theta)$ que apresenta comportamento semelhante ao da solução exata, pode-se determinar a função $\phi(r, \theta)$ correspondente utilizando-se uma das condições de Cauchy-Riemann. Definindo a função ρ como

$$\rho(r, \theta) = r + \rho_0(\theta) \operatorname{sech} a(r-r_0) \quad , \quad (5.9)$$

sendo "a" um parâmetro de ajuste, e usando a equação (5.6), resulta

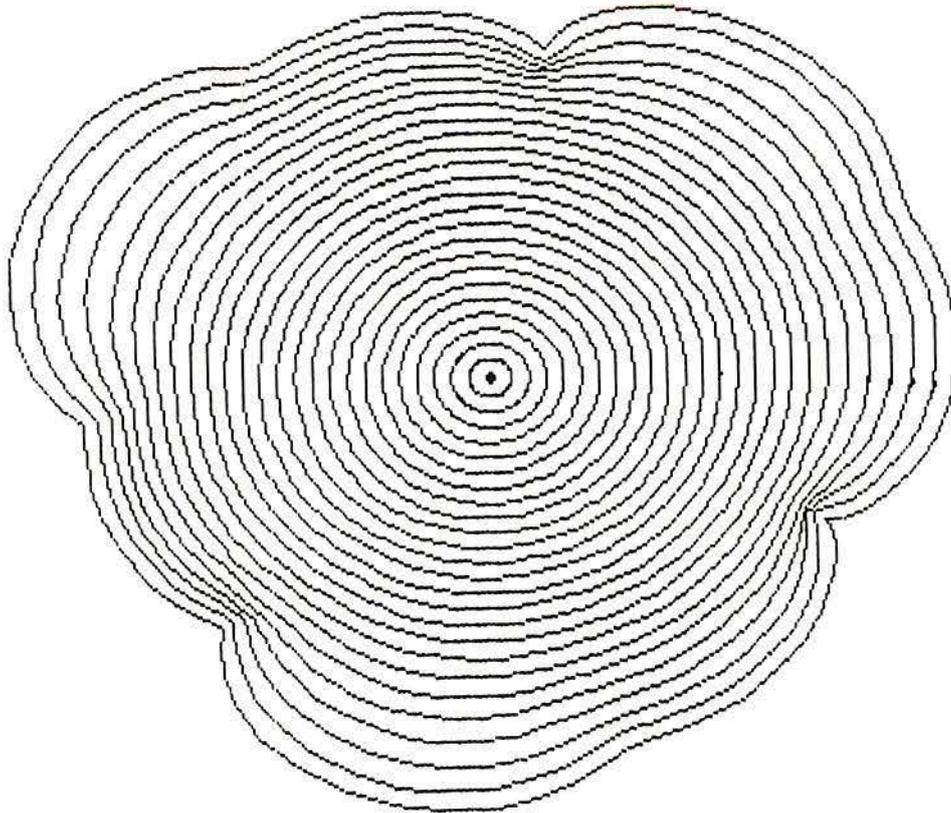


Figura 5.3 - Isolinhas da função $\rho(r, \theta)$

$$\phi(r, \theta) = - \int \frac{\frac{\partial \rho_0}{\partial \theta} \operatorname{sech} a(r-r_0)}{r^2 + r \rho_0(\theta) \operatorname{sech} a(r-r_0)} dr + \phi(0, \theta) \quad (5.10)$$

A função $\phi(0, \theta)$, resultante da integração, representa a função paramétrica angular em $r=0$. Uma vez que as isolinhas da função $\rho(r, \theta)$ tendem a círculos concêntricos quando r decresce, suas trajetórias ortogonais devem tender a retas radiais. A escolha mais conveniente para a distribuição dessas retas radiais corresponde a $\phi(0, \theta) = \theta$. Dessa forma, o sistema de coordenadas tende ao sistema polar quando r tende a zero, e ao sistema

adaptado ao contorno do domínio quando r tende a r_0 . A figura 5.4 mostra um sistema de coordenadas ortogonais baseado nas isolinhas da figura 5.3, construído por meio das equações (5.9) e (5.10).

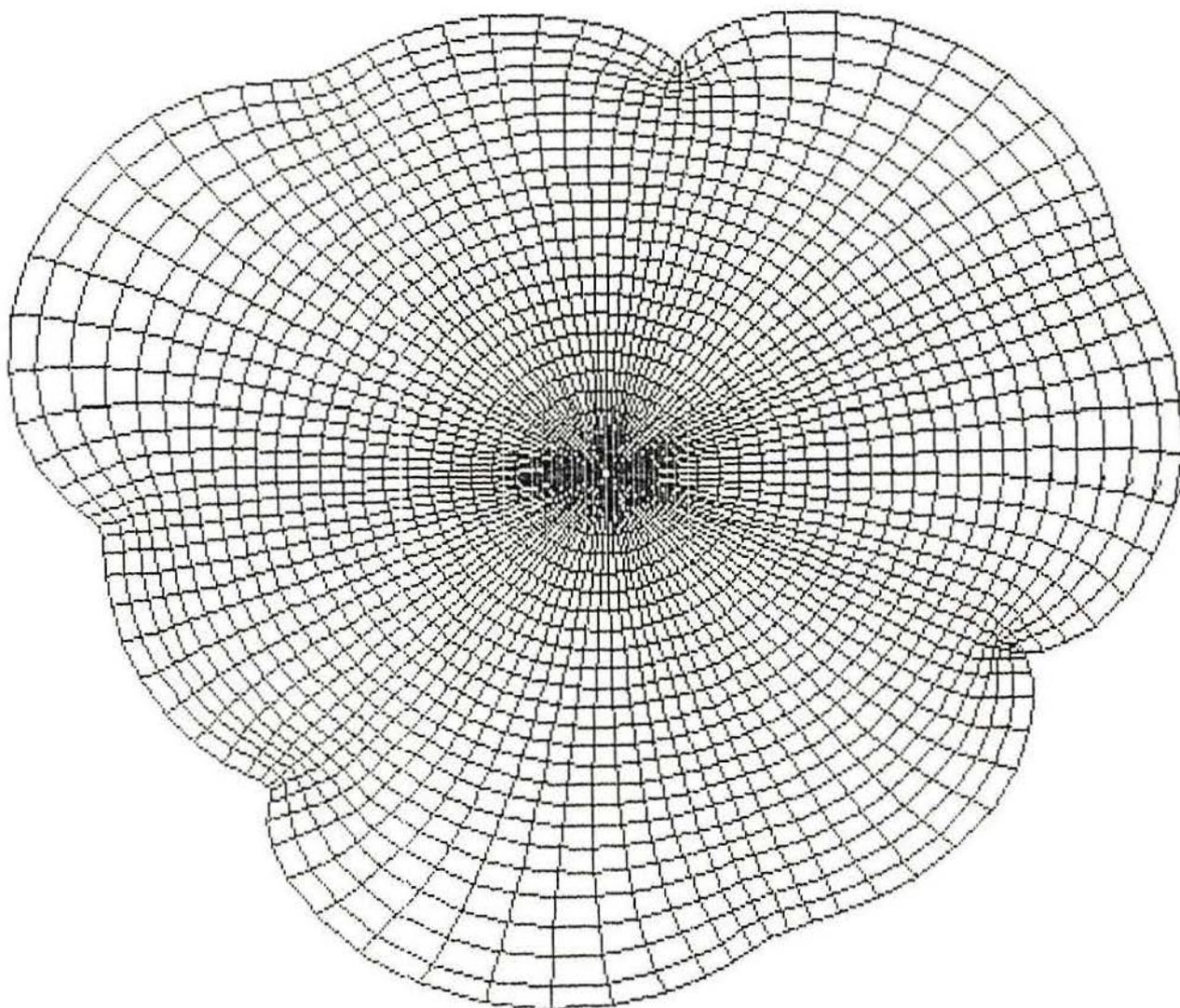


Figura 5.4 - Sistema de coordenadas para um contorno arbitrário

Calculadas as funções $\rho(r, \theta)$ e $\phi(r, \theta)$, obtêm-se as funções $u(x, y)$ e $v(x, y)$ através das relações $u = \rho \cos\phi$ e $v = \rho \sin\phi$, ficando desse modo completamente definida a transformação de coordenadas.

