

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

**Soluções Explícitas do Problema Adjunto de
Transporte de Partículas com Aplicações em
Estimativas de Fontes**

por

Cássio Baissvenger Pazinato

Tese submetida como requisito parcial
para a obtenção do título de
Doutor em Matemática Aplicada

Profa. Dra. Liliane Basso Barichello
Orientadora

Porto Alegre, dezembro de 2019.

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Pazinatto, Cássio Baissvenger

Soluções Explícitas do Problema Adjunto de Transporte de Partículas com Aplicações em Estimativas de Fontes / Cássio Baissvenger Pazinatto.—Porto Alegre: PPGMAP da UFRGS, 2019.

192 p.: il.

Tese (Doutorado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2019.

Orientadora: Barichello, Liliane Basso

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

Soluções Explícitas do Problema Adjunto de Transporte de Partículas com Aplicações em Estimativas de Fontes

por

Cássio Baissvenger Pazinato

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

Doutor em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Teoria de Transporte de Partículas

Orientadora: Profa. Dra. Liliane Basso Barichello

Banca examinadora:

Prof. Dr. Antonio Carlos Gardel Leitão
PPGMTM-UFSC

Profa. Dra. Camila Becker Picoloto
UFSM

Prof. Dr. Esequia Sauter
PPGMAp-UFRGS

Prof. Dr. Helcio Rangel Barreto Orlande
COPPE-UFRJ

Tese defendida e aprovada em
dezembro de 2019.

Prof. Dr. Esequia Sauter
Coordenador

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

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

AGRADECIMENTOS

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

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

Agradeço aos colegas do IFSul pelo apoio na reta final deste trabalho.

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

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

Agradeço ao PPGMap e à UFRGS, pelos colegas e amigos de jornada e pela infraestrutura oferecida. À Capes, pela concessão de bolsa.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	ix
LISTA DE TABELAS	xiii
LISTA DE SIGLAS E SÍMBOLOS	xv
RESUMO	xviii
ABSTRACT	1
1 INTRODUÇÃO	2
2 A EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE PARTÍCULAS	17
2.1 Derivação da Equação de Transporte de Nêutrons	17
2.2 Aproximação Multigrupos de Energia	23
2.3 Equação de Transporte em Geometria Cartesiana	27
2.3.1 A Equação de Transporte em Geometria Cartesiana Bidimensional	28
2.3.2 A Equação de Transporte em Geometria Cartesiana Unidimensional	29
3 O OPERADOR ADJUNTO DE TRANSPORTE	31
3.1 A Adjunta da Equação de Transporte em Geometria Cartesiana Bidimensional	31
3.2 A Adjunta da Equação de Transporte em Geometria Cartesiana Unidimensional	38
4 MÉTODO ADO-NODAL PARA A ADJUNTA DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE	44
4.1 Equações para os Fluxos Médios Locais	46
4.1.1 Equações para os Fluxos Médios na Variável y	46
4.1.2 Equações para os Fluxos Médios na Variável x	49
4.2 Soluções Homogêneas para as Equações dos Fluxos Médios Locais	51

4.2.1	Solução Homogênea para as Equações dos Fluxos Médios Locais em y	51
4.2.2	Solução Homogênea para as Equações dos Fluxos Médios Locais em x	55
4.3	Soluções ADO-Nodal para as Equações dos Fluxos Médios Locais	57
5	MÉTODO ADO PARA A APROXIMAÇÃO MULTIGRUPOS DE ENERGIA DA ADJUNTA DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE	72
5.1	Soluções Homogêneas para a Aproximação em Ordenadas Discretas da Adjunta da Equação de Transporte	74
5.2	Soluções Gerais para a Aproximação em Ordenadas Discretas da Adjunta da Equação de Transporte	79
6	O PROBLEMA FONTE-DETECTOR	82
6.1	Expressões Analíticas para a Taxa de Absorção em Geometria Cartesiana Bidimensional	85
6.2	Expressões Analíticas para a Taxa de Absorção em Geometria Cartesiana Unidimensional	89
6.3	O Problema Fonte-Detector em Geometria Cartesiana Bidimensional	93
6.3.1	Problema Teste I	94
6.3.2	Problema Teste II	98
6.3.3	Problema Teste III	102
6.4	O Problema Fonte-Detector em Geometria Cartesiana Unidimensional	107
6.4.1	Problema Teste IV	108
6.4.2	Problema Teste V	111
7	O PROBLEMA DA ESTIMATIVA DE FONTES DE PARTÍCULAS	115
7.1	Cálculo das Taxa de Absorção de Partículas	115
7.2	Estimativa de Fontes de Partículas	121

7.3	Técnicas de Regularização	123
7.4	Resultados Numéricos para a Estimativa de Fontes via Método de Tikhonov Iterado em Geometria Cartesiana Unidimensional	127
7.4.1	Problema Teste I	127
7.4.2	Problema Teste II	133
7.4.3	Problema Teste III	137
7.5	Resultados Numéricos para a Estimativa de Fontes via Método de Tikhonov Iterado em Geometria Cartesiana Bidimensional	144
7.5.1	Problema Teste IV	144
7.5.2	Problema Teste V	150
7.6	Técnicas de Inferência Bayesiana	154
7.7	Resultados Numéricos para a Estimativa de Fontes via Método de Metropolis-Hastings em Geometria Cartesiana Unidimensional	161
7.7.1	Problema Teste VI	161
7.7.2	Problema Teste VII	164
7.7.3	Problema Teste VIII	167
7.8	Resultados Numéricos para a Estimativa de Fontes via Método de Metropolis-Hastings em Geometria Cartesiana Bidimensional	170
7.8.1	Problema Teste IX	170
8	CONCLUSÕES	175
	Referências Bibliográficas	179

LISTA DE FIGURAS

2.1	Sistemas de coordenadas para a posição \mathbf{r} e direção $\boldsymbol{\Omega}$	18
2.2	Elemento de integração.	19
2.3	Diagrama da aproximação multigrupos de energia.	24
4.1	Exemplo de configuração de uma malha com $n_x = 2$ e $n_y = 3$	45
4.2	Ordenamento da regra de quadratura para os fluxos médios na variável y	47
4.3	Ordenamento da regra de quadratura para os fluxos médios na variável x	50
5.1	Exemplo de configuração de uma malha com n_z regiões.	73
6.1	Detector no interior do domínio, caso em geometria cartesiana unidimensional.	83
6.2	Detector no interior do domínio, caso em geometria cartesiana bidimensional.	83
6.3	Problema Teste I: configuração do problema fonte-detector.	95
6.4	Problema Teste I: erros relativos percentuais entre R e R^\dagger , considerando malhas 2×2 e 10×10 para diversos valores de σ_s	98
6.5	Problema Teste II: configuração do problema fonte-detector.	99
6.6	Problema Teste II: erros relativos percentuais entre R e R^\dagger , considerando malhas 5×5 e 10×10 para diversos valores de σ_s	102
6.7	Problema Teste III: configuração do problema fonte-detector.	104
6.8	Problema Teste III: erros relativos percentuais entre R e R^\dagger , considerando malhas 3×3 e 6×6 para diversos valores de σ_s	106
6.9	Problema Teste IV: configuração do problema fonte-detector.	108
7.1	Problema Teste I com matriz de Tikhonov \mathbf{L}_0 : gráficos das componentes exatas de \mathbf{S} (linhas sólidas em vermelho), das componentes médias das aproximações de $\tilde{\mathbf{S}}$ (asteriscos) e respectivos intervalos de 95% de confiança (linhas verticais).	129

7.2	Problema Teste I com matriz de Tikhonov \mathbf{L}_0 : histograma dos erros absolutos.	130
7.3	Problema Teste I com matriz de Tikhonov \mathbf{L}_1 : histograma dos erros absolutos.	131
7.4	Problema Teste I com matriz de Tikhonov \mathbf{L}_1 : gráficos das componentes exatas de \mathbf{S} (linhas sólidas em vermelho), das componentes médias das aproximações de $\tilde{\mathbf{S}}$ (asteriscos) e respectivos intervalos de 95% de confiança (linhas verticais).	132
7.5	Problema Teste II com matriz de covariância \mathbf{W}_1 : gráficos das componentes exatas de \mathbf{S} (linhas sólidas em vermelho), das componentes médias das aproximações de $\tilde{\mathbf{S}}$ (asteriscos) e respectivos intervalos de 95% de confiança (linhas verticais).	135
7.6	Problema Teste II com matriz de covariância \mathbf{W}_1 : histograma dos erros absolutos.	136
7.7	Problema Teste II com matriz de covariância \mathbf{W}_2 : gráficos das componentes exatas de \mathbf{S} (linhas sólidas em vermelho), das componentes médias das aproximações de $\tilde{\mathbf{S}}$ (asteriscos) e respectivos intervalos de 95% de confiança (linhas verticais).	137
7.8	Problema Teste II com matriz de covariância \mathbf{W}_2 : histograma dos erros absolutos.	138
7.9	Problema Teste III com matriz de covariância \mathbf{W}_1 : gráficos das componentes exatas de \mathbf{S} (linhas sólidas em vermelho), das componentes médias das aproximações de $\tilde{\mathbf{S}}$ (asteriscos) e respectivos intervalos de 95% de confiança (linhas verticais).	141
7.10	Problema Teste III com matriz de covariância \mathbf{W}_1 : histograma dos erros absolutos.	142
7.11	Problema Teste III com matriz de covariância \mathbf{W}_2 : Gráficos das componentes exatas de \mathbf{S} (linhas sólidas em vermelho), das componentes médias das aproximações de $\tilde{\mathbf{S}}$ (asteriscos) e respectivos intervalos de 95% de confiança (linhas verticais).	143
7.12	Problema Teste III com matriz de covariância \mathbf{W}_2 : histograma dos erros absolutos.	144
7.13	Problema Teste IV: configuração do meio.	145
7.14	Problema Teste IV: fonte exata.	146

7.15	Problema Teste IV com matriz de covariância \mathbf{W}_1 : gráfico da fonte exata de \mathbf{S} (pontos sólidos em azul), das médias das aproximações de $\tilde{\mathbf{S}}$ (pontos vazados em vermelho) e respectivos intervalos de 95% de confiança (linhas verticais).	148
7.16	Problema Teste IV com matriz de covariância \mathbf{W}_1 : histograma dos erros absolutos.	148
7.17	Problema Teste IV com matriz de covariância \mathbf{W}_2 : gráfico da fonte exata de \mathbf{S} (pontos sólidos em azul), das médias das aproximações de $\tilde{\mathbf{S}}$ (pontos vazados em vermelho) e respectivos intervalos de 95% de confiança (linhas verticais).	149
7.18	Problema Teste IV com matriz de covariância \mathbf{W}_2 : histograma dos erros absolutos.	150
7.19	Problema Teste V: configuração do meio.	151
7.20	Problema Teste V: fonte exata.	152
7.21	Problema Teste V: gráfico da fonte exata de \mathbf{S} (pontos sólidos em azul), das médias das aproximações de $\tilde{\mathbf{S}}$ (pontos vazados em vermelho) e respectivos intervalos de 95% de confiança (linhas verticais).	153
7.22	Problema Teste V: histograma dos erros absolutos.	153
7.23	Problema Teste VI: gráficos das componentes exatas de \mathbf{S} (linhas sólidas em vermelho), das componentes médias das aproximações de $\tilde{\mathbf{S}}$ (asteriscos) e respectivos intervalos de 95% de credibilidade (linhas verticais).	163
7.24	Problema Teste VI: cadeias de Markov dos erros absolutos para cada um dos grupos de energia.	163
7.25	Problema Teste VII: gráficos das componentes exatas de \mathbf{S} (linhas sólidas em vermelho), das componentes médias das aproximações de $\tilde{\mathbf{S}}$ (asteriscos) e respectivos intervalos de 95% de credibilidade (linhas verticais).	165
7.26	Problema Teste VII: cadeias de Markov dos erros absolutos para cada um dos grupos de energia.	166
7.27	Problema Teste VIII: gráficos das componentes exatas de \mathbf{S} (linhas sólidas em vermelho), das componentes médias das aproximações de $\tilde{\mathbf{S}}$ (asteriscos) e respectivos intervalos de 95% de credibilidade (linhas verticais).	169

7.28	Problema Teste VIII: cadeias de Markov dos erros absolutos para cada um dos grupos de energia.	169
7.29	Problema Teste IX: gráfico da fonte exata de \mathcal{S} (pontos sólidos em azul), das médias das aproximações de $\tilde{\mathcal{S}}$ (pontos vazados em vermelho) e respectivos intervalos de 95% de credibilidade (linhas verticais).	171
7.30	Problema Teste IX: cadeia de Markov dos erros absolutos.	172

LISTA DE TABELAS

6.1	Problema Teste I: taxas de absorção ($cm^{-1}s^{-1}$) do problema fonte-detector, malha 2×2	96
6.2	Problema Teste I: taxas de absorção ($cm^{-1}s^{-1}$) do problema fonte-detector, malha 10×10	97
6.3	Problema Teste I: taxas de absorção ($cm^{-1}s^{-1}$) do problema fonte-detector, obtidas a partir do método DD (R_{DD}) e do método ADO-Nodal para a adjunta em malha 2×2 ($R_{2 \times 2}$) e em malha 10×10 ($R_{10 \times 10}$).	97
6.4	Problema Teste II: taxas de absorção ($cm^{-1}s^{-1}$) do problema fonte-detector, malha 5×5	100
6.5	Problema Teste II: taxas de absorção ($cm^{-1}s^{-1}$) do problema fonte-detector, malha 10×10	101
6.6	Problema Teste II: taxas de absorção ($cm^{-1}s^{-1}$) do problema fonte-detector, obtidas a partir do método DD (R_{DD}) e do método ADO-Nodal para a adjunta em malha 5×5 ($R_{5 \times 5}$) e em malha 10×10 ($R_{10 \times 10}$).	101
6.7	Problema Teste III: taxas de absorção ($cm^{-1}s^{-1}$) do problema fonte-detector, malha 3×3	104
6.8	Problema Teste III: taxas de absorção ($cm^{-1}s^{-1}$) do problema fonte-detector, malha 6×6	105
6.9	Problema Teste III: taxas de absorção ($cm^{-1}s^{-1}$) do problema fonte-detector, obtidas a partir do método DD (R_{DD}) e do método ADO-Nodal para a adjunta em malha 3×3 ($R_{3 \times 3}$) e em malha 6×6 ($R_{6 \times 6}$).	105
6.10	Problema Teste IV: taxas de absorção ($cm^{-1}s^{-1}$) do problema fonte-detector, obtidas a partir do método DD (R_{DD}), a partir do método ADO para a equação do transporte (R) e a partir do método ADO para a adjunta da equação do transporte (R^\dagger). . .	110
6.11	Problema Teste V: taxas de absorção ($cm^{-1}s^{-1}$) do problema fonte-detector, obtidas a partir do método DD (R_{DD}), a partir do método ADO para a equação do transporte (R) e a partir do método ADO para a adjunta da equação do transporte (R^\dagger). . .	113

7.1	Problema Teste I com matriz de Tikhonov \mathbf{L}_0 : erros absolutos – mínimo, média, máximo e desvio padrão.	129
7.2	Problema Teste I com matriz de Tikhonov \mathbf{L}_1 : erros absolutos – mínimo, média, máximo e desvio padrão.	131
7.3	Problema Teste II com matriz de covariância \mathbf{W}_1 : erros absolutos – mínimo, média, máximo e desvio padrão.	134
7.4	Problema Teste II com matriz de covariância \mathbf{W}_2 : erros absolutos – mínimo, média, máximo e desvio padrão.	136
7.5	Problema Teste III com matriz de covariância \mathbf{W}_1 : erros absolutos: mínimo, média, máximo e desvio padrão.	140
7.6	Problema Teste III com matriz de covariância \mathbf{W}_2 : erros absolutos – mínimo, média, máximo e desvio padrão.	143
7.7	Problema Teste IV com matriz de covariância \mathbf{W}_1 : erros absolutos – mínimo, média, máximo e desvio padrão.	147
7.8	Problema Teste IV com matriz de covariância \mathbf{W}_2 : erros absolutos – mínimo, média, máximo e desvio padrão.	150
7.9	Problema Teste V: erros absolutos – mínimo, média, máximo e desvio padrão.	152
7.10	Problema Teste VI: erros absolutos – mínimo, média, máximo e desvio padrão.	162
7.11	Problema Teste VII: erros absolutos – mínimo, média, máximo e desvio padrão.	165
7.12	Problema Teste VIII: erros absolutos – mínimo, média, máximo e desvio padrão.	168

LISTA DE SIGLAS E SÍMBOLOS

Lista de Siglas

ADO	Analytical Discrete Ordinates
DD	Diamond Difference
LTS_N	Laplace Transform S_N
SGF	Spectral Green's Function
S_N	Método das ordenadas discretas
P_N	Método dos harmônicos esféricos

Lista de Símbolos

Ω	direção de migração das partículas
η, ξ, μ	componentes de Ω
ϕ	ângulo azimutal
θ	ângulo polar
E	energia cinética
σ	seção de choque macroscópica total
σ	matriz diagonal das seções de choque macroscópicas total de cada grupo de energia
σ_s	seção de choque macroscópica de espalhamento
σ_s	matriz de transferência entre grupos de energia

S	fonte interna de partículas
\mathbb{S}	casca esférica unitária do \mathbb{R}^3
\mathbb{S}'	interior da bola unitária do \mathbb{R}^2
ψ	fluxo angular de partículas
ψ^\dagger	fluxo angular adjunto de partículas
$\boldsymbol{\psi}$	vetor dos fluxos angulares de cada grupo de energia
$\boldsymbol{\psi}^\dagger$	vetor dos fluxos angulares adjuntos de cada grupo de energia
ψ_b	restrição de ψ ao contorno do problema
ρ	coeficiente de reflexão especular
S	fonte interna de partículas
\boldsymbol{S}	vetor das fontes internas de partículas de cada grupo de energia
G	número de grupos de energia
L	grau de anisotropia do espalhamento
\mathcal{L}	operador de transporte
$\boldsymbol{\mathcal{L}}$	operador de transporte no contexto dependente da energia
\mathcal{L}^\dagger	operador adjunto de transporte
$\boldsymbol{\mathcal{L}}^\dagger$	operador adjunto de transporte no contexto dependente da energia
P_l	polinômio de Legendre de grau l
σ_d	seção de choque macroscópica de absorção
$\boldsymbol{\sigma}_d$	vetor das seções de choque macroscópicas de absorção no contexto dependente da energia

R	taxa de absorção de partículas
$P[\psi, \psi^\dagger]$	contribuição da fronteira à taxa de absorção de partículas
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	produto interno
X, Y, Z	espessuras da placa nas direções x , y e z
M	número de direções discretas
N	ordem da regra de quadratura
n_x	número de nós na direção x
n_y	número de nós na direção y
n_z	número de nós na direção z
n_d	número de leituras
n_b	dimensão da base para o problema de estimativa de fontes
\mathbf{r}	modelo para as leituras dos detectores em função dos coeficientes da base escolhida para o problema de estimativa de fontes

RESUMO

Neste trabalho, são derivadas soluções explícitas com respeito à variável espacial para o modelo de multigrupos de energia da adjunta da equação de transporte de partículas neutras, em geometria cartesiana unidimensional através de uma metodologia analítica de ordenadas discretas (método ADO). Em geometria cartesiana bidimensional, são fornecidas soluções explícitas com respeito às variáveis espaciais para os fluxos médios da adjunta da equação de transporte monoenergética, por meio do emprego de esquemas nodais junto da formulação ADO. Além disso, em ambas as geometrias, são derivadas expressões explícitas para as taxas de absorção de partículas em detectores internos ao domínio do problema. A avaliação das taxas de absorção permite testar as formulações obtidas através do conhecido problema fonte-detector, o qual possibilita uma análise comparativa entre os resultados obtidos por meio tanto da adjunta da equação de transporte, quanto pela equação de transporte. Nos testes numéricos, a configuração fonte-detector apresentou resultados com excelente concordância ao utilizar as expressões explícitas para as taxas de absorção. Ainda, a formulação é aplicada em um problema inverso de estimativa de fontes isotrópicas de partículas, em situações nas quais a geometria do meio, bem como as propriedades físicas dos materiais que o compõe são conhecidas, e uma série de leituras de detectores é disponível. Para a resolução do problema inverso, são consideradas a regularização de Tikhonov, bem como a aplicação de técnicas Bayesianas. São estimadas fontes polinomiais e degraus a partir de medições de detectores internos ao domínio do problema. De maneira geral, as estimativas das fontes foram capazes de indicar a localização das fontes internas e, dependendo do nível de ruídos considerado nas medições, estimar a magnitude das fontes. Além disso, nos problemas unidimensionais com fontes polinomiais e bidimensionais, os resultados obtidos via método de Tikhonov iterado foram considerados mais satisfatórios, enquanto nos problemas unidimensionais com fontes degraus o uso de técnicas Bayesianas tenham se mostrado superiores.

ABSTRACT

In this work, the analytical discrete ordinates (ADO) method is applied to derive explicit solutions, with respect to spatial variables, for the discrete ordinates approximation of the multigroup adjoint transport equation in one-dimensional cartesian geometry, and, along with nodal schemes, to derive explicit solutions for the averaged angular fluxes for the discrete ordinate approximation of the monoenergetic adjoint transport equation in two-dimensional cartesian geometry. In addition, explicit expressions for internal detectors absorption rates are derived, which are used to test the method through the well-known source-detector problem, which allows a comparative analysis for absorption rates estimated either by the adjoint of the transport equation or the transport equation itself. In numerical tests, the source-detector problem showed excellent agreement when comparing the absorption rates calculated using the adjoint equation with the values obtained by the transport equation. Moreover, the formulation is applied to an isotropic source estimation inverse problem, in situations where the geometry of the medium as well as the physical properties of the materials are known. For this, using the source-detector problem, a linear relationship between the coefficients of the source's expansion on some basis function and the detector readings is derived. Finally, in order to solve the inverse problem, the iterated Tikhonov regularization and the Metropolis-Hastings algorithm in the context of Bayesian inference are considered. To test the formulation, polynomial sources and step sources are estimated from noisy measurements of internal detectors. In general, the estimates were able to indicate the location of internal sources and, depending on the noise level considered in the measurements, to approximate the magnitude of the sources. In addition, in one-dimensional problems with polynomial sources and two-dimensional problems with step sources, the results obtained through the iterated Tikhonov method were considered more satisfactory, while in the one-dimensional problems with step sources, the use of Bayesian techniques has been shown to be superior.