5.1 RESULTADOS NUMERICOS

O tratamento descrito anteriormente foi utilizado na obtenção da solução de um problema envolvendo o domínio mostrado na figura 5.5a. Nesse problema se deseja calcular os valores do fluxo escalar ao longo de uma curva traçada sobre o domínio. A equação de transporte correspondente é dada por

$$(1-\xi)^{1/2} \left[\frac{1}{h_1} \mu_m \frac{\partial \psi_m^g(u, v, w)}{\partial u} + \frac{1}{h_2} \eta_m \frac{\partial \psi_m^g(u, v, w)}{\partial v} \right] + \frac{1}{h_3} \xi_m \frac{\partial \psi_m^g(u, v, w)}{\partial w} + \sigma_t^g \psi_m^g(u, v, w) = Q(u, v, w) + \sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^M \sigma_{smn}^{gg'} \psi_n^g(u, v, w), \quad (B.1.1)$$

sujeita à condição de superfície livre em todo o contorno. As seções de choque total e de espalhamento valem, respectivamente, $\sigma_t = 1 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0,5 \text{ cm}^{-1}$, e a fonte unitária localizada no centro do domínio, representada pela região demarcada na figura 5.5, tem seu contorno delimitado pela seguinte função polar :

$$r(\theta) = 3,3 + 1,5 \operatorname{sech}(r-5) \quad . \quad (5.1.2)$$

As funções $u(x,y,z)$, $v(x,y,z)$ e $w(x,y,z)$, que definem os coeficientes métricos h_1 e h_2 para o problema, são expressas como

$$u = (0,8 + 1,5 \operatorname{sen} 3\theta) \cos \theta \quad , \quad (5.1.3)$$

$$v = (0,8 + 1,5 \operatorname{sen} 3\theta) \operatorname{sen} \theta \quad (5.1.4)$$

e

$$w = z \quad , \quad (5.1.5)$$

onde $\theta = \operatorname{tg}^{-1}(y/x)$. Utilizando-se as funções $u(x,y)$ e $v(x,y)$ para efetuar a transformação de coordenadas, obtem-se o problema auxiliar correspondente, que consiste na equação de transporte SN

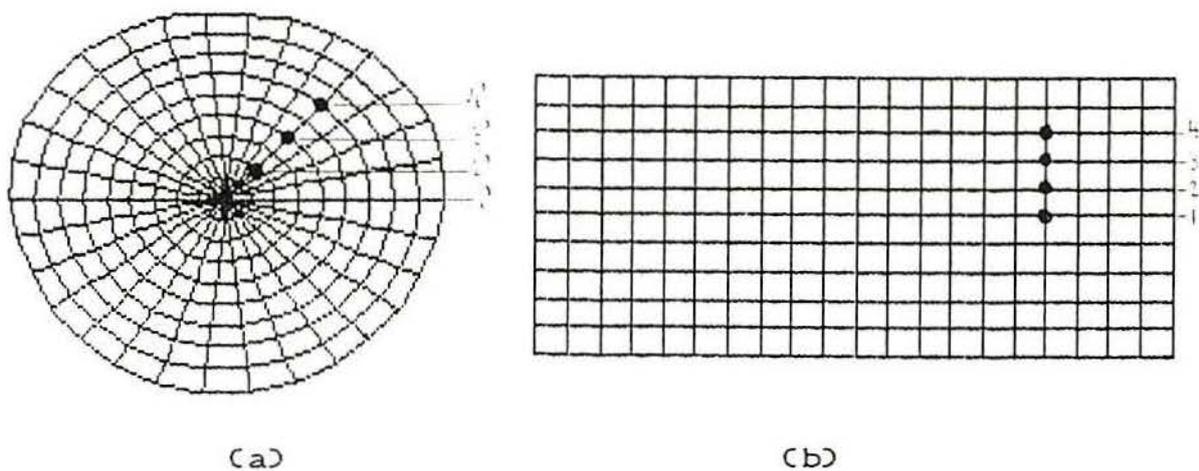


Figura 5.5 - Problemas original e auxiliar

em coordenadas retangulares, sujeita a condições de contorno de superfície livre nas faces da placa mostrada na figura 5.5b . Aplicando-se a formulação LTSz em coordenadas retangulares, obtém-se a solução do problema auxiliar, que é também válida para o problema no domínio irregular, bastando efetuar um mapeamento a fim de estabelecer a correspondência entre os pontos da placa retangular e do domínio original. Essa correspondência é representada na figura 5.5, que mostra os pontos sobre os quais são calculados os valores numéricos para o fluxo escalar em ambos os sistemas de coordenadas. Os valores numéricos do fluxo escalar nos pontos mapeados são mostrados na tabela 5.1.

Tabela 5.1 - Fluxo escalar nos pontos mapeados

Pontos	Fluxo escalar (nêutrons/cm ² s)
1 e 1'	1,04
2 e 2'	1,01
3 e 3'	0,87
4 e 4'	0,17

6 TEMPO DE PROCESSAMENTO

O tempo total de execução do programa foi avaliado para as quadraturas S_2 , S_4 e S_6 , em problemas bidimensionais com espalhamento isotrópico, para uma região e um grupo de energia. Foram utilizados computadores IBM PC modelos XT, 286 e 386SX com clocks de 10, 12 e 33 MHz respectivamente. O código foi programado no editor QBX (Quick-Basic Extended, editor do Microsoft Basic Compiler versão 7.0), e executado no próprio ambiente, ainda no modo interpretado. A tabela 6.1 mostra o tempo de execução para os três modelos citados, com o coprocessador habilitado e desabilitado.

Tabela 6.1 - Tempo de processamento do programa

N	Tempo (minutos)		
	XT	286	386SX
2	20	13	5
4	40	25	8,2
6	640	400	120

Verifica-se a partir dos resultados apresentados na tabela 6.1, que a resolução dos problemas considerados é executável em computadores de pequeno porte, sendo contudo necessário que o equipamento disponha de coprocessador.

7 CONCLUSÕES

A principal vantagem do método apresentado reside no fato de possibilitar a extensão da formulação LTS_N para a solução de problemas multidimensionais de ordenadas discretas, sem que quaisquer aproximações sejam feitas ao longo de seu desenvolvimento. Além disso, a solução é expressa em forma analítica, tanto para os fluxos angulares médios quanto para os fluxos angulares transversos na fronteira, e não exige discretização do domínio no tratamento de problemas em meios homogêneos, mesmo para geometrias complexas. Assim, o erro acumulado na obtenção das soluções se deve apenas ao arredondamento nas operações aritméticas efetuadas durante o processo de inversão das matrizes e no cálculo dos pólos e coeficientes numéricos dos fluxos angulares.

Os fatos acima mencionados devem justificar as discrepâncias verificadas entre os resultados numéricos obtidos através dos métodos LTS_N e $SGF-ExpN$, uma vez que no método $SGF-ExpN$ é utilizada uma exponencial com constante de decaimento igual à seção de choque de absorção do meio para aproximar os fluxos angulares no contorno do domínio, enquanto no método LTS_N os fluxos angulares no contorno apresentam uma formulação analítica.

A viabilidade de aplicação da formulação LTS_N a problemas inversos é atestada pela razoável concordância dos resultados numéricos obtidos através do emprego com os dados da literatura,

para baixa ordem de quadratura angular. A aplicação a problemas em coordenadas curvilíneas depende essencialmente da formulação em coordenadas retangulares, uma vez que a solução obtida é transferida através de mapeamento para o domínio original, operação que não envolve erro de arredondamento significativo.

É importante salientar que as soluções apresentadas neste trabalho foram obtidas em equipamento de pequeno porte. Os resultados foram gerados em um microcomputador 386-SX para quadraturas angulares de ordem 2, 4 e 6 em problemas bidimensionais, e de ordem 2 para problemas tridimensionais, atingindo tempos de execução viáveis já na utilização do código fonte, executado via interpretador. A implementação do sistema em equipamentos de maior porte e a elaboração de futuras versões otimizadas e compiladas deverá permitir, no futuro, o emprego de quadraturas angulares de maior ordem para o tratamento de problemas consideravelmente mais complexos, como o planejamento de doses em processos de radioterapia e identificação de camadas rochosas para prospecção de petróleo.

8 REFERÊNCIAS

[1] Barros, R., A Spectral Nodal Method for the Solution of Discrete Ordinates Problems in One and Two Dimensional Cartesian Geometry, Tese, Universidade de Michigan (1990).

[2] Barros, R., Larsen, E., A spectral nodal method for one-group x,y-geometry discrete ordinates problems, Nuclear Science and Engineering, 111 (1992) 34-45.

[3] Barros, R., Larsen, E., A spectral nodal method for the solution of the S_N equations in x,y geometry for highly absorbing deep penetration problems, Proc. VIII Encontro Nacional de Física de Reatores e Termohidráulica, pp 423-427, Atibaia, SP (1991).

[4] Lewis, E., Miller, W., Computational methods of neutron transport, John Wiley & Sons, N. York (1984).

[5] Vilhena, M., Barichello, L., A new analytical approach to solve the neutron transport equation, Kerntechnik 56(5) (1991) 334-336.

[6] Barichello, L., Vilhena, M., A general analytical approach to the one group one dimensional transport equation, Kerntechnik 58(3) (1993) 182-184.

[7] Barichello, L., Vilhena, M., Formulação explícita para a matriz inversa associada ao problema de ordenada discreta, Proc. XIV Congresso Brasileiro de Matemática Aplicada e Computacional, p 71, Nova Friburgo, RJ (1991).

[8] Vilhena, M., Barichello, L., An analytical solution for the multigroup slab geometry discrete ordinates problems, aceito para publicação em Transport theory and statistical physics.

[9] Barichello, L., Vilhena, M., Analytical solution for the inverse problem for radiotherapy planning, XIV Congresso Brasileiro de Matemática Aplicada e Computacional, p 107, Nova Friburgo, RJ (1991).

[10] Duderstadt, J., Martin, R., Transport theory, John Wiley & sons, N. York (1979).

[11] Fernandes, A., Maiorino, J., Solução da equação de transporte monoenergética em geometria tridimensional pelo método dos elementos finitos e pela expansão em harmônicos esféricos, Proc. IX Encontro Nacional de Física de Reatores e Termohidráulica, pp 48-53, Caxambú, MG (1991).

[12] Zabadal, J., Vilhena, M., Barrichello, L., Solução analítica da equação bidimensional de transporte de radiação, Proc. IX Encontro Nacional de Física de Reatores e Termohidráulica, pp 90-92, Caxambú, MG (1993).

[13] Stamm'ler, R., Abbate, M., Methods of steady-state reactor physics in nuclear design, Academic Press, Londres (1983).

[14] Zabadal, J., Vilhena, M., Barichello, L., Solução da equação tridimensional de transporte pelo método LTSN, aceito para publicação no V Congresso Geral de Energia Nuclear, Rio de Janeiro, RJ (1994).

[15] Zabadal, J., Vilhena, M., Barichello, L., Analytical solution of the three dimensional discrete ordinates equation by the LTSN method, aceito para publicação em Annals of nuclear energy, Londres, Inglaterra (1994).

[16] Zabadal, J., Vilhena, M., Barichello, L., Problema bidimensional inverso em teoria de transporte, aceito para publicação no V Congresso Geral de Energia Nuclear, Rio de Janeiro, RJ (1994).

[17] Kober, H., Dictionary of conformal representations, Dover pub., Londres (1959).

9 BIBLIOGRAFIA CONSULTADA

Bevington, P., Data reduction and error analysis for the physical sciences, McGraw-Hill, N. York (1969).

Constantinides, A., Applied numerical methods with personal computers, McGraw-Hill, N. York (1987).

Davenport, J., Siret, Y, Tournier, E., Computer algebra, Academic Press, N. York (1988).

Kolmogorov, A., Fomin, S., Elementos de la teoria de funciones y del analisis funcional, Mir, Moscou (1972).

Novozhilov, Y., Tulub, A., The method of functionals in the quantum theory of fields, Gordon and Breach, N. York (1961).

Glansdorf, P., Prigogine, I., Thermodynamic theory of structure, stability and fluctuations, John Wiley & Sons, Ltd., N. York (1971).

Pupko, S., Spatial kinetics reactor model, FEI-2054 (1989).

Reddy, J., Applied functional analysis and variational methods in engineering, McGraw-Hill, N. York (1986).

Reichl, L., A modern course in statistical Physics, Edward Arnold Ltd, Austin (1980).

Spiegel, M., Theory and problems of complex variables, Schaum Publishing, N. York (1964).

Tikhonov, A., Goncharsky, A., Stepanov, V., Yagola, A., Numerical methods for the solution of ill-posed problems, Nauka, Moscou (1990).

Vinogradov, V., Analysis of relativistic differential-difference equations using Laplace transformation, P4-92-403 (1992).

Zubarev, D., Nonequilibrium statistical thermodynamics, Plenum Publishing Co., N. York (1974).

APÊNDICES

A A EQUAÇÃO DE TRANSPORTE

A equação de transporte é obtida a partir de um balanço de partículas sobre um volume de controle no espaço das fases $(x, y, z, v_x, v_y, v_z, t)$, onde v_x, v_y e v_z são as componentes da velocidade e t é o tempo, considerando os mecanismos através dos quais as partículas envolvidas entram ou deixam o volume de controle estabelecido [10] :

- fontes - fornecem partículas ao volume de controle;
- transferência de partículas através da interface - os limites geométricos do volume de controle $(x \pm dx, y \pm dy, z \pm dz)$ são transpostos por partículas que o penetram ou o abandonam ao longo de suas trajetórias;
- colisões - ao colidir com os núcleos dos átomos do material no qual se propagam, as partículas podem sofrer espalhamento, absorção e reações. No caso de espalhamento, as partículas podem transpor os limites $(v_x \pm dv_x, v_y \pm dv_y, v_z \pm dv_z)$ do volume de controle, através de alterações na direção de propagação e no módulo da velocidade.

Assim, o balanço de partículas no volume de controle pode ser expresso da seguinte forma [10] :

Variação do número de partículas no tempo = fonte + variação devida à transferência através da interface + variação devida às

colisões.

No trabalho proposto, a variável de interesse não é o número de partículas, mas o fluxo angular $\psi = vn$, onde v é o módulo da velocidade e n é a densidade de partículas. Além disso, as coordenadas de interesse no espaço das fases são x, y, z, μ, η, ξ e E , sendo μ, η e ξ os cossenos diretores que definem a direção de propagação da partícula, e E o valor da energia cinética, em substituição ao módulo da velocidade. Uma vez que o trabalho tem como objetivo a obtenção de soluções para a equação de transporte em regime estacionário, a variável t não figura no espaço das fases considerado.

Definidas as novas variáveis do espaço de fase, a equação de transporte é expressa em termos do fluxo angular da seguinte forma [10] :

$$\Omega \cdot \nabla \psi + \sigma_t \psi = \int_0^\infty \int_{4\pi} \sigma_s(E-E', \Omega-\Omega') \psi(x, y, z, E', \Omega') d\Omega' dE' + Q, \quad (A.1)$$

onde o primeiro termo no membro esquerdo representa a migração de partículas e o segundo abrange todos os eventos ocorridos durante as colisões. No membro direito, a integral representa o termo de fonte por espalhamento, e Q constitui uma fonte interior. A variável Ω é o vetor unitário que define a direção de propagação, cujas componentes são os cossenos diretores μ, η e ξ . Os parâmetros σ_t e σ_s são, respectivamente, as seções de choque macroscópicas total e de espalhamento, que representam a

probabilidade de ocorrência dos eventos associados por unidade de distância percorrida. O subscrito 4π no termo de espalhamento, indica que a integração é efetuada sobre todas as direções possíveis, varrendo totalmente uma esfera de raio unitário. Na formulação SN, a variável Ω é discretizada, tornando finito o número de direções de espalhamento. A composição das direções de espalhamento é obtida através de combinações apropriadas entre os N valores discretos dos cossenos diretores μ , η e ξ . No trabalho proposto, esses valores discretos correspondem aos zeros fornecidos por Stamm'ler e Abatte [13], e o critério de seleção das possíveis combinações é baseado nos índices dos cossenos diretores : se $i+j+k = N/2 + 2$, a combinação (μ_i, η_j, ξ_k) corresponde a uma direção discreta possível [14]. Essa condição coincide com a exigência de que o vetor Ω seja unitário, ou seja, $\mu_i^2 + \eta_j^2 + \xi_k^2 = 1$ somente quando $i+j+k = N/2 + 2$. A situação é mostrada na figura A.1 [13], que mostra a esfera unitária e as combinações válidas entre cossenos diretores; quando o critério de seleção é cumprido, a extremidade do vetor Ω atinge a superfície da esfera. O número de combinações que obedecem ao critério de seleção é igual a $M = N(N+2)$, para problemas em três dimensões. Para problemas em duas dimensões, são tomadas as projeções das direções originais sobre o plano x-y, isto é, o cosseno diretor ξ é suprimido. Uma vez que as direções são distribuídas de forma simétrica sobre a superfície esférica, o valor de M se reduz a $N(N+2)/2$ em problemas bidimensionais; cada par de direções

$(\mu, \eta, \xi), (\mu, \eta, -\xi)$ será convertido em uma única direção discreta (μ, η) no plano $x-y$. Para o caso unidimensional, não existem combinações entre cossenos diretores, de modo que os valores de M e de N coincidem.