1 INTRODUÇÃO

Ao final do século 19, o físico e filósofo austríaco Ludwig Boltzmann propôs, como consequência de seus estudos sobre a cinética dos gases rarefeitos, uma equação, posteriormente nomeada em sua homenagem [33]. O modelo proposto por Boltzmann assume que as moléculas de um gás ideal são partículas que obedecem às leis da mecânica clássica e visa fornecer uma descrição probabilística destas migrando em uma determinada região do domínio onde o problema está definido, com uma certa velocidade, em um dado instante de tempo [39, 80, 90]. Em adição à sua versão não linear, em problemas nos quais é possível assumir que a interação entre partículas é inexistente ou desprezível, pode ser considerada uma variante linear da equação de Boltzmann, também conhecida como a equação de transporte, que, embora ainda complexa, possui um tratamento mais simples que a equação não linear [39].

Os estudos relacionados à Equação de Boltzmann não permaneceram restritos aos problemas da cinética de gases rarefeitos, fornecendo, também, modelos matemáticos importantes à modelagem do transporte de elétrons, presentes na teoria de semicondutores [113]; à transferência radiativa, com aplicações em problemas de radiação atmosférica [41] e de radiação térmica [89]; e ao transporte de partículas neutras em geral, como o de fótons [3] e o de nêutrons [105]. Neste trabalho, a ênfase está no transporte de nêutrons, em decorrência de suas potenciais aplicações em ensaios não destrutivos na identificação de materiais, na segurança nuclear com a estimativa de fontes radioativas [69, 85, 120] e na teoria de reatores nucleares [30, 49, 105].

Foi ao lado de Niels Bohr, em 1921, que Ernest Rutherford, o pai da física nuclear, teorizou sobre a existência do nêutron [27, 108]. O nêutron é uma partícula subatômica de massa semelhante a do próton e eletricamente neutra, tendo

sido observado pela primeira vez apenas em 1932 por James Chadwick, fato que o agraciou com o prêmio Nobel da física [27].

O fato do nêutron possuir carga resultante nula faz com que as suas interações com os demais núcleos e/ou partículas nucleares em um meio se deem majoritariamente através de colisões. As colisões são caracterizadas pelo choque entre nêutrons e núcleos, geralmente seguidas pela absorção ou pela emissão de energia e outras partículas nucleares [49]. Nessas reações, uma dada partícula é geralmente considerada como um projétil que atinge outra partícula-alvo. Dentre as colisões de interesse entre nêutrons e núcleos estão a fissão nuclear, a absorção e o espalhamento [30, 49].

A fissão nuclear é um processo no qual um núcleo pesado é dividido em dois núcleos menores. Na ocorrência da fissão nuclear existe a liberação de energia, nêutrons e outros subprodutos [30, 49, 105]. A absorção, por sua vez, é uma reação na qual um nêutron incidente é absorvido pelo núcleo-alvo, deixa o núcleo em um estado excitado. O núcleo excitado eventualmente decai para o seu estado inicial, frequentemente emitindo raios γ [49, 81]. Por fim, a reação de espalhamento pode ser de dois tipos: elástica e inelástica. No primeiro caso, o nêutron atinge o núcleo e é desviado sem alterar o estado do núcleo, e, no segundo caso, inelástica, deixa o núcleo em um estado excitado, havendo posterior emissão de raios γ e decaimento [49, 81].

O interesse prático no transporte de partículas neutras não é novo, e remete ao início do século XX [27, 108]. Entre as aplicações científicas e tecnológicas de maior impacto constam a análise e a modelagem de reatores nucleares [30, 50, 81, 82, 105], a detecção de materiais nucleares [85, 88, 117, 119, 120], e a identificação não destrutiva de materiais, como nas análises tomográficas [1, 3, 4, 5, 48, 55, 61, 67, 72, 75, 76, 77] e na perfilagem de poços de petróleo [9, 12].

Neste trabalho é estudada a equação de transporte de nêutrons em sua forma íntegro-diferencial [30, 49, 82], a qual, em sua modelagem, considera as probabilidades de ocorrência das reações de fissão nuclear, absorção ou espalhamento para a obtenção de um modelo com sete variáveis independentes – três variáveis espaciais; duas angulares, as quais determinam a direção na qual as partículas estão migrando; a energia cinética; e, por fim, o instante de tempo no qual o fenômeno está sendo analisado. Alternativamente, existe na literatura a forma integral da equação de transporte, contudo fora do escopo deste trabalho [30].

Na década de 60, Kenneth Case e Paul Zweifel [37] propuseram o chamado método das soluções elementares, que possibilitou a obtenção de soluções para a equação de transporte baseada na expansão do fluxo de partículas em um conjunto completo de autofunções provenientes de equações singulares obtidas a partir da própria equação de transporte. Tal metodologia foi capaz de fornecer soluções exatas para a equação de transporte, porém, em um contexto bastante limitado – problemas unidimensionais, sem dependência energética, em estado estacionário e em meios com espalhamento isotrópico. Posteriormente, o método foi estendido para meios com espalhamento anisotrópico [86].

Para a modelagem de problemas mais próximos da realidade, são necessárias soluções numéricas, uma tarefa que ainda se mostra bastante desafiadora, em decorrência do grande número de variáveis independentes a serem consideradas, bem como a, muitas vezes, complexa geometria de tais problemas [9, 105]. Dessa forma, existem duas classes de métodos empregados na resolução da equação de transporte: os métodos probabilísticos e os métodos determinísticos. Nas *abordagens probabilísticas*, os métodos de Monte Carlo, em geral, tem como objetivo a obtenção de soluções aproximadas do problema exato de transporte. Tais métodos não apenas oferecem grande flexibilidade com relação à complexidade do modelo para o qual se busca soluções, como também fornecem meios de incorporar as incertezas dos problemas físicos de interesse. Contudo, é inerente aos métodos probabilísticos

a demanda de substancial esforço computacional, uma vez que necessitam de um longo processo iterativo para a obtenção de soluções confiáveis do ponto de vista estatístico [57, 59, 60, 105, 107, 132]. Neste trabalho, são consideradas apenas as *abordagens determinísticas*, as quais enfatizam a obtenção de soluções exatas de certas aproximações da equação de transporte, estas, muitas vezes, dadas em termos de discretizações de algumas das variáveis independentes da equação de transporte.

Os métodos das ordenadas discretas e dos harmônicos esféricos são duas entre as abordagens usualmente aplicadas no processo de aproximação da dependência angular da equação de transporte. O método das ordenadas discretas (ou S_N), proposto em 1943 pelo físico Gean Wick [131], é mais conhecido pelos trabalhos do astrofísico Subrahmanyan Chandrasekhar em transferência radiativa [40, 41]. O método consiste na substituição da dependência contínua nas direções de migração das partículas através de um método de colocação [105], fazendo o uso de nós e de pesos de uma regra de quadratura para a aproximação do termo integral da equação de transporte, obtendo, assim, um sistema de equações diferenciais.

O método dos harmônicos esféricos (ou P_N), que historicamente precede a discretização em ordenadas discretas [51], consiste na expansão da dependência angular da solução da equação de transporte em uma série de funções ortogonais definidas na esfera unitária [42], os chamados harmônicos esféricos. Posteriormente, é deduzido um sistema de equações diferenciais para os momentos da equação de transporte cuja solução deve ainda ser obtida por algum outro método [30, 50]. Adicionalmente, o método dos harmônicos esféricos exige aproximações para as condições de contorno da equação de transporte [30, 105], e pode, até mesmo, ser numericamente instável dependendo da geometria e da aproximação utilizada para o contorno [56].

De maneira geral, não é conhecido método de aproximação angular que seja adequado para todos os possíveis problemas de transporte. No transporte multidimensional de nêutrons, por exemplo, em situações nas quais a dinâmica depende

fortemente das direções de migração das partículas, como nos problemas com fontes localizadas, a utilização do método das ordenadas discretas faz com que a solução numérica da equação de transporte apresente comportamentos oscilatórios não condizentes com a física do problema, um fenômeno conhecido como efeito-raio [91, 105]. Tal efeito é oriundo da discretização angular e pode ser mitigado com a utilização de regras de quadratura mais refinadas, embora dificilmente seja eliminado. Ainda, mesmo que o efeito-raio não esteja presente no emprego dos harmônicos esféricos, tal método é tampouco eficaz em representar a solução de tais problemas [9, 91, 105]. De fato, métodos capazes de minimizar, ou, quiçá, eliminar o efeito-raio ainda motivam os pesquisadores [9, 36, 66, 79].

Por sua vez, o tratamento da dependência temporal envolve a discretização de um operador diferencial. Há várias formas de realizar a discretização segundo a literatura, entre elas: os métodos clássicos de diferenças finitas, como o método de Euler implícito [9, 65, 82, 105]; os métodos como o de Galerkin descontínuo [9, 130]; e os de Runge-Kutta [52].

Para a discretização da variável energia, a abordagem mais utilizada é a aproximação multigrupos de energia [50, 82, 105]. Em tal aproximação, é primeiro escolhida uma partição em um intervalo finito do espectro de energia, fora do qual o número de nêutrons seja negligenciável. Na sequência, a equação de transporte é integrada em cada um dos intervalos da partição, formando, com isso, um sistema de equações íntegro-diferenciais acopladas [105]. A principal dificuldade na aplicação da aproximação multigrupos é a necessidade de estabelecer a forma com a qual os nêutrons migram de um grupo de energia para o outro, passo que requer o uso de dados experimentais [50, 105].

A discretização espacial é aquela que possui a maior variedade de técnicas disponíveis. Historicamente, foram considerados métodos baseados em aproximações de diferenças finitas para as derivadas com respeito às variáveis espaciais, o método conhecido como DD (sigla do inglês *Diamond Difference*) e a sua versão

ponderada, o método *Weighted Diamond Difference* [64, 70, 82]. Posteriormente, o uso de metodologias mais sofisticadas envolvendo os métodos de elementos finitos contínuos [84, 123] ou descontínuos [94, 129] foram considerados, bem como técnicas baseadas no método das características [8]. Ainda, com respeito à discretização espacial, para problemas multidimensionais, o uso de métodos nodais tiveram ampla contribuição na resolução de problemas de transporte [7, 10, 11]. É ressaltado que a aplicabilidade dos métodos supracitados depende do tipo de discretização do domínio empregada, sendo as técnicas baseadas em diferenças finitas e os métodos nodais mais facilmente utilizados em malhas cartesianas, em contraste com os métodos de elementos finitos e técnicas baseadas em características que apresentam vantagens em malhas não cartesianas [105]. Ainda com respeito à discretização da variável espacial, Ricardo Barros e Edward Larsen [23, 24] propuseram uma metodologia inicialmente semelhante ao método DD, o chamado método SGF (sigla do inglês *Spectral Green's Function*). A aplicação do método SGF inicia com a tomada de uma partição do domínio físico do problema e a aproximação em ordenadas discretas da equação de transporte é reescrita em função das médias de sua solução em cada um dos intervalos da partição, o que resulta no surgimento dos chamados termos de fuga transversais nas interfaces dos intervalos da partição. Como os termos de fuga transversais são desconhecidos, os autores propuseram para o seu tratamento a introdução de equações auxiliares baseadas em funções de Green. Tal abordagem requer, adicionalmente, que a malha seja varrida sucessivas vezes até a obtenção de convergência, bem como o armazenamento na memória de variáveis auxiliares. Os autores afirmam, contudo, que a formulação unidimensional é livre de erros de truncamento com respeito à variável espacial [23].

Foi Chandrasekhar quem propôs a primeira solução analítica com respeito à variável espacial para a aproximação em ordenadas discretas da equação de transporte, esta baseada na expansão da solução da equação em uma série de autofunções exponenciais que dependem da obtenção das raízes de um polinômio característico [41]. Uma abordagem alternativa à de Chandrasekhar, também ana-

lítica com respeito à variável espacial, é o método LTS_N (sigla do inglês *Laplace Transform S_N*), proposto por Marco Vilhena e Liliane Barichello [17, 124, 125]. O método LTS_N se baseia na aplicação da transformada de Laplace no domínio espacial da aproximação em ordenadas discretas da equação de transporte, de onde é obtido um sistema de equações algébricas. Após a resolução do sistema anterior, é, então, preciso realizar o cálculo da transformada inversa de Laplace para a obtenção da solução da equação de transporte [124].

Ainda entre os métodos que oferecem soluções analíticas com respeito à variável espacial para a equação de transporte, está o método das ordenadas discretas analítico (método ADO, sigla do inglês *Analytical Discrete Ordinates*), desenvolvido por Liliane Barichello e Charles Siewert no final da década de 90 [14]. Inspirado no método de Chandrasekhar [41], o método ADO faz uso da discretização em ordenadas discretas, considerando, contudo, uma regra de quadratura arbitrária, a qual deve contemplar o semi-intervalo positivo de definição da variável angular, sendo obtido, por reflexão, o intervalo completo. Nesse método, a solução da equação de transporte é escrita como uma combinação linear de autofunções exponenciais, estas oriundas da resolução de um problema de autovalores obtido a partir do sistema de equações gerado pelo método das ordenadas discretas. Tal abordagem elimina as dificuldades encontradas na necessidade de obtenção de raízes de polinômios, como no método de Chandrasekhar. Além disso, em decorrência da forma como a regra de quadratura é considerada, o problema de autovalores possui como ordem a metade do número de direções utilizadas, o que fornece uma grande vantagem em tempo computacional. Ainda, o método ADO é livre de processos iterativos, e não necessita do uso de varreduras espaciais, o que não apenas fornece vantagens com respeito ao tempo de execução, como também não exige espaço adicional para o armazenamento de variáveis intermediárias, como é o caso dos métodos DD e SGF.

O método ADO foi inicialmente desenvolvido no contexto da transferência radiativa [14, 15, 16] e, posteriormente, foi aplicado em problemas de dinâmica

de gases rarefeitos [18, 78, 111, 112]. Em tais aplicações, o método ADO evidenciou maior generalidade e eficiência computacional que outras metodologias similares. No âmbito do transporte de nêutrons, assim como o método de Case e Zweifel [37], os primeiros usos do método ADO foram em problemas com apenas um grupo de energia, em estado estacionário e em meio isotrópico, com simetria azimutal. Posteriormente, o método foi estendido para problemas com grau arbitrário de anisotropia, sem simetria azimutal [13, 116] e dependentes da energia [115].

A partir da introdução dos métodos nodais [7, 10, 11], surge a possibilidade do uso de algumas técnicas desenvolvidas para problemas unidimensionais de transporte em problemas multidimensionais. Para isso, a equação de transporte em geometria multidimensional é substituída por um sistema de equações unidimensionais obtido através do uso de integrações transversais. Entretanto, o uso das técnicas nodais faz com que se perca a capacidade de obtenção de soluções pontuais, sendo obtidas, ao invés destas, médias em cada uma das variáveis dependentes. Além disso, o processo de obtenção das equações nodais introduz termos de fuga transversal nos contornos dos nós, os quais são desconhecidos e requerem aproximações adicionais para serem tratados. Os métodos nodais permitiram, por consequência, que tanto o método SGF [25] quanto o método LTS_N [63] fossem estendidos para a resolução de problemas multidimensionais.

O uso de técnicas nodais também possibilitou a aplicação do método ADO em problemas bidimensionais, o chamado método ADO-Nodal [19, 20, 21]. O método estabelece soluções analíticas com respeito à variável espacial para os fluxos médios de partículas. Para o tratamento dos termos de fuga transversal, foram consideradas aproximações proporcionais aos fluxos médios [19], combinações lineares das soluções dos problemas unidimensionais [106], constantes [44, 104, 122], funções lineares [44] e funções exponenciais [44]. Além disso, foram consideradas soluções particulares constantes [104] e baseadas em funções de Green [106] para o tratamento de termos fonte mais gerais. De forma geral, a formulação ADO-Nodal

apresentou resultados superiores aos obtidos por outros métodos com malhas mais refinadas [20], mantendo a vantagem de depender de problemas de autovalores cuja ordem é apenas a metade do número de direções consideradas.

Intimamente relacionada com a equação de transporte, a sua equação adjunta surge como uma importante ferramenta matemática que pode ser associada à resolução de diversos dos problemas citados desde o início deste texto. Em particular, na teoria de reatores nucleares, está constantemente relacionada com os problemas de criticalidade e de segurança nuclear [30, 49, 110], e a sua solução é frequentemente interpretada como a *função importância* da contribuição de cada partícula para um detector interno ao domínio do problema [82, 105]. Dessa forma, a solução da adjunta faz parte da chamada formulação fonte-detector [82, 105], a qual visa estimar a taxa de absorção de partículas oriunda de uma fonte interna ao domínio e/ou fluxos incidentes nas fronteiras do domínio.

Em adição, a adjunta da equação de transporte tem sido utilizada em técnicas computacionais relacionadas à estimativa de parâmetros [31, 32, 54, 93] e fontes [68, 85, 88, 120], sendo, portanto, uma ferramenta importante na classe dos chamados problemas inversos. Entre as principais aplicações, destacam-se a detecção de materiais nucleares [31, 32, 85, 88], a tomografia de nêutrons [118] e a reconstrução de fontes de radiação [68, 120, 128].

Para que se possa definir um problema inverso, é conveniente entender primeiro o significado de um problema direto. Em um problema de modelagem matemática de um fenômeno físico, tipicamente, há um conjunto de dados que inseridos em um sistema geram algum tipo de resposta. O sistema é o modelo matemático que relaciona os dados, ou parâmetros, de entrada com a resposta, ou a saída. Quando se quer resolver uma equação diferencial, por exemplo, a resposta do modelo matemático é a solução desta, enquanto o modelo em si consiste em operações algébricas, diferenciais ou integrais que relacionam os parâmetros da equação com a sua solução. Tal problema segue o *fluxo normal*, ou o que é esperado, para obtenção de

uma solução em função dos parâmetros e do modelo, sendo, assim, um chamado *problema direto* [6, 29, 92]. Mas, se por outro lado, a solução da equação diferencial for conhecida e o objetivo for a obtenção dos parâmetros que a caracterizam? Ou, ainda, se o objetivo for a obtenção do modelo matemático que relaciona a solução com os parâmetros? Nesse caso, tem-se o chamado *problema inverso*, o qual pode ser definido como o problema que trata da obtenção dos dados de entrada e/ou modelo do problema direto por intermédio dos dados de saída e/ou de grandezas obtidas a partir destes [6, 29, 92]. Dessa forma, para M. Necati Özisik e Helcio Orlande [96], o objetivo de um problema direto é a obtenção de uma dada grandeza quando todas as características que a produzem são especificadas; por outro lado, um problema inverso é aquele no qual o objetivo é a estimativa de uma ou mais das características que causam a grandeza a partir de medições destas. Ainda, Albert Tarantola [121], em seu livro sobre estimativa de parâmetros, classifica um problema inverso como aquele no qual se faz o uso dos resultados de um modelo a fim de inferir os valores dos parâmetros que o caracterizam. Em resumo, *em um problema direto, as causas são dadas e os efeitos determinados; enquanto, em um problema inverso, os efeitos são conhecidos e as causas são estimadas* [96].

Uma das dificuldades da resolução de um problema inverso é que estes são tipicamente classificados como *mal-postos*. Para entender o significado de um problema mal-posto, é preciso primeiro entender o que é um problema *bem-posto*. O matemático Jacques Hadamard [58] cunhou o que é aceito atualmente para classificar um problema como bem-posto. Segundo Hadamard, é necessário que o problema goze de três propriedades: (i) possua solução (existência); (ii) a solução seja única (unicidade); e (iii) a solução dependa de maneira contínua com respeito aos dados (estabilidade). Nesse sentido, um problema é dito mal-posto quando não for bem-posto. Embora uma análise da física do fenômeno que se está considerando possa estabelecer até certo ponto a possível existência de soluções para um problema inverso [6, 96], nem sempre isso pode ser garantido, dependendo do modelo e de situações nas quais há insuficiência ou excesso de dados [92]. Do ponto de

vista matemático, a existência pode ser obtida através do aumento do espaço de soluções [6, 74]. Além disso, problemas inversos frequentemente possuem mais de uma solução, onde um exemplo clássico é o do campo gravitacional da Terra: dada a distribuição de massa do planeta, o campo gravitacional pode ser unicamente determinado ao longo da Terra. Entretanto, se conhecido o campo gravitacional, existe mais do que uma distribuição de massa que forneça o mesmo campo [6, 121]. Dessa forma, a falta de dados ou um modelo incompleto frequentemente leva à existência de mais de uma solução [92], sendo necessárias restrições adicionais ou uma maior quantidade de dados [74]. A estabilidade é a propriedade mais importante de um problema inverso [74], pois os equipamentos de medição e as próprias técnicas computacionais incluem ruídos que, na ausência de estabilidade, podem fazer com que a solução obtida para o problema inverso seja fisicamente inverossímil [74]. De fato, os problemas inversos tipicamente exigem que técnicas especiais sejam empregadas para que seja possível a obtenção de soluções estáveis [6, 71, 92, 96, 127].

Nesse sentido, quando a solução do problema inverso é expressa por meio da minimização de uma função objetivo, técnicas como a regularização de Tikhonov alteram o problema de minimização, o substituindo por um problema bem-posto que seja capaz de aproximar satisfatoriamente a solução do problema original de minimização [6, 71, 92]. Por outro lado, existem as técnicas de inferência Bayesiana, as quais tem por objetivo a obtenção de uma distribuição de probabilidade a qual pode ser utilizada para a determinação de não apenas estimativas, mas, também, permitem a incorporação das incertezas a respeito da solução do problema inverso e dos dados de entrada. Além do mais, tais técnicas permitem analisar a confiabilidade das estimativas obtidas [71]. Assim, as técnicas de inferência estatística podem ser usadas para o tratamento do caráter mal-posto do problema inverso, estendendo o seu espaço de soluções para o domínio das distribuições de probabilidade [71].

Com respeito ao emprego da adjunta da equação de transporte em problemas inversos, Joshua Hykes e Yousry Azmy utilizaram técnicas de minimização de verossimilhança [68] e inferência Bayesiana [69] para estimar a distribuição de fontes de partículas interiores ao domínio. A fim de estimar os restos de combustível nuclear após o acidente em Fukushima, mais recentemente, Shinji Sugaya, Tomohiro Endo e Akio Yamamoto utilizaram a adjunta da equação de transporte conjuntamente com técnicas de inferência Bayesiana [120]. Ainda com respeito à aplicação da adjunta em problemas inversos, Keith Bledsoe, Jeffrey Favorite e Tunc Aldemir utilizaram a adjunta da equação de transporte para resolver problemas de identificação de materiais nucleares e de localização de interfaces de proteção radiológicas [32].