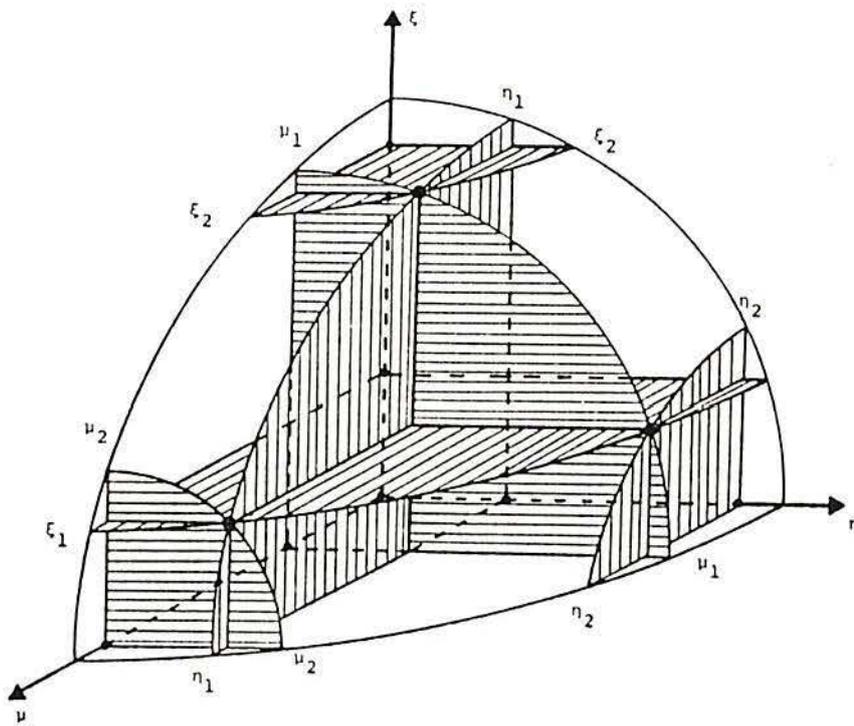


Figura A.1 - Combinações entre cossenos diretores para $N = 4$

Além da aproximação S_N , é utilizado o modelo de multigrupo, no qual a energia também é discretizada, sendo os intervalos resultantes denominados grupos de energia. Discretizando-se as variáveis Ω e E , e escrevendo o operador $\Omega \cdot \nabla \psi$ em coordenadas

cartesianas, obtêm-se as equações de ordenadas discretas utilizadas neste trabalho :

$$\begin{aligned}
 (1-\xi)^{1/2} \left[\mu_m \frac{\partial \psi_m^g(x,y,z)}{\partial x} + \eta_m \frac{\partial \psi_m^g(x,y,z)}{\partial y} \right] + \xi_m \frac{\partial \psi_m^g(x,y,z)}{\partial z} + \\
 \sigma_t^g \psi_m^g(x,y,z) = Q(x,y,z) + \sum_{g'=1}^G \sum_{n=1}^M \sigma_{smn}^{gg'} \omega_n \psi_n^{g'}(x,y,z) \quad . \quad (A.2)
 \end{aligned}$$

B COEFICIENTES MÉTRICOS

Os coeficientes métricos de uma transformação são obtidos a partir da definição de distâncias entre pontos vizinhos em diferentes sistemas de coordenadas. Considere-se os pontos p_1 e p_2 no plano cartesiano, separados pela distância ds , definida pela expressão

$$ds = \left[(dx)^2 + (dy)^2 \right]^{1/2} \quad (\text{B.1})$$

Aplicando uma transformação f para o sistema de coordenadas ortogonais (u,v) , são obtidos os pontos $q_1 = f(p_1)$ e $q_2 = f(p_2)$. Esses pontos não se encontram, em geral, separados pela mesma distância ds , uma vez que

$$ds = \left[\left(\frac{\partial s}{\partial u} du \right)^2 + \left(\frac{\partial s}{\partial v} dv \right)^2 \right]^{1/2} \quad (\text{B.2})$$

Os fatores multiplicativos $\partial s / \partial u$ e $\partial s / \partial v$ são chamados coeficientes métricos da transformação, denominados, respectivamente, h_1 e h_2 . Esses coeficientes podem ser definidos diretamente em termos das coordenadas envolvidas na transformação. Dividindo a equação (B.1) por du , obtém-se

$$h_1 = \frac{\partial s}{\partial u} = \left[\left(\frac{\partial x}{\partial u} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial u} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (\text{B.3})$$

Analogamente, dividindo a equação (B.1) por dv , resulta

$$h_2 = \frac{\partial s}{\partial v} = \left[\left(\frac{\partial x}{\partial v} \right)^2 + \left(\frac{\partial y}{\partial v} \right)^2 \right]^{1/2} \quad (\text{B. 4})$$

Os coeficientes métricos são utilizados na definição de operadores diferenciais em sistemas de coordenadas ortogonais generalizadas. Para o caso específico da equação de transporte, o operador diferencial de interesse é $\Omega \cdot \nabla \psi$, definido para um sistema arbitrário de coordenadas ortogonais como segue :

$$\Omega \cdot \nabla \psi = \frac{1}{h_1} \mu_m \frac{\partial \psi_m^g(u, v)}{\partial u} + \frac{1}{h_2} \eta_m \frac{\partial \psi_m^g(u, v)}{\partial v} \quad (\text{B. 5})$$

que constitui, na equação de transporte, o termo relativo à transferência de radiação através da interface do volume de controle (ver apêndice A).

C ESTIMATIVA DO ERRO ACUMULADO NA INVERSÃO DAS MATRIZES LTS_N

O principal objetivo da inversão das matrizes LTS_N é o de calcular os pólos das funções racionais que definem as transformadas de Laplace dos fluxos angulares. A inversão das matrizes LTS_N introduz alterações nos valores dos pólos, devido ao elevado número de operações aritméticas seqüenciais requeridas; essas alterações constituem a principal causa de erro na determinação dos valores dos fluxos angulares. Neste apêndice é obtida uma estimativa da ordem de grandeza do erro introduzido nas funções racionais contidas nas matrizes LTS_N e sua influência sobre os valores dos respectivos pólos e dos fluxos angulares correspondentes.

C.1 ESTIMATIVA DO ERRO PRODUZIDO NAS OPERAÇÕES ARITMÉTICAS

Considere-se um número de precisão finita, cujo valor aproximado da respectiva incerteza é conhecido. Esse número pode ser expresso em termos de seu valor esperado, através da seguinte equação :

$$a = \langle a \rangle \pm \Delta a \quad (C.1.1)$$

onde $\langle a \rangle$ representa o valor esperado de a , definido como

$$\langle a \rangle = \int_{a-\Delta a}^{a+\Delta a} x P(x) dx \quad , \quad (C.1.2)$$

Δa é a incerteza associada, que delimita o intervalo no qual estão contidos todos os possíveis valores de a , e $P(x)$ é a distribuição de probabilidades para os valores ao longo do intervalo. Essa representação será utilizada para avaliar a propagação de erro nas operações aritméticas envolvidas na inversão das matrizes LTS_N .

C.1.1 Soma de números com precisão finita

A operação $a+b$ pode ser expressa em termos de valores esperados como :

$$a + b = \langle a \rangle \pm \Delta a + \langle b \rangle \pm \Delta b = \langle a \rangle + \langle b \rangle \pm (\Delta a + \Delta b) \quad (C.1.1.1)$$

Assim, a incerteza de $a+b$ é igual à soma das incertezas individuais de a e b . Esse valor não representa o erro associado à operação, uma vez que a incerteza é o maior valor possível para o erro, e portanto os resultados $\langle a \rangle + \langle b \rangle + \Delta a + \Delta b$ e $\langle a \rangle + \langle b \rangle - \Delta a - \Delta b$ constituem combinações bastante improváveis entre os diversos valores possíveis de $a+b$. Uma medida representativa para erro associado à operação é dada pelo valor esperado do desvio em relação a $\langle a \rangle + \langle b \rangle$, definido por

$$\langle \epsilon(a+b) \rangle = [\langle (a+b)^2 \rangle - \langle a+b \rangle^2]^{1/2} \quad , \quad (C.1.1.2)$$

onde as parcelas do membro direito da equação são dadas por

$$\langle (a+b)^2 \rangle = \int_{a-\Delta a}^{a+\Delta a} \int_{b-\Delta b}^{b+\Delta b} [(x+y) P(x+y)]^2 dx dy \quad (C.1.1.3)$$

e

$$\langle a+b \rangle^2 = \left[\int_{a-\Delta a}^{a+\Delta a} \int_{b-\Delta b}^{b+\Delta b} (x+y) P(x+y) dx dy \right]^2 \quad (C.1.1.4)$$

Como os valores de a são independentes dos valores de b , as equações (C.1.1.3) e (C.1.1.4) podem ser reescritas, respectivamente, como

$$\langle (a+b)^2 \rangle = \int_{a-\Delta a}^{a+\Delta a} \int_{b-\Delta b}^{b+\Delta b} [x P_x(x) + y P_y(y)]^2 dx dy \quad (C.1.1.5)$$

e

$$\langle a+b \rangle^2 = \left[\int_{a-\Delta a}^{a+\Delta a} \int_{b-\Delta b}^{b+\Delta b} [x P_x(x) + y P_y(y)] dx dy \right]^2 \quad (C.1.1.6)$$