Como pode ser visto, a importância das aplicações discutidas anteriormente e que envolvem a adjunta da equação de transporte justificam esforços para a obtenção de métodos rápidos e acurados para a sua solução. Assim, Densmore e Larsen [47] utilizaram o método de Monte Carlo para estimar o fluxo adjunto em aplicações relacionadas à fissão nuclear, enquanto Vitali *et. al.* [126] aplicaram o mesmo método em proteção radioativa. No âmbito das técnicas determinísticas, a semelhança encontrada, em geometria cartesiana, entre a equação de transporte [105] e a sua adjunta sugere a possibilidade de extensão dos métodos empregados na resolução da primeira para a adjunta. Assim, Mansur *et. al.* propuseram uma extensão do método *Response Matrix* para a equação adjunta unidimensional [83]. Com respeito ao método SGF, Militão e Barros apresentaram, também, uma versão do método para a equação unidimensional [87], posteriormente, seguida de uma versão em geometria cartesiana bidimensional [45].

No contexto da aplicação do método ADO em problemas de transporte, apenas recentemente passou-se a considerar o uso do método ADO para o cálculo do fluxo adjunto de partículas, tendo sido resolvido, inicialmente, apenas problemas unidimensionais e monoenergéticos em meio isotrópico [102]. Posteriormente,

o método ADO foi estendido para problemas em meio de grau arbitrariamente alto de anisotropia [97, 103] e, na sequência, para problemas dependentes da energia, através da aproximação multigrupos de energia [99, 100]. Em testes numéricos, a formulação obtida foi comparada com a versão do método SGF para a equação adjunta [87], onde obteve, para o mesmo número de direções, maior precisão. Além disso, a formulação ADO foi aplicada na resolução da equação adjunta em problemas inversos de estimativa de fontes de partículas, onde foram consideradas fontes constantes por partes, polinomiais e exponenciais [97, 98, 101, 103], em situações onde o uso de expressões analíticas para resolver certas integrais relacionadas ao método de estimativa da fonte permitiram expressiva redução no tempo computacional, contrastando com resultados obtidos com o uso de aproximações numéricas para as mesmas integrais [100, 101].

O principal objetivo deste trabalho de doutorado é a extensão da formulação ADO para a adjunta da equação de transporte no contexto dos problemas unidimensionais dependentes da energia, bem como a obtenção de uma formulação ADO-Nodal para a equação adjunta em geometria cartesiana bidimensional [82, 105]. Assim, o desenvolvimento de uma formulação concisa e precisa para a obtenção de soluções de problemas adjuntos visa posteriormente a aplicação da mesma em problemas inversos de estimativa de fontes de partículas, os quais são de grande importância na área nuclear [69, 85, 88, 118, 120].

Nesse sentido, no Capítulo 2 é apresentada a equação de transporte, a aproximação multigrupos de energia e as simplificações geométricas para geometrias cartesianas unidimensional e bidimensional, bem como as condições de contorno consideradas. Na sequência, no Capítulo 3, é fornecida uma dedução heurística para o operador adjunto de transporte, por meio da introdução de um produto interno adequado no espaço de funções do problema.

Posteriormente, no Capítulo 4, é desenvolvida uma formulação ADO-Nodal para o problema adjunto proposto em geometria cartesiana bidimensional,

considerando um único grupo de energia e espalhamento isotrópico. Para isso, é introduzida a projeção no plano da regra de quadratura LQ_N [82] para a obtenção da aproximação em ordenadas discretas da equação adjunta, assim como são propostas duas indexações distintas para as direções, seguindo Barichello *et. al.* [19], a fim de explorar certas simetrias nos passos posteriores da dedução do método. Na sequência, para a obtenção das equações nodais, é definida uma malha retangular para o domínio físico do problema, passo seguido pelo cálculo dos fluxos angulares médios em cada uma das variáveis. Dessa forma, são obtidos dois sistemas unidimensionais para os quais uma formulação ADO semelhante àquela obtida para a equação adjunta unidimensional [103] é aplicada, levando em consideração os ordenamentos previamente definidos para a quadratura LQ_N . Como resultado, os fluxos médios em cada uma das variáveis são expressos por meio da expansão dos mesmos em uma base de autofunções obtidas a partir das equações nodais homogêneas, superposta por uma solução particular. Os termos de fuga transversais que surgem do passo de integração são aproximados como constantes, as quais acoplam os sistemas de equações obtidos para cada uma das variáveis. As fontes internas de partículas são tratadas como constantes em cada uma das regiões da malha, de onde são propostas soluções particulares constantes para as equações nodais. Por fim, para a obtenção dos coeficientes da expansão, são aplicadas as condições de contorno do problema adjunto. Após, no Capítulo 5, é, brevemente, desenvolvida a formulação ADO para a aproximação multigrupos de energia da adjunta da equação de transporte.

Continuando, no Capítulo 6, as formulações ADO e ADO-Nodal para a adjunta da equação de transporte são testadas através do problema fonte-detector, o qual permite o cálculo das taxas de absorção de partículas de detectores contidos no interior do domínio por meio do uso da equação de transporte e através da adjunta. Além disso, com o objetivo de explorar a analiticidade dos fluxos médios obtidos com as formulações ADO, são propostas expressões analíticas para as taxas de absorção, o que remove a necessidade de regras de quadratura adicionais para a obtenção das mesmas, contribuindo com a precisão do método e com o tempo computacional.

O Capítulo 7 trata de um problema de estimativa de fontes de partículas. Nesse caso, são estimadas fontes isotrópicas de partículas através das leituras ruidosas de diversos detectores de partículas situados no interior do domínio do problema. Para os testes, são assumidas como conhecidas todas as propriedades físicas do meio onde as partículas estão migrando, bem como o fluxo de partículas incidente nas fronteiras. A adjunta da equação de transporte é, então, utilizada para derivar um modelo linear que relaciona a taxa de absorção de partículas de detectores situados no interior do domínio, com os coeficientes da expansão da fonte (ou aproximação) em alguma base de funções. Para a estimativa dos coeficientes, são utilizadas duas técnicas: a primeira envolve a minimização do funcional de Tikhonov [6, 29, 71, 96]; a segunda, utiliza técnicas Bayesianas para estimar a distribuição posterior dos parâmetros, usando o algoritmo de Metropolis-Hastings para MCMC (sigla do inglês *Markov chain Monte Carlo*) [71, 95, 109, 121].

Finalmente, no Capítulo 8, são discutidas algumas conclusões, bem como resultados publicados e projetos de continuidade para o trabalho.

2 A EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE PARTÍCULAS

Neste capítulo, é apresentada a equação íntegro-diferencial de transporte de partículas no contexto do transporte de nêutrons. Inicialmente será realizada a dedução da equação por meio de princípios de conservação. Na sequência, a hipótese de estado estacionário é considerada e a aproximação multigrupos de energia é aplicada à equação resultante. Por fim, serão apresentadas simplificações do modelo para as geometrias cartesianas bidimensional e unidimensional.

2.1 Derivação da Equação de Transporte de Nêutrons

Nesta seção, é fornecida uma breve dedução para a equação de transporte de nêutrons baseada nos princípios de conservação. Para isso, uma série de hipóteses a respeito das interações entre meio, núcleos e partículas devem ser consideradas [50, 82], entre elas:

- (a) as partículas assumidas pontuais;
- (b) as partículas descrevem uma trajetória retilínea entre colisões;
- (c) a interação nêutron-nêutron é negligenciável;
- (d) as colisões entre nêutrons e núcleos são instantâneas;
- (e) as propriedades do meio material são isotrópicas e independentes do tempo;
- (f) apenas o valor esperado ou médio da densidade de partículas é considerado.

Entre as hipóteses aqui consideradas, é a hipótese (c) que garante a linearidade do modelo proposto. Adicionalmente, são considerados aqui apenas meios

materiais não multiplicativos, isto é, meios nos quais não ocorrem a reação de fissão nuclear, sendo desconsiderada, portanto, a desintegração, espontânea ou não, de núcleos [49].

O transporte de nêutrons é caracterizado no chamado espaço de fase, composto pela posição da partícula, pela direção de migração, pela energia cinética e pelo instante de tempo considerado [30, 49, 105]. Em geometria cartesiana tridimensional, a posição é dada em termos do vetor $\mathbf{r} = [x \ y \ z]^T$ no interior de uma região convexa V do espaço; a direção de migração $\mathbf{\Omega} = [\eta \ \xi \ \mu]^T$ é um vetor unitário cujos cossenos diretores são dados em coordenadas esféricas por [30, 105]

$$\eta = \sqrt{1 - \mu^2} \cos \phi, \quad \xi = \sqrt{1 - \mu^2} \sin \phi, \quad \mu = \cos \theta, \quad (2.1)$$

onde $\phi \in [0, 2\pi)$ representa o ângulo azimutal, medido a partir do eixo x , e $\theta \in [0, \pi]$ é o ângulo polar, medido a partir do eixo z , conforme a Figura 2.1.

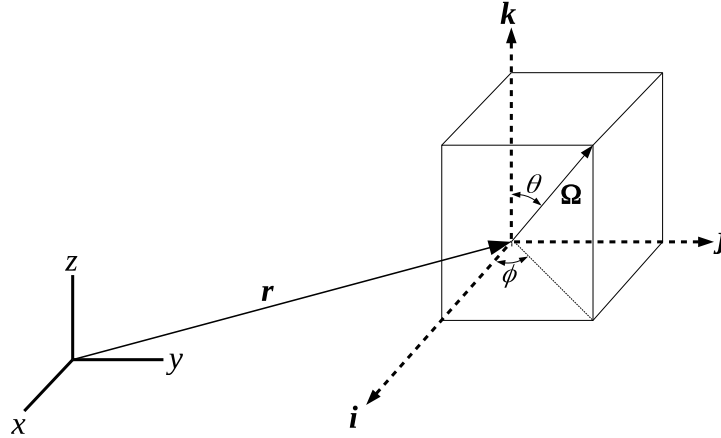


Figura 2.1: Sistemas de coordenadas para a posição \mathbf{r} e direção $\mathbf{\Omega}$.

A velocidade de migração das partículas é tipicamente escrita como $\mathbf{v} = v\mathbf{\Omega}$, com $v = |\mathbf{v}|$, onde $|\cdot|$ representa a norma euclidiana. Com isso, a velocidade se relaciona com a energia cinética por meio da fórmula [50]

$$E = \frac{1}{2}m_n v^2, \quad (2.2)$$

onde $m_n \approx 1.674929 \times 10^{-27} \text{ kg}$ representa a massa do nêutron [49].

Dessa forma, se $N(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t)$ representar a densidade de nêutrons no espaço de fase, então o número provável de nêutrons em um instante de tempo fixo t em um elemento infinitesimal $dV d\boldsymbol{\Omega} dE$ contendo $(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E)$ é dado por

$$N(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) dV d\boldsymbol{\Omega} dE, \quad (2.3)$$

conforme a Figura 2.2, onde dV é um elemento de volume infinitesimal que contém \mathbf{r} e $d\boldsymbol{\Omega}$ é um elemento diferencial de ângulo sólido em torno de $\boldsymbol{\Omega}$ [30, 50].

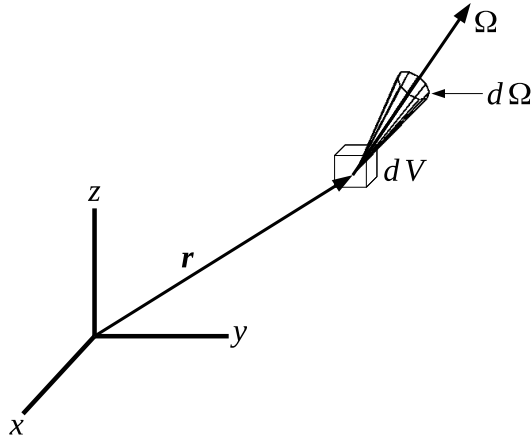


Figura 2.2: Elemento de integração.