A forma específica das funções $P_x(x)$ e $P_y(y)$ depende da seqüência de operações envolvidas na obtenção dos valores de a e b . Se a e b

são valores de entrada, isto é, não são o resultado de operações anteriores, todos os possíveis valores individuais de a e de b são considerados igualmente prováveis, e assim as equações (C.1.1.5) e (C.1.1.6) reduzem-se, respectivamente, a

$$\langle (a+b)^2 \rangle = \frac{1}{4\Delta a \Delta b} \int_{a-\Delta a}^{a+\Delta a} \int_{b-\Delta b}^{b+\Delta b} (x+y)^2 dx dy \quad (C.1.1.7)$$

e

$$\langle a+b \rangle^2 = \left[\frac{1}{4\Delta a \Delta b} \int_{a-\Delta a}^{a+\Delta a} \int_{b-\Delta b}^{b+\Delta b} (x+y) dx dy \right]^2, \quad (C.1.1.8)$$

visto que as distribuições $P_x(x)$ e $P_y(y)$ são consideradas uniformes. Calculando as integrais em (C.1.1.7) e (C.1.1.8), e substituindo o resultado em (C.1.1.2), obtém-se uma relação entre as incertezas das parcelas envolvidas na operação de adição e o valor esperado do erro para o resultado obtido :

$$\langle \varepsilon(a+b) \rangle = \left[\frac{(\Delta a)^2 + (\Delta b)^2}{3} \right]^{1/2}. \quad (C.1.1.9)$$

É preciso agora estimar o valor mais provável para o termo $[(\Delta a)^2 + (\Delta b)^2]^{1/2}$, que neste caso corresponde à média, uma vez que as grandezas envolvidas não representam números afetados de incertezas, mas valores determinísticos. Colocando em evidência a maior parcela, e supondo-se que $(\Delta a)^2 \geq (\Delta b)^2$, obtém-se

$$\langle \varepsilon(a+b) \rangle = 3^{-1/2} \Delta a [1 + (\Delta b / \Delta a)^2]^{1/2} = 3^{1/2} \Delta a [1 + x^2]^{1/2} \quad (\text{C.1.1.10})$$

Uma vez que Δa e Δb são valores positivos, x varia entre 0 e 1, e seu valor médio resulta

$$\int_0^1 [1 + x^2]^{1/2} dx \cong 1,148 \quad , \quad (\text{C.1.1.11})$$

obtendo-se, dessa forma, a seguinte expressão para o valor esperado do erro associado à operação :

$$\langle \varepsilon(a+b) \rangle = 1,148 (3^{1/2} \Delta a) \quad (\text{C.1.1.12})$$

Pode-se agora estimar a propagação de erro provocada pela operação, comparando o resultado obtido com o valor esperado do erro de uma das parcelas da soma :

$$\langle \varepsilon(a) \rangle = \left[\frac{1}{2\Delta a} \int_{a-\Delta a}^{a+\Delta a} x^2 dx - \left(\frac{1}{2\Delta a} \int_{a-\Delta a}^{a+\Delta a} x dx \right)^2 \right]^{1/2} = 3^{-1/2} \Delta a \quad (\text{C.1.1.13})$$

Assim, o valor esperado do erro relativo para a soma de dois dados de entrada é cerca de 1,15 vezes maior do que o valor esperado do erro da parcela que possui a maior incerteza individual. A equação

(C.1.1.13) é válida apenas quando a e b são dados de entrada. Observe-se que, embora as distribuições dos valores possíveis para a e b , dadas pelas funções $P_x(x)$ e $P_y(y)$, possam ser consideradas uniformes, o mesmo não ocorre com a distribuição dos possíveis resultados de $a+b$, cujo gráfico é mostrado na figura C.1. Note-se que para produzir o resultado $\langle a \rangle + \langle b \rangle + \Delta a + \Delta b$, é necessário que os valores específicos de a e b sejam respectivamente $\langle a \rangle + \Delta a$ e $\langle b \rangle + \Delta b$. Existe, portanto, apenas uma combinação de valores capaz de produzir esse resultado. Entretanto, existem muitas combinações entre os possíveis valores de a e b que produzem o resultado $\langle a \rangle + \langle b \rangle$. A probabilidade de ocorrência dos resultados intermediários aumenta de forma linear à medida que se aproximam de $\langle a \rangle + \langle b \rangle$ pela direita ou pela esquerda, de modo que a função de distribuição para o resultado $a+b$ apresenta um pico no valor $\langle a \rangle + \langle b \rangle$ e decresce linearmente em direção aos limites do intervalo $\langle a \rangle + \langle b \rangle \pm (\Delta a + \Delta b)$. A cada operação posterior, as distribuições de probabilidades sofrem alterações que provocam mudanças nos valores esperados dos erros resultantes. O acompanhamento rigoroso da evolução dessas distribuições de probabilidade ao longo de uma seqüência de operações aritméticas constitui uma tarefa bastante dispendiosa. Contudo, é possível obter uma estimativa menos acurada, porém praticável, assumindo que as distribuições de probabilidade permanecem uniformes no decorrer da seqüência de cálculo. Essa hipótese deve conduzir a valores superestimados para o erro, uma vez que este constitui uma

medida da dispersão dos possíveis resultados em torno do valor esperado.

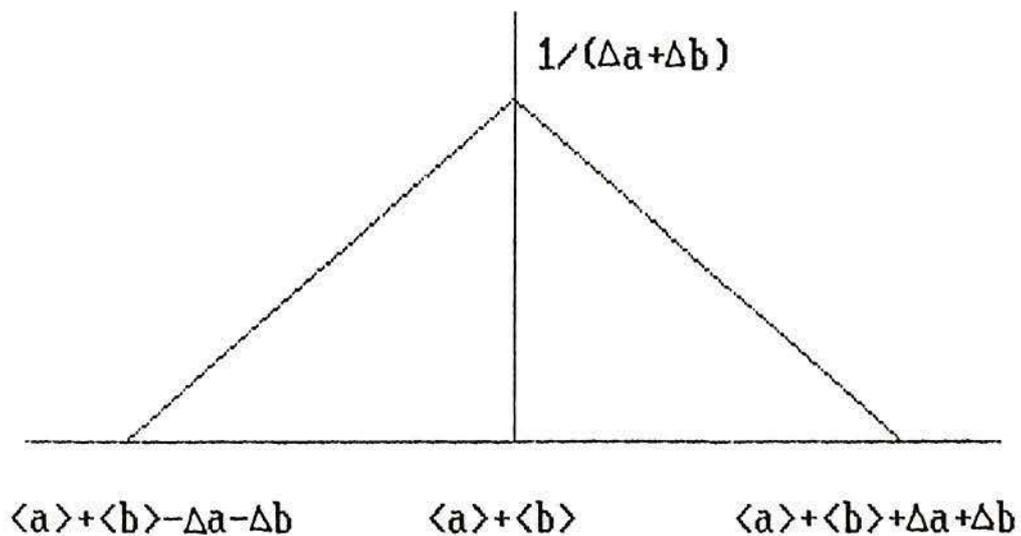


Figura C.1 - distribuição de probabilidades para a operação soma

C.1.2 Produto de números com precisão finita

O produto ab , expresso em termos de valores esperados, é dado por :

$$ab = \langle a \rangle \langle b \rangle \pm \langle a \rangle \Delta b \pm \langle b \rangle \Delta a \pm \Delta a \Delta b \quad (\text{C.1.2.1})$$

O valor esperado do erro associado ao produto entre a e b é definido de forma análoga ao caso da soma :

$$\langle \varepsilon(ab) \rangle = [\langle (ab)^2 \rangle - \langle ab \rangle^2]^{1/2} \quad (C.1.2.2)$$

onde

$$\langle (ab)^2 \rangle = \int_{a-\Delta a}^{a+\Delta a} \int_{b-\Delta b}^{b+\Delta b} [x P_x(x) y P_y(y)]^2 dx dy \quad (C.1.2.3)$$

e

$$\langle ab \rangle^2 = \left[\int_{a-\Delta a}^{a+\Delta a} \int_{b-\Delta b}^{b+\Delta b} [x P_x(x) y P_y(y)] dx dy \right]^2 \quad (C.1.2.4)$$

Novamente, considerando as distribuições de probabilidade uniformes, pode-se reduzir as equações (C.1.2.3) e (C.1.2.4) às seguintes expressões :

$$\langle (ab)^2 \rangle = \frac{1}{4\Delta a \Delta b} \int_{a-\Delta a}^{a+\Delta a} \int_{b-\Delta b}^{b+\Delta b} x^2 y^2 dx dy \quad (C.1.2.5)$$

e

$$\langle ab \rangle^2 = \left[\frac{1}{4\Delta a \Delta b} \int_{a-\Delta a}^{a+\Delta a} \int_{b-\Delta b}^{b+\Delta b} x^2 y^2 dx dy \right]^2 \quad (C.1.2.6)$$

Calculando as integrais em (C.1.2.5) e (C.1.2.6), e substituindo em (C.1.2.2), resulta

$$\langle \varepsilon(ab) \rangle = \frac{\langle a \rangle \Delta b + \langle b \rangle \Delta a}{3^{1/2}} \quad (\text{C.1.2.7})$$