Se for tomada por hipótese que, em um intervalo de tempo Δt , todos os nêutrons que sofrem colisões com núcleos deixam $dV d\boldsymbol{\Omega} dE$ [30, 50], é possível determinar o número provável de nêutrons no instante $t + \Delta t$ adicionando àqueles: (i) os nêutrons que não sofreram colisão; (ii) os nêutrons que vieram do exterior de $dV d\boldsymbol{\Omega} dE$; e (iii) os nêutrons oriundos de fontes internas à região $dV d\boldsymbol{\Omega} dE$ [30, 50, 105].

Para isso, é preciso primeiro introduzir o conceito da seção de choque macroscópica total, $\sigma(\mathbf{r}, E)$ (medida em cm^{-1}), a qual representa a probabilidade de um nêutron colidir com um núcleo por unidade de distância percorrida [30, 105].

Dessa forma, se $v\Delta t$ é uma aproximação de primeira ordem no tempo da distância percorrida pelo nêutron, então o número provável de nêutrons que sofreram colisões com núcleos no instante $t + \Delta t$ em $dV d\Omega dE$ é dado por $N(\mathbf{r}, \Omega, E, t) \sigma(\mathbf{r}, E) v \Delta t$ [30], de onde

$$N(\mathbf{r}, \Omega, E, t) (1 - \sigma(\mathbf{r}, E) v \Delta t) dV d\Omega dE, \quad (2.4)$$

representa o número provável de nêutrons que não sofreram colisões.

É preciso destacar que nas aplicações em transporte de nêutrons, nas seções de choque são consideradas apenas a posição, \mathbf{r} , e a energia cinética, E , das partículas, havendo pouca dependência da direção Ω e do tempo t [49, 50]. Além disso, a seção de choque macroscópica total, como indicado pelo nome, contabiliza as probabilidades de todos os possíveis tipos de colisão entre partículas e núcleos. Neste texto, são consideradas apenas as colisões que resultam em absorção ou espalhamento, sendo escrito, portanto,

$$\sigma(\mathbf{r}, E) = \sigma_a(\mathbf{r}, E) + \sigma_s(\mathbf{r}, E), \quad (2.5)$$

onde $\sigma_a(\mathbf{r}, E)$ representa a probabilidade de ocorrência de absorção e $\sigma_s(\mathbf{r}, E)$ a probabilidade de ocorrência de espalhamento (o subíndice a vem do inglês *absorption* – absorção – e o subíndice s vem de *scattering* – espalhamento).

Na sequência, é necessário considerar a chamada seção de choque duplamente diferencial, a qual visa descrever a probabilidade de nêutrons emergentes de uma colisão assumirem determinada direção ou energia [30, 82]. A seção de choque duplamente diferencial é definida por

$$\sigma_s(\mathbf{r}, \Omega', E' \rightarrow \Omega, E) = \sigma(\mathbf{r}, E') f(\mathbf{r}, \Omega', E' \rightarrow \Omega, E), \quad (2.6)$$

onde $f(\mathbf{r}; \Omega', E' \rightarrow \Omega, E) d\Omega dE$ representa a probabilidade de emergirem nêutrons em $d\Omega dE$ em torno de (Ω, E) no caso de nêutrons migrando da direção Ω' com energia cinética E' sofrerem colisão [30, 49, 105].

Com isso, a contabilização dos nêutrons que migraram para a região $dV d\Omega dE$ a partir de todas as direções Ω' e de todas as energias cinéticas E' é dada por

$$\left[\int_0^\infty \int_{\mathbb{S}} \sigma_s(\mathbf{r}, \Omega', E' \rightarrow \Omega, E) v(E') N(\mathbf{r}, \Omega', E', t) d\Omega' dE' \right] dV d\Omega dE \Delta t, \quad (2.7)$$

onde, assim como na Equação (2.4), $v\Delta t$ é aproximação de primeira ordem no tempo da distância percorrida pelo nêutron e \mathbb{S} representa a casca esférica unitária em \mathbb{R}^3 centrada em \mathbf{r} .

Ainda, os nêutrons oriundos de fontes internas à região $dV d\Omega dE$ no intervalo Δt são dados por

$$S(\mathbf{r}, \Omega, E, t) dV d\Omega dE \Delta t. \quad (2.8)$$

Dessa forma, a partir das contabilizações feitas nas Equações (2.4), (2.7) e (2.8), ao eliminar $dV d\Omega dE$, é obtida no instante de tempo $t + \Delta t$ a equação

$$\begin{aligned} N(\mathbf{r} + \Omega v \Delta t, \Omega, E, t + \Delta t) &= N(\mathbf{r}, \Omega, E, t) (1 - \sigma(\mathbf{r}, E) v \Delta t) \\ &+ \int_0^\infty \int_{\mathbb{S}} \sigma_s(\mathbf{r}, \Omega', E' \rightarrow \Omega, E) v(E') N(\mathbf{r}, \Omega', E', t) d\Omega' dE' \Delta t \\ &+ S(\mathbf{r}, \Omega, E, t) \Delta t. \end{aligned} \quad (2.9)$$

Na sequência, a Equação (2.9) é reordenada e ambos os lados da mesma são divididos por Δt . Com isso, no limite $\Delta t \rightarrow 0$, a Equação (2.9) é reescrita como

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} N(\mathbf{r}, \Omega, E, t) &+ \sigma(\mathbf{r}, E) v(E) N(\mathbf{r}, \Omega, E, t) \\ &= \int_0^\infty \int_{\mathbb{S}} \sigma_s(\mathbf{r}, \Omega', E' \rightarrow \Omega, E) v(E') N(\mathbf{r}, \Omega', E', t) d\Omega' dE' \\ &+ S(\mathbf{r}, \Omega, E, t). \end{aligned} \quad (2.10)$$

A partir da aplicação da regra da cadeia [43], é possível reescrever o termo diferencial da Equação (2.10) como

$$\begin{aligned}\frac{d}{dt}N(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) &= \frac{\partial}{\partial t}N(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) + \frac{d}{dt}\mathbf{r} \cdot \nabla N(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) \\ &= \frac{\partial}{\partial t}N(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) + \mathbf{v} \cdot \nabla N(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) \\ &= \frac{\partial}{\partial t}N(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) + v\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla N(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t),\end{aligned}\tag{2.11}$$

o qual pode ser utilizado para reescrever a Equação (2.10) como

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial t}N(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) + v\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla N(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) + \sigma(\mathbf{r}, E)vN(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) \\ = \int_0^\infty \int_{\mathbb{S}} \sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E)v(E')N(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E', t)d\boldsymbol{\Omega}'dE' \\ + S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t).\end{aligned}\tag{2.12}$$

No contexto das aplicações em transporte de nêutrons, é usual reescrever a Equação (2.12) em termos do fluxo angular de nêutrons [30, 82, 105]

$$\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) = v(E)N(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t),\tag{2.13}$$

o que resulta em

$$\begin{aligned}\frac{1}{v}\frac{\partial}{\partial t}\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) + \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) + \sigma(\mathbf{r}, E)\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) \\ = \int_0^\infty \int_{\mathbb{S}} \sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E)\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E', t)d\boldsymbol{\Omega}'dE' \\ + S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t).\end{aligned}\tag{2.14}$$

Nos problemas considerados neste trabalho, bem como em diversas aplicações relacionadas ao transporte de nêutrons [30, 49, 105], o interesse está centrado no caso estacionário, no qual não há dependência sobre a variável temporal. Assim, a Equação (2.14) pode ser simplificada para

$$\begin{aligned}\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) + \sigma(\mathbf{r}, E)\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) \\ = \int_0^\infty \int_{\mathbb{S}} \sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E)\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E')d\boldsymbol{\Omega}'dE' \\ + S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E).\end{aligned}\tag{2.15}$$

Para a completa descrição do modelo do transporte de nêutrons, é necessária a especificação de condições de contorno. Para isso, são impostas restrições nas direções incidentes da fronteira ∂V de V dadas por

$$\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}_{in}, E) = \psi_b(\boldsymbol{\Omega}_{in}, E) + \rho(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}_{out}, E), \quad (2.16)$$

onde $\mathbf{r} \in \partial V$, ψ_b representa o fluxo de partículas prescrito nas direções incidentes da fronteira e $\rho \in [0,1]$ é o coeficiente de reflexão especular. O termo $\boldsymbol{\Omega}_{in}$ representa as direções de fluxo incidente na fronteira, isto é, as direções para as quais $\boldsymbol{\Omega}_{in} \cdot \mathbf{n} < 0$, onde \mathbf{n} é um vetor unitário à fronteira ∂V , no sentido exterior. Por outro lado, $\boldsymbol{\Omega}_{out}$ representa as direções de fluxo emergente na fronteira, isto é, as direções para as quais $\boldsymbol{\Omega}_{in} \cdot \mathbf{n} > 0$. É destacado que, nos problemas típicos do transporte de nêutrons, é comum tomar $\rho = 0$ ou $\rho = 1$ [30, 50].

2.2 Aproximação Multigrupos de Energia

A aproximação multigrupos de energia é a técnica mais empregada no processo de discretização da dependência energética da equação de transporte de nêutrons [9, 30, 50, 105]. Para o uso dessa técnica, é necessária a identificação de um intervalo, $[E_{min}, E_{max}] \subset [0, \infty)$, fora do qual a densidade de partículas migrando seja negligenciável. O intervalo $[E_{min}, E_{max}]$ é, então, dividido em um número finito de subintervalos, os chamados grupos de energia. É comum, na literatura [30, 105], enumerar os grupos de energia de maneira ascendente, a partir do zero, com o decréscimo da energia. Dessa forma, em um problema onde são considerados G grupos de energia, o primeiro grupo de energia é aquele reservado para os valores mais elevados de energia. Por outro lado, o último grupo de energia se destina para os menores valores de energia, como pode ser visto na Figura 2.3.

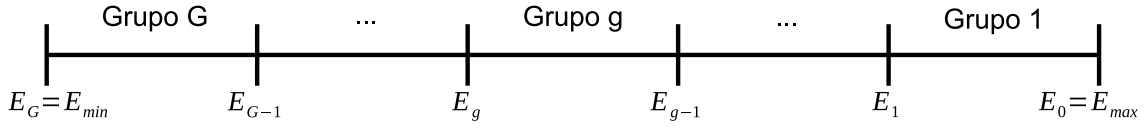


Figura 2.3: Diagrama da aproximação multigrupos de energia.

A partir da divisão da dependência energética em grupos de energia, é possível reescrever a Equação (2.15) como

$$\begin{aligned}
 \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) + \sigma(\mathbf{r}, E) \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) \\
 = \sum_{g'=1}^G \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \int_{\mathbb{S}} \sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E) \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E') d\boldsymbol{\Omega}' dE' \\
 + S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E).
 \end{aligned} \tag{2.17}$$

Na sequência, pode ser deduzido um sistema de equações a partir da Equação (2.17). Para isso, é definido o fluxo angular de nêutrons do g -ésimo grupo de energia por meio da expressão

$$\psi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) dE, \tag{2.18}$$

para $g \in \{1, \dots, G\}$. A ideia é integrar a Equação (2.17) com respeito à variável energética em cada um dos subintervalos $[E_g, E_{g-1}]$. Assim, para cada g é obtida uma equação da forma

$$\begin{aligned}
 \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \left(\frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma(\mathbf{r}, E) \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) dE} \right) \psi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \\
 = \sum_{g'=1}^G \int_{\mathbb{S}} \left(\frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E) dE' dE}{\int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) dE'} \right) \psi_{g'}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' \\
 + S_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}),
 \end{aligned} \tag{2.19}$$

onde os denominadores são simplesmente as definições de ψ_g e $\psi_{g'}$, respectivamente, e S_g é definida por

$$S_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} S(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) dE. \quad (2.20)$$

A fim de simplificar a notação na Equação (2.19), são introduzidas, para $g \in \{1, \dots, G\}$, a seção de choque macroscópica total do grupo g ,

$$\sigma_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma(\mathbf{r}, E) \psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) dE}, \quad (2.21)$$

e a seção de choque de espalhamento do grupo g' para o grupo g ,

$$\sigma_{s,g',g}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', \mathbf{\Omega}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \sigma_s(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', E' \rightarrow \mathbf{\Omega}, E) \psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', E') dE' dE}{\int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \psi(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}, E) dE}. \quad (2.22)$$

Assim, por meio das Equações (2.21) e (2.22), a Equação (2.19) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} & \mathbf{\Omega} \cdot \nabla \psi_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) + \sigma_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \psi_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}) \\ &= \sum_{g'=1}^G \int_{\mathbb{S}} \sigma_{s,g',g}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}', \mathbf{\Omega}) \psi_{g'}(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}') d\mathbf{\Omega}' + S_g(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}), \end{aligned} \quad (2.23)$$

para $g \in \{1, \dots, G\}$.

O sistema de equações apresentado na Equação (2.23) é equivalente à Equação (2.17), sendo livre, portanto, de aproximações adicionais. Contudo, a Equação (2.23) apenas *esconde* a dependência energética nas Equações (2.21) e (2.22). Além disso, a seção macroscópica total do grupo g passa a depender da direção de migração das partículas, uma dificuldade adicional ausente na Equação (2.15). Uma aproximação comum na literatura [50, 105] é a hipótese de separabilidade entre a energia e a direção de migração das partículas. Dessa forma, é suposta a existência

de uma função ψ , dependente apenas da posição e da energia, e outra função f , dependente apenas da posição e da direção, tais que

$$\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) \approx \psi(\mathbf{r}, E)f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}). \quad (2.24)$$

Com isso, os termos dependentes da direção nas Equações (2.21) e (2.22) podem ser cancelados. Assim, a seção de choque macroscópica total do grupo g pode ser reescrita como

$$\sigma_g(\mathbf{r}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma(\mathbf{r}, E)\psi(\mathbf{r}, E)dE}{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \psi(\mathbf{r}, E)dE}, \quad (2.25)$$

e a seção de choque de espalhamento do grupo g' para o grupo g toma a forma

$$\sigma_{s,g',g}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) = \frac{\int_{E_g}^{E_{g-1}} \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E)\psi(\mathbf{r}, E')dE'dE}{\int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \psi(\mathbf{r}, E)dE'}, \quad (2.26)$$

sendo, com isso, reescrita a Equação (2.23) como

$$\begin{aligned} & \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma_g(\mathbf{r})\psi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \\ &= \sum_{g'=1}^G \int_{\mathbb{S}} \sigma_{s,g',g}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega})\psi_{g'}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}')d\boldsymbol{\Omega}' + S_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}). \end{aligned} \quad (2.27)$$

Cuidadosa inspeção das Equações (2.25) e (2.26) revela ainda que as mesmas continuam a necessitar do fluxo angular dependente da energia e do conhecimento de função f introduzida na Equação (2.24), a qual pode ser bastante complexa. Nesses casos, é típica a utilização de dados experimentais, usualmente compilados em grandes bibliotecas [30, 50, 82, 105].

Um caso especial da aproximação multigrupos de energia é aquele no qual se considera apenas um grupo de energia, o chamado caso monoenergético. É típico nos problemas de transporte monoenergéticos a remoção do subíndice g ,

sendo reescrita, com isso, a Equação (2.27) como

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \int_{\mathbb{S}} \sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega})\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}')d\boldsymbol{\Omega}' + S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}). \quad (2.28)$$

Ainda, as condições de contorno apresentadas na Equação (2.16) precisam, também, ser integradas com respeito à energia em cada um dos intervalos $[E_g, E_{g-1}]$. Assim, são obtidas como condições de contorno da aproximação multi-grupos de energia

$$\psi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}_{in}) = \psi_{b,g}(\boldsymbol{\Omega}_{in}) + \rho(\mathbf{r})\psi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}_{out}), \quad (2.29)$$

para $\mathbf{r} \in \partial V$ e $g \in \{1, \dots, G\}$.

A seguir, são feitas uma série de hipóteses com respeito ao meio físico a fim de apresentar simplificações adicionais para o modelo.

2.3 Equação de Transporte em Geometria Cartesiana

Mesmo sob a hipótese de estado estacionário e da aproximação multi-grupos de energia, ainda existem cinco variáveis independentes na Equação (2.27), mostrando-se, este, um problema bastante desafiador do ponto de vista computacional [82, 105]. Dessa forma, é preciso explorar qualquer propriedade adicional que se saiba a respeito do espaço de fase, a fim de reduzi-lo a um número menor de variáveis independentes. De fato, em grande parte dos códigos computacionais em uso, são consideradas apenas uma ou duas dimensões espaciais e são exploradas certas simetrias para reduzir o número de variáveis utilizadas para descrever a direção de migração dos nêutrons [9, 82, 105]. Neste trabalho, são considerados problemas de transporte em geometrias cartesianas bidimensionais e unidimensionais.

2.3.1 A Equação de Transporte em Geometria Cartesiana Bidimensional

Entre os problemas clássicos da teoria de transporte, podem ser encontrados aqueles nos quais uma das variáveis, por exemplo z , possui intervalo de variação muito maior que as demais, ou mesmo infinito. Dessa forma, uma simplificação comum na literatura [50, 82, 105] é considerar o domínio físico do problema infinito com respeito à variável z . Assim, se assumido que (i) $\mathbf{r} = [x \ y \ z]^T$ é tal que $(x, y) \in D$, com D convexo e limitado; (ii) $z \in \mathbb{R}$; (iii) as seções de choque, as fontes internas e as condições de contorno não dependerem de z ; e (iv) o fluxo incidente prescrito na fronteira for simétrico e uma função par de μ , então o fluxo angular de nêutrons será, também, uma função independente de z e par com respeito à μ [30, 82, 105]. Além disso, se suposto que o meio físico admite apenas espalhamento isotrópico, isto é, σ_s independe da direção, então a equação de transporte de nêutrons pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} & \eta \frac{\partial}{\partial x} \psi_g(x, y, \eta, \xi) + \xi \frac{\partial}{\partial y} \psi_g(x, y, \eta, \xi) + \sigma_g(x, y) \psi_g(x, y, \eta, \xi) \\ &= \sum_{g'=1}^G \int_{\mathbb{S}'} \sigma_{s, g', g}(x, y, \eta', \xi', \eta, \xi) \psi_{g'}(x, y, \eta', \xi') d\eta' d\xi' + S_g(x, y, \eta, \xi), \end{aligned} \quad (2.30)$$

onde (x, y) pertence ao interior de D e $\mathbb{S}' = \{(\eta, \xi) \in \mathbb{R}^2 | \eta^2 + \xi^2 \leq 1\}$.

A fim de simplificar a notação, neste trabalho, a partir deste ponto, é assumido que $\mathbf{r} = [x \ y]^T$, $\boldsymbol{\Omega} = [\eta \ \xi]^T$, $\nabla \psi_g = [\partial \psi_g / \partial x \ \partial \psi_g / \partial y]^T$ e $d\boldsymbol{\Omega} = d\eta d\xi$ para rescrever a Equação (2.30) como

$$\begin{aligned} & \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma_g(\mathbf{r}) \psi_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \\ &= \sum_{g'=1}^G \int_{\mathbb{S}'} \sigma_{s, g', g}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}) \psi_{g'}(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' + S_g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}). \end{aligned} \quad (2.31)$$

Além disso, no contexto deste trabalho, o conjunto D é um retângulo no plano, com lados paralelos aos eixos ordenados, isto é, $D = [0, X] \times [0, Y]$, para X

e Y números reais positivos. Ainda, apenas são considerados problemas monoenergéticos, aqueles nos quais todas as seções de choque são independentes da energia e todas as partículas migram com a mesma energia cinética. Dessa forma, a equação de transporte em geometria cartesiana bidimensional é reescrita como [30, 50, 105]

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \\ = \int_{\mathbb{S}'} \sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}' \rightarrow \boldsymbol{\Omega})\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}')d\boldsymbol{\Omega}' + S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}). \end{aligned} \quad (2.32)$$

2.3.2 A Equação de Transporte em Geometria Cartesiana Unidimensional

Se o domínio físico do problema puder ser considerado infinito nas variáveis x e y , com $z \in [0, Z]$, e, se ainda, as seções de choque, a fonte interna, as condições de contorno forem independentes das variáveis x e y , e, ademais, houver simetria com respeito ao ângulo azimutal, então a aproximação multigrupos de energia da equação de transporte de nêutrons pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial z} \psi_g(z, \mu) + \sigma_g(z)\psi_g(z, \mu) \\ = \sum_{g'=1}^G \int_{-1}^1 \sigma_{s,g',g}(z, \mu' \rightarrow \mu)\psi_{g'}(z, \mu')d\mu' + S_g(z, \mu). \end{aligned} \quad (2.33)$$

Ainda, a dependência entre a variável espacial, z , e a direção, μ , em $\sigma_{s,g',g}$ pode ser descrita a partir de uma expansão em polinômios de Legendre da forma [30, 50, 82, 105]

$$\sigma_{s,g',g}(z, \mu' \rightarrow \mu) = \sum_{l=0}^{\infty} \sigma_{s,g',g,l}(z)P_l(\mu')P_l(\mu), \quad (2.34)$$

onde P_l é o l -ésimo polinômio de Legendre. A expansão proposta na Equação (2.34) é, então, truncada em algum número natural L , a fim de escrever

$$\sigma_{s,g',g}(z, \mu' \rightarrow \mu) = \sum_{l=0}^L \sigma_{s,g',g,l}(z)P_l(\mu')P_l(\mu). \quad (2.35)$$

O número L representa o grau de anisotropia do espalhamento e, quando $L = 0$, é dito que o meio possui espalhamento isotrópico.

Com isso, a equação de transporte assume a forma

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial z} \psi_g(z, \mu) + \sigma_g(z) \psi_g(z, \mu) \\ = \sum_{g'=1}^G \sum_{l=0}^L \sigma_{s,g',g,l}(z) P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi_{g'}(z, \mu') d\mu' + S_g(z, \mu), \end{aligned} \quad (2.36)$$

para $g \in \{1, \dots, G\}$.