Uma vez que o valor esperado do erro associado à multiplicação depende da magnitude dos valores de a e b, é conveniente utilizar o erro relativo como parâmetro de comparação entre os erros das parcelas e do resultado obtido. O erro relativo, definido como o quociente entre o valor esperado do erro e o valor esperado da variável, é dado por

$$e(a) = \frac{\langle \varepsilon(v) \rangle}{\langle v \rangle} \quad (\text{C.1.2.8})$$

Essa grandeza é uma medida do provável grau de contaminação da mantissa de v, para os casos em que o erro depende da sua ordem de grandeza. Para o valor de entrada (a) e para o produto ab, os erros relativos resultam, respectivamente

$$e(a) = 3^{-1/2} (\Delta a / \langle a \rangle) \quad (\text{C.1.2.9})$$

e

$$e(ab) = \frac{\langle a \rangle \Delta b + \langle b \rangle \Delta a}{3^{1/2} ab} = 3^{-1/2} \left[\frac{\Delta a}{\langle a \rangle} + \frac{\Delta b}{\langle b \rangle} \right] \quad (\text{C.1.2.10})$$

É preciso ainda calcular o valor mais provável para a soma $\Delta a / \langle a \rangle + \Delta b / \langle b \rangle$, dado neste caso pela média, uma vez que as parcelas constituem grandezas determinísticas. Colocando em evidência a

maior parcela em módulo (suponha-se que essa parcela seja $\Delta a/\langle a \rangle$),
obtem-se

$$e(ab) = 3^{-1/2}(\Delta a/\langle a \rangle) \left[1 + \frac{\Delta b/\langle b \rangle}{\Delta a/\langle a \rangle} \right] = 3^{-1/2}(\Delta a/\langle a \rangle)(1+x) \quad , (C.1.2.11)$$

em que o valor de x varia de 0 a 1, quando o numerador e o denominador que o compõem possuem sinais iguais, e varia de -1 a 0 caso contrário. Assim, o valor médio de x é dado por

$$\bar{x} = \int_0^{+1} x \, dx = 1/2 \quad , \quad (C.1.2.12)$$

e o valor mais provável para o erro relativo do produto ab resulta

$$e(ab) \cong 1,5 [3^{1/2}(\Delta a/\langle a \rangle)] = 1,5 e(a) \quad (C.1.2.13)$$

Isto indica que o produto de dois dados de entrada possui um erro relativo cerca de 1,5 vezes maior do que o da parcela que apresenta o maior erro relativo. Supondo-se que as funções de distribuição permaneçam uniformes, pode-se assumir que cada multiplicação efetuada amplifica o erro relativo em um fator de 1,5 .

C.1.3 Divisão de números com precisão finita

O valor esperado do erro associado à divisão entre a e b pode ser obtido a partir do valor esperado do erro associado à ao produto. Escrevendo a/b em termos das incertezas individuais de a e b , obtém-se

$$\frac{\bar{a}}{b} = \frac{\langle a \rangle \pm \Delta a}{\langle b \rangle \pm \Delta b} \quad (C.1.3.1)$$

Multiplicando o numerador e o denominador por $b \pm \Delta b$, resulta

$$\frac{\bar{a}}{b} = \frac{(\langle a \rangle \pm \Delta a)(\langle b \rangle \pm \Delta b)}{\langle b \rangle^2 \pm 2\langle b \rangle \Delta b + (\Delta b)^2} \quad (C.1.3.2)$$

No denominador da equação (C.1.3.2), $\langle b \rangle^2 \gg 2\langle b \rangle \Delta b + (\Delta b)^2$, de modo que o resultado a/b pode ser reescrito de forma simplificada:

$$\frac{\bar{a}}{b} = \frac{(\langle a \rangle \pm \Delta a)(\langle b \rangle \pm \Delta b)}{\langle b \rangle^2} \quad (C.1.3.3)$$

Observe-se que o numerador contém o produto ab expresso em função das incertezas individuais, e que o denominador constitui um valor esperado. Assim, o valor esperado do erro associado à divisão pode ser relacionado ao valor esperado do produto ab :

$$\langle \varepsilon(a/b) \rangle = \frac{\langle \varepsilon(ab) \rangle}{\langle b \rangle^2} = \frac{\langle a \rangle \Delta b + \langle b \rangle \Delta a}{3^{1/2} \langle b \rangle^2} \quad (\text{C.1.3.4})$$

O erro relativo correspondente é dado por

$$e(a/b) = \frac{\langle a \rangle \Delta b + \langle b \rangle \Delta a}{3^{1/2} \langle a \rangle \langle b \rangle}, \quad (\text{C.1.3.5})$$

que é a mesma expressão obtida para o erro relativo associado à multiplicação.

C.2 OPERAÇÕES ENVOLVENDO POLINÔMIOS

Calculados os valores esperados dos erros associados às operações aritméticas, pode-se obter expressões para o erro acumulado nas operações envolvidas na inversão das matrizes LTS_N , que consistem em somas, multiplicações e simplificações de polinômios.

Considere-se os polinômios $p(s)$, cujos coeficientes são a_0, a_1, \dots, a_n , e $q(s)$, com coeficientes b_0, b_1, \dots, b_m , sendo $m \leq n$. A soma $p(s) + q(s)$ é expressa em termos de valores esperados da seguinte forma :

$$p(s) + q(s) = \sum_{k=0}^n [\langle a_k \rangle + \langle b_k \rangle \pm \langle \varepsilon(a_k + b_k) \rangle] s^k \quad (C.2.1)$$

onde o valor esperado para o erro do coeficiente k é dado por

$$\langle \varepsilon(a_k + b_k) \rangle \cong 1,15 \langle \varepsilon(a_k) \rangle \quad , \quad (C.2.2)$$

O produto entre os polinômios $p(s)$ e $q(s)$ também pode ser escrito em termos de valores esperados, obtendo-se

$$p(s) q(s) = \sum_{k=0}^{n+m} \sum_{i=0}^k [\langle a_{k-i} \rangle \langle b_i \rangle \pm \langle \varepsilon(a_{k-i} b_i) \rangle] s^k \quad (C.2.3)$$

em que o valor esperado para o erro de $a_{k-i} b_i$ é dado por

$$\langle \varepsilon(a_{k-i} b_i) \rangle \cong 1,5 \langle \varepsilon(a_{k-i}) \rangle \quad . \quad (C.2.4)$$

Os valores esperados para os erros dos coeficientes c_k do polinômio $p(s)q(s)$ resultam, assim,

$$\langle \varepsilon(c_k) \rangle \cong 1,15^{f(k)} [1,5 \langle \varepsilon(a_{k-i}) \rangle] \quad , \quad (C.2.5)$$

onde $f(k)$ é dada por

$$f(k) = 1 + \bar{n} - |k - \bar{n}| \quad , \quad (C.2.6)$$

sendo $\bar{n} = \text{int}[(n+m)/2]$. O fator $1,15^{f(k)}$ corresponde às $f(k)$ somas efetuadas entre os produtos $a_{k-i} b_i$ para compor o coeficiente c_k . O valor máximo de $f(k)$ ocorre em $k=\bar{n}$, e vale igualmente \bar{n} . Admitindo que todos os coeficientes adquiram o valor máximo para o erro, a equação (C.2.4) torna-se

$$\langle \varepsilon(c_k) \rangle \cong 1,15^{\bar{n}} [1,5 \langle \varepsilon(a_{k-i}) \rangle] \quad . \quad (C.2.7)$$

A simplificação da função racional $p(s)/q(s)$ é um processo efetuado em duas etapas. A primeira consiste no cálculo de um polinômio que representa o MDC aproximado entre $p(s)$ e $q(s)$. Na segunda, ambos os polinômios são deflatados do polinômio MDC, caso este seja encontrado. O MDC entre polinômios é obtido através de um processo similar ao método de Euclides para o cálculo do MDC entre números inteiros, no qual as sucessivas divisões são substituídas por deflações entre polinômios. É preciso, portanto, obter também a expressão de um polinômio deflatado em termos dos valores esperados. A fim de obter essa expressão, é necessário, inicialmente, calcular os coeficientes de um polinômio deflatado. O polinômio resultante da deflação de $p(s)$ por $q(s)$, cujos coeficientes genéricos são, respectivamente, a_i e b_i , sendo $b_n=1$, é dado por

$$d(s) = \sum_{k=0}^{n-m} a_{n-k}^k s^{n-m-k}, \quad (C.2.8)$$

onde os novos coeficientes a_{n-k}^k são obtidos por meio da seguinte relação de recorrência :

$$a_{n-k}^k = a_{n-k}^{k-1} - a_{n-k+1}^{k-1} b_{m-1}, \quad (C.2.9)$$

aplicada recursivamente a partir de $a_n^0 = a_n$. Obtida a forma geral dos coeficientes do polinômio deflatado, escrita em termos de operações aritméticas envolvendo os coeficientes dos polinômios $p(s)$ e $q(s)$, pode-se reescrever os coeficientes calculados em termos de valores esperados. Note-se que uma única aplicação da relação de recorrência (C.2.9) consiste em efetuar o produto entre dois números de precisão finita, e em seguida somar o resultado a outro número de precisão finita. A primeira aplicação da relação de recorrência consiste em calcular $a_{n-1}^1 = a_{n-1} - a_n b_{m-1}$. O valor esperado do erro para o produto $a_n b_{m-1}$ é dado por

$$\langle \varepsilon(a_n b_{m-1}) \rangle \cong 1,5 \langle \varepsilon(a_n) \rangle \quad (C.2.10)$$

A próxima operação consiste em subtrair a_{n-1} do resultado obtido. O valor esperado do erro acumulado nas duas operações vale

$$\langle \varepsilon(a_{n-1} - a_n b_{n-m-1}) \rangle \cong 1,15 \langle \varepsilon(a_n b_{n-m-1}) \rangle \cong 1,72 \langle \varepsilon(a_n) \rangle \quad (C.2.11)$$

Na primeira aplicação da relação (C.2.9), o valor esperado do erro é multiplicado por 1,72. Assumindo que nas aplicações posteriores a propagação de erro ocorra de forma semelhante, obtém-se, para k aplicações sucessivas,

$$\langle \varepsilon(a_{n-k}^k) \rangle \cong 1,72^k \langle \varepsilon(a_n) \rangle \quad (C.2.12)$$

Esse é o valor aproximado do erro para o coeficiente do termo de grau $n-k$ do polinômio deflatado, escrito em função do erro do coeficiente do termo de grau n do polinômio de maior grau.

A relação de recorrência (C.2.9) é aplicável quando o coeficiente de maior grau do polinômio divisor é igual a 1. É necessário, portanto, dividir previamente os polinômios da função racional pelo valor desse coeficiente, antes de proceder à deflação. Assim, o valor esperado do erro relativo do coeficiente a_n sofre um aumento prévio, em geral maior do que aumento previsto para a divisão (ver seção C.1.3). Um valor relativamente representativo para a amplificação do erro nessa operação, obtido através de execuções do programa para problemas bidimensionais utilizando a aproximação LTSz, se encontra em torno de 2. Pode-se então incorporar esse aumento à equação (C.2.12) a fim de

obter o erro total envolvido na deflação de polinômios :

$$\langle \varepsilon(a_{n-k}^k) \rangle \cong 2[1,72^k \langle \varepsilon(a_n) \rangle] \quad (C.2.13)$$

Obtida a estimativa para o erro dos coeficientes de um polinômio deflatado, torna-se possível avaliar o erro acumulado na simplificação de polinômios, que consiste no cálculo do MDC seguido de uma deflação. O cálculo do MDC, a exemplo da deflação, também envolve operações recursivas. Cada aplicação dessa operação é efetuada em três etapas. Na primeira, o polinômio $p(s)$ é deflatado do polinômio $q(s)$, gerando um polinômio deflatado $d(s)$. Em seguida, multiplica-se o termo grau zero do polinômio deflatado pelo polinômio $-q(s)$. O resultado é somado ao polinômio resto, gerando um novo resto $r(s)$. Os valores esperados para os erros dos coeficientes do novo resto podem ser obtidos a partir dos valores dos erros dos coeficientes do polinômio deflatado, dados pela equação (C.2.13). O erro dos coeficientes do novo polinômio resto é dado por

$$\langle \varepsilon(r_{n-k}^k) \rangle \cong 2[1,72^{k+1} \langle \varepsilon(a_n) \rangle] \quad (C.2.14)$$

A equação (C.2.14) fornece o erro associado a uma aplicação da operação recursiva que define o cálculo do MDC. Efetuada a primeira aplicação, o polinômio $p_1(s) = q(s)$ é deflatado de $q_2(s)$

= r(s), repetindo-se o processo até que o novo polinômio resto contenha coeficientes suficientemente próximos de zero para que se possa considerar a divisão exata sem incorrer em erro significativo. Nesta situação, o polinômio $q_l(s)$, obtido após l aplicações da operação, é considerado o MDC entre $p(s)$ e $q(s)$. O erro acumulado nos coeficientes q_l do polinômio $q_l(s)$ é dado então por

$$\langle \varepsilon(q_l^k) \rangle \cong 2^l [1,72^{l(k+1)} \langle \varepsilon(a_n) \rangle] \quad (C.2.15)$$

O valor de l depende do grau n_l do polinômio $q_l(s)$, que por sua vez depende dos graus dos polinômios que compõem a função racional. As seguintes relações empíricas entre l , n_l , n e m foram obtidas a partir de simulações, utilizando as aproximações LTS₂ e LTS₄ bidimensionais :

$$n_l \cong \text{int} (2m)^{1/2} \quad (C.2.16)$$

$$l = \frac{1}{2} (n - n_l) \quad (C.2.17)$$

Ao fim de l aplicações, os polinômios $p(s)$ e $q(s)$ devem ser deflatados de $q_l(s)$, a fim de simplificar a função racional $p(s)/q(s)$. Dessa forma, o erro estimado para os coeficientes dos polinômios $p(s)$ e $q(s)$ após a deflação, tornam-se

$$\langle \varepsilon(a_{n-j}^j) \rangle \cong 2^{l+1} [1, 72^{j+\sum l(k+1)} \langle \varepsilon(a_n) \rangle] \quad (C. 2.18)$$

e

$$\langle \varepsilon(b_{n-j}^j) \rangle \cong 2^{l+1} [1, 72^{j+\sum l(k+1)} \langle \varepsilon(b_n) \rangle] \quad (C. 2.19)$$

onde a e b representam, respectivamente, os coeficientes dos polinômios $p(s)$ e $q(s)$ após a simplificação. O somatório presente nos expoentes é efetuado desde $k=0$ até $k=j$, e vale $lj(j+1)$. Substituindo o valor do somatório nas expressões obtidas, resulta

$$\langle \varepsilon(a_{n-j}^j) \rangle \cong 2^{l+1} [1, 72^{j+l(j+1)} \langle \varepsilon(a_n) \rangle] \quad (C. 2.20)$$

e

$$\langle \varepsilon(b_{n-j}^j) \rangle \cong 2^{l+1} [1, 72^{j+\sum lj(jk+1)} \langle \varepsilon(b_n) \rangle] \quad (C. 2.21)$$

obtem-se expressões que relacionam diretamente os valores dos erros dos polinômios simplificados ao valor do erro dos coeficientes a_n e b_n antes da simplificação.

Calculados os valores esperados para os erros dos coeficientes dos polinômios resultantes das operações de adição, multiplicação e simplificação, pode-se então avaliar o erro acumulado na eliminação de Gauss.

C.3 ERRO ACUMULADO NA ELIMINAÇÃO DE GAUSS

As operações envolvidas na inversão das matrizes LTS_N seguem essencialmente as mesmas etapas de cálculo do processo de eliminação utilizado na inversão de matrizes contendo coeficientes numéricos. A primeira etapa é uma divisão entre funções racionais, que consiste na multiplicação da primeira função pelo inverso da segunda :

$$\frac{p_1}{q_1} \div \frac{p_2}{q_2} = \frac{p_1 q_2}{q_1 p_2} \quad (C.3.1)$$

Essa operação utiliza, portanto, multiplicações entre polinômios. A segunda etapa consiste em um produto de funções racionais, que também utiliza apenas multiplicações entre polinômios. A terceira etapa é uma adição de funções racionais, operação que envolve adições e multiplicações de polinômios :

$$\frac{p_1}{q_1} + \frac{p_2}{q_2} = \frac{p_1q_2 + p_2q_1}{q_1q_2} \quad (C.3.2)$$

A eliminação de Gauss consiste na aplicação dessas três operações em seqüência, gerando uma nova função racional $p_e(s)/q_e(s)$. O denominador $q_e(s)$ é obtido após três multiplicações sucessivas entre polinômios. O erro acumulado nos coeficientes do polinômio de $q_e(s)$ pode ser expresso em função do valor esperado do erro dos coeficientes de $q(s)$ por meio da equação (C.2.7) :

$$\langle \varepsilon(b_{e_i}) \rangle \cong 1,15^{3n} [1,5^3 \langle \varepsilon(b_n) \rangle] \quad , \quad (C.3.3)$$

onde b e b_e representam, respectivamente, os coeficientes dos polinômios $q(s)$ e $q_e(s)$. O numerador $p(s)$ é obtido após três multiplicações sucessivas e uma adição. O erro acumulado em cada coeficientes de $p_e(s)$ pode então ser relacionado aos valores dos erros dos coeficientes de $p(s)$ através da aplicação sucessiva das equações (C.3.3) e (C.2.2) :

$$\langle \varepsilon(a_{e_k}) \rangle \cong 1,15^{3n+1} [1,5^3 \langle \varepsilon(a_n) \rangle] \quad , \quad (C.3.4)$$

onde a e a_e representam os coeficientes dos polinômios $p(s)$ e $p_e(s)$. As funções racionais resultantes são então simplificadas, isto é, os polinômios resultantes $p_e(s)$ e $q_e(s)$ são divididos pelo MDC correspondente, gerando os polinômios $p_s(s)$ e $q_s(s)$. Os valores dos erros acumulados nos coeficientes de $p_s(s)$ e $q_s(s)$

podem ser relacionados aos valores dos erros dos polinômios originais $p(s)$ e $q(s)$. Aplicando-se a equação (C.2.20) sobre o resultado obtido em (C.3.4), resulta

$$\langle \varepsilon(a_{ne-j}^j) \rangle \cong 2^{l+1} (1,72^{j+l(j+1)} 1,15^{\overline{3n+1}} [1,5^3 \langle \varepsilon(a_n) \rangle]) \quad (C.3.5)$$

Analogamente, aplicando-se a equação (C.2.21) sobre (C.3.3), obtém-se

$$\langle \varepsilon(b_{me-j}^j) \rangle \cong 2^{l+1} (1,72^{j+l(j+1)} 1,15^{\overline{3n}} [1,5^3 \langle \varepsilon(b_m) \rangle]) , \quad (C.3.6)$$

onde ne e me são os graus dos polinômios $p_e(s)$ e $q_e(s)$ respectivamente. As equações (C.3.5) e (C.3.6) podem ser simplificadas, reduzindo-se os fatores multiplicativos a uma base comum :

$$\langle \varepsilon(a_{ne-j}^j) \rangle \cong 2^{l+0,78[j+l(j+1)]+0,60\overline{n}+2,95} \langle \varepsilon(a_k) \rangle \quad (C.3.7)$$

e

$$\langle \varepsilon(b_{me-j}^j) \rangle \cong 2^{l+0,78[j+l(j+1)]+0,60\overline{n}+2,75} \langle \varepsilon(b_k) \rangle \quad (C.3.8)$$

As equações (C.3.7) e (C.3.8) fornecem, respectivamente, os erros acumulados nos coeficientes do numerador e do denominador de uma

função racional após uma única eliminação. O número de eliminações efetuadas seqüencialmente no processo de inversão é igual a $2(GM-1)$, sendo GM a ordem da matriz LTS_n , dada pelo produto entre o número de grupos de energia (G) e ordem (M) dos G blocos que compõem a matriz: $GM-1$ eliminações seqüenciais são requeridas para eliminar os termos abaixo da diagonal, e outras $GM-1$ para eliminar os termos localizados acima da diagonal. É importante observar que o número de eliminações efetuadas em seqüência difere do número total de eliminações requeridas, que vale $(GM-1)^2$, e considera também as operações realizadas em paralelo.

A cada eliminação, os valores de l e \bar{n} sofrem alterações, devido ao crescimento dos graus dos polinômios que compõem a função racional. Os valores de m e n podem ser expressos em função do número ν de eliminações seqüenciais já efetuadas. Para as aproximações LTS_2 e LTS_4 , foi verificado que $n \cong \nu^2$, e $m \cong \nu^2 - 1$. Assim, pode-se admitir que $\bar{n} \cong \nu^2$, e que o valor aproximado de l pode ser obtido da expressão

$$l \cong \frac{1}{2} [\nu(\nu - 2^{1/2}) + 1] \quad (C.3.9)$$

Ao fim de $2(GM-1)$ eliminações seqüenciais, os valores dos erros acumulados no numerador e no denominador das funções racionais que constituem os elementos da matriz dependerão da linha na qual se encontram, uma vez que todos os elementos de uma mesma linha sofrem o mesmo número de eliminações durante o

processo. Naturalmente, como restarão apenas elementos da diagonal principal, o índice da linha corresponde à própria posição do elemento sobre a diagonal. A dependência entre a posição e o erro acumulado será dada por

$$\langle \varepsilon(a_{ne-j}^j) \rangle \cong 2 \sum_{\nu=0}^{F(i)} l + 0,78(l_j + l_{j+1}) + 0,60\omega^2 + 2,95 \langle \varepsilon(a_k) \rangle \quad (C. 3.10)$$

para o polinômio numerador, e

$$\langle \varepsilon(b_{ne-j}^j) \rangle \cong 2 \sum_{\nu=0}^{F(i)} l + 0,78(l_j + l_{j+1}) + 0,60\omega^2 + 2,75 \langle \varepsilon(b_k) \rangle \quad (C. 3.11)$$

para o denominador, onde $F(i) = 2(GM-1) - i + 1$, sendo i a posição do elemento na diagonal.

A partir da equação (C. 3.10) pode ser calculada a ordem de grandeza do erro acumulado nos pólos das funções racionais das matrizes LTSN inversas, que correspondem às raízes dos numeradores das funções racionais presentes na diagonal principal das matrizes LTSN após a execução das eliminações.

C. 4 INFLUÊNCIA DO ERRO ACUMULADO SOBRE AS RAÍZES ENCONTRADAS

As alterações introduzidas nos coeficientes dos polinômios durante a eliminação de Gauss afetam o valor final das respectivas raízes. Considere-se novamente o polinômio $p(s)$, escrito como

$$p(s) = \sum_{i=0}^n a_i s^i \quad , \quad (C. 4.1)$$

ou, na forma fatorada, como

$$p(s) = a_n \prod_{i=1}^n (s-s_i) \quad . \quad (C. 4.2)$$

A variação do valor da raiz calculada s_k , provocada por perturbações introduzidas nos coeficientes do polinômio, pode ser estimada a partir da sua diferencial :

$$ds_k = \sum_{i=1}^n \left[\frac{\partial s_k}{\partial a_i} \right]_{s_k} da_i \quad , \quad (C. 4.3)$$

onde da_i é a perturbação introduzida no coeficiente a_i . Uma vez que não se dispõe de uma relação explícita entre s_k e a_i , a derivada presente na equação (C.4.3) deve ser avaliada por meio da regra da cadeia :

$$\frac{\partial s_k}{\partial a_i} = \frac{ds_k}{dp} \frac{\partial p}{\partial a_i} \quad (C. 4. 4)$$

O termo $\partial p / \partial a_i$ é obtido pela derivação da equação (C. 4.1) :

$$\frac{\partial p}{\partial a_i} = s^i \quad (C. 4. 5)$$

o termo ds_k / dp é calculado empregando a forma fatorada de $p(s)$, dada pela equação (C. 4.2) :

$$\frac{ds_k}{dp} = \left(\frac{dp}{ds_k} \right)^{-1} = \left[(-1)^{n-1} \prod_{j=k}^n (s - s_j) \right]^{-1} \quad (C. 4. 6)$$

Substituindo as equações (C. 4.6) e (C. 4.5) na equação (C. 4.4), obtém-se

$$ds_k = \sum^n \left[(-1)^{n-1} \prod_{j=k}^n (s_k - s_j) \right]^{-1} s_k^i da_i \quad (C. 4. 7)$$

Cada parcela do somatório que define a diferencial ds_k pode fornecer uma contribuição positiva ou negativa para o valor de ds_k , conforme o sinal de cada perturbação da_i . A fim de obter uma estimativa para o valor mais provável da diferencial, pode-se tomar o módulo de ds_k , dado por

$$|ds_k| = \left\{ \sum \left[\prod_{j=k}^n (s_k - s_j) \right]^{-2} s_k^{z_i} (da_i)^2 \right\}^{1/2} \quad (C.4.8)$$

A ordem de grandeza do produtório presente em (C.4.8) pode ser obtida com razoável aproximação a partir dos valores das raízes para meios puramente absorventes ($\sigma_s = 0$), dadas por $s_k \cong -\sigma_t / \mu_k$. Substituindo-se a expressão de s_k no produtório, obtém-se

$$\prod_{j=k}^n (s_k - s_j) \cong \sigma_t^{n-1} \frac{\prod_{j=k}^n \mu_k^{-\mu_j}}{\mu_k^{n-1} \prod_{j=k}^n \mu_j} \quad (C.4.9)$$

As perturbações da_i correspondem aos valores esperados para os erros dos coeficientes, calculados através da equação (C.3.10). Assim, substituindo (C.3.10) e (C.4.9) em (C.4.8), resulta uma expressão que fornece valores aproximados para o erro acumulado nos pólos. A ordem de grandeza do erro acumulado nos fluxos angulares pode ser obtida após cada simulação realizada, de posse dos coeficientes numéricos das exponenciais resultantes:

$$|d\psi_m| = \left[\sum_{k=0}^{GM} \left(C_k e^{s_k x} \right)^2 \right]^{1/2}, \quad (C.4.10)$$

onde C_k são os coeficientes numéricos obtidos após a aplicação das condições de contorno do problema, e x representa uma variável

espacial.

Embora os valores estimados dos erros calculados através das expressões obtidas devam ser maiores do que os valores reais, é possível que as suas ordens de grandeza apresentem concordância satisfatória, e seja possível prever, prever, para uso futuro em sistemas de maior porte, o número de dígitos requeridos para os dados de entrada, e a necessidade de implementação de rotinas de aritmética estendida.