Para as aplicações consideradas neste trabalho, é conveniente reescrever o sistema de equações obtido para a aproximação multigrupos de energia de maneira vetorial. Com isso, a Equação (2.36) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial z} \boldsymbol{\psi}(z, \mu) + \boldsymbol{\sigma}(z) \boldsymbol{\psi}(z, \mu) \\ = \sum_{l=0}^L P_l(\mu) \boldsymbol{\sigma}_{s,l} \int_{-1}^1 P_l(\mu') \boldsymbol{\psi}(z, \mu') d\mu' + \mathbf{S}(z, \mu), \end{aligned} \quad (2.37)$$

onde o vetor de G componentes $\boldsymbol{\psi}$ é definido como

$$\boldsymbol{\psi}(z, \mu) = [\psi_1(z, \mu) \ \psi_2(z, \mu) \ \cdots \ \psi_G(z, \mu)]^T. \quad (2.38)$$

Na Equação (2.38), $\boldsymbol{\sigma}$ é uma matriz diagonal de ordem G e possui, como g -ésimo elemento de sua diagonal, a seção de choque total do grupo g . Por sua vez, para cada $l \in \{1, \dots, L\}$, $\boldsymbol{\sigma}_{s,l}$ é uma matriz de ordem G cujo g -ésimo elemento da g' -ésima linha é a seção de choque $\sigma_{s,g',g,l}$. E, por fim, \mathbf{S} é um vetor de G componentes dado por

$$\mathbf{S}(z, \mu) = [S_1(z, \mu) \ S_2(z, \mu) \ \cdots \ S_G(z, \mu)]^T. \quad (2.39)$$

No próximo capítulo é apresentada uma dedução para a adjunta da equação de transporte de nêutrons.

3 O OPERADOR ADJUNTO DE TRANSPORTE

Neste capítulo são apresentadas deduções heurísticas para a adjunta da equação de transporte de nêutrons nos contextos do modelo monoenergético em geometria cartesiana bidimensional, definido na Equação (2.32) do Capítulo 2, e da aproximação multigrupos de energia em geometria cartesiana unidimensional, de acordo com a Equação (2.37).

3.1 A Adjunta da Equação de Transporte em Geometria Cartesiana Bidimensional

A equação de transporte monoenergética em geometria cartesiana bidimensional, discutida no Capítulo 2, pode ser escrita como

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

sujeita às condições de contorno nas direções de entrada, Ω_{in} ,

$$\psi(\mathbf{r}, \Omega_{in}) = \psi_b(\mathbf{r}, \Omega_{in}) + \rho\psi(\mathbf{r}, \Omega_{out}), \quad (3.2)$$

conforme descrito na Equação (2.16). Na Equação (3.2), a função ψ representa o fluxo angular de nêutrons, S é um termo fonte e \mathcal{L} é o operador de transporte, definido por

$$\begin{aligned} \mathcal{L}\psi(\mathbf{r}, \Omega) &= \Omega \cdot \nabla\psi(\mathbf{r}, \Omega) + \sigma(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, \Omega) \\ &\quad - \int_{\mathbb{S}'} \sigma_s(\mathbf{r}, \Omega', E' \rightarrow \Omega)\psi(\mathbf{x}, \Omega', E')d\Omega', \end{aligned} \quad (3.3)$$

para $(x, y) \in D$, um conjunto convexo e limitado do plano, e $\mathbb{S}' = \{(\eta, \xi) | \eta^2 + \xi^2 \leq 1\}$.

Dado um operador linear \mathcal{L} e um par de funções ψ e ψ^\dagger , integráveis e suficientemente suaves para que as operações façam sentido, com condições de

contorno apropriadas, o operador adjunto de \mathcal{L} é definido como o operador \mathcal{L}^\dagger tal que

$$\langle \mathcal{L}\psi, \psi^\dagger \rangle = \langle \psi, \mathcal{L}^\dagger \psi^\dagger \rangle, \quad (3.4)$$

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

$$\langle f, g \rangle = \int_{\mathbb{S}'} \int_V f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) g(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) dV d\boldsymbol{\Omega}. \quad (3.5)$$

A Equação (3.4) apresenta uma heurística para a obtenção do operador adjunto: (i) multiplicar $\mathcal{L}\psi$ por ψ^\dagger ; (ii) integrar em $\mathbf{r} \in D$ e $\boldsymbol{\Omega} \in \mathbb{S}'$ para obter $\langle \mathcal{L}\psi, \psi^\dagger \rangle$; (iii) realizar as operações necessárias a fim de obter $\langle \psi, \mathcal{L}^\dagger \psi^\dagger \rangle$, onde ψ está livre; (iv) utilizar $\mathcal{L}^\dagger \psi^\dagger$ para definir o operador adjunto de \mathcal{L} .

Com a finalidade de simplificar a notação, é utilizada a linearidade do operador de transporte \mathcal{L} , definido na Equação (3.3), para que o mesmo seja escrito conforme

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2 - \mathcal{L}_3, \quad (3.6)$$

onde \mathcal{L}_1 é tal que

$$\mathcal{L}_1 \psi = \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}), \quad (3.7)$$

\mathcal{L}_2 é definido por

$$\mathcal{L}_2 \psi = \sigma(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}), \quad (3.8)$$

e, por fim, \mathcal{L}_3 é escrito como

$$\mathcal{L}_3 \psi = \int_{\mathbb{S}'} \sigma_s(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}'. \quad (3.9)$$

O objetivo é a obtenção dos operadores adjuntos de \mathcal{L}_1 , \mathcal{L}_2 e \mathcal{L}_3 , de maneira a formular o operador adjunto de \mathcal{L} através da bilinearidade do produto interno definido na Equação (3.5).

Inicialmente, para a determinação de \mathcal{L}_1^\dagger é, primeiro, realizada a troca na ordem de integração para que se obtenha

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{L}_1 \psi, \psi^\dagger \rangle &= \int_{\mathbb{S}'} \int_D \mathcal{L}_1 \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) dV d\boldsymbol{\Omega} \\ &= \int_{\mathbb{S}'} \int_D \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) dV d\boldsymbol{\Omega} \\ &= \int_D \int_{\mathbb{S}'} (\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega} dV.\end{aligned}\quad (3.10)$$

Do cálculo vetorial [43], é aplicada a identidade

$$\nabla \cdot (\boldsymbol{\Omega} \psi \psi^\dagger) = (\nabla \cdot \boldsymbol{\Omega}) \psi \psi^\dagger + (\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi) \psi^\dagger + (\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi^\dagger) \psi, \quad (3.11)$$

para reescrever o termo $(\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi) \psi^\dagger$ na Equação (3.10) como

$$(\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi) \psi^\dagger = \nabla \cdot (\boldsymbol{\Omega} \psi \psi^\dagger) - (\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi^\dagger) \psi, \quad (3.12)$$

e, por consequência, obter

$$\begin{aligned}\langle \mathcal{L}_1 \psi, \psi^\dagger \rangle &= \int_D \int_{\mathbb{S}'} (\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega} dV \\ &= \int_D \int_{\mathbb{S}'} \nabla \cdot (\boldsymbol{\Omega} \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})) d\boldsymbol{\Omega} dV \\ &\quad - \int_D \int_{\mathbb{S}'} (\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})) \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega} dV.\end{aligned}\quad (3.13)$$

Na sequência, é utilizado o Teorema da Divergência [43] a fim de escrever

$$\int_D \int_{\mathbb{S}'} \nabla \cdot (\boldsymbol{\Omega} \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})) d\boldsymbol{\Omega} dV = \int_{\partial D} \int_{\mathbb{S}'} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Omega} \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega} d\Gamma, \quad (3.14)$$

onde \mathbf{n} representa o vetor normal ao bordo ∂V de V , no sentido exterior. Assim, ao definir o operador adjunto de \mathcal{L}_1 como

$$\mathcal{L}_1^\dagger \psi^\dagger = -\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}), \quad (3.15)$$

e o funcional

$$P[\psi, \psi^\dagger] = \int_{\partial V} \int_{\mathbb{S}'} \mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Omega} \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega} d\Gamma, \quad (3.16)$$

é possível, após trocar, novamente, a ordem das integrais, reescrever a Equação (3.13) como

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{L}_1 \psi, \psi^\dagger \rangle &= P[\psi, \psi^\dagger] + \int_D \int_{S'} (-\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega})) \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega} dV \\
&= P[\psi, \psi^\dagger] + \int_D \int_{S'} \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \mathcal{L}_1^\dagger \psi^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega} dV \\
&= P[\psi, \psi^\dagger] + \int_{S'} \int_D \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \mathcal{L}_1^\dagger \psi^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) d\boldsymbol{\Omega} dV \\
&= P[\psi, \psi^\dagger] + \langle \psi, \mathcal{L}_1^\dagger \psi^\dagger \rangle.
\end{aligned} \tag{3.17}$$

Os operadores \mathcal{L}_2 e o seu adjunto de \mathcal{L}_2^\dagger são idênticos. Tal fato pode ser verificado ao alterar a ordem do produto dentro das integrais em

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{L}_2 \psi, \psi^\dagger \rangle &= \int_{S'} \int_D \mathcal{L}_2 \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) dV d\boldsymbol{\Omega} \\
&= \int_{S'} \int_D \sigma(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) dV d\boldsymbol{\Omega} \\
&= \int_{S'} \int_D \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \sigma(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) dV d\boldsymbol{\Omega}.
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Se definido o operador adjunto de \mathcal{L}_2 como

$$\mathcal{L}_2^\dagger \psi^\dagger = \sigma(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}), \tag{3.19}$$

é possível reescrever a Equação (3.18) como

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{L}_2 \psi, \psi^\dagger \rangle &= \int_{S'} \int_D \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \sigma(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) dV d\boldsymbol{\Omega} \\
&= \int_{S'} \int_D \psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) \mathcal{L}_2^\dagger \psi^\dagger(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) dV d\boldsymbol{\Omega} \\
&= \langle \psi, \mathcal{L}_2^\dagger \psi^\dagger \rangle.
\end{aligned} \tag{3.20}$$

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

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{L}_3 \psi, \psi^\dagger \rangle &= \int_{\mathbb{S}'} \int_D \mathcal{L}_3 \psi(\mathbf{r}, \Omega) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega) dV d\Omega \\
&= \int_{\mathbb{S}'} \int_D \left(\int_{\mathbb{S}'} \sigma_s(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}, \Omega') d\Omega' \right) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega) dV d\Omega \\
&= \int_{\mathbb{S}'} \int_D \psi(\mathbf{r}, \Omega') \left(\int_{\mathbb{S}'} \sigma_s(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega) d\Omega \right) dV d\Omega' \\
&= \int_{\mathbb{S}'} \int_D \psi(\mathbf{r}, \Omega) \left(\int_{\mathbb{S}'} \sigma_s(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega') d\Omega' \right) dV d\Omega,
\end{aligned} \tag{3.21}$$

onde, na última igualdade da Equação (3.21), as variáveis mudas Ω e Ω' têm os seus rótulos alternados.

Se definido o operador adjunto de \mathcal{L}_3 como

$$\mathcal{L}_3^\dagger \psi^\dagger = \int_{\mathbb{S}'} \sigma_s(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega') d\Omega', \tag{3.22}$$

a Equação (3.22) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{L}_3 \psi, \psi^\dagger \rangle &= \int_{\mathbb{S}'} \int_V \mathcal{L}_3 \psi(\mathbf{r}, \Omega) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega) dV d\Omega \\
&= \int_{\mathbb{S}'} \int_V \psi(\mathbf{r}, \Omega) \mathcal{L}_3^\dagger \psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega) dV d\Omega \\
&= \langle \psi, \mathcal{L}_3^\dagger \psi^\dagger \rangle.
\end{aligned} \tag{3.23}$$

Vale destacar que, conforme estabelecidos pelas Equações (3.9) e (3.23), os operadores \mathcal{L}_3 e \mathcal{L}_3^\dagger são idênticos, sendo essa relação válida apenas para o caso monoenergético [30, 50, 105].

Por fim, pela bilinearidade do produto interno definido na Equação (3.5), é obtida

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{L}\psi, \psi^\dagger \rangle &= \langle (\mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2 - \mathcal{L}_3)\psi, \psi^\dagger \rangle = \langle \mathcal{L}_1\psi + \mathcal{L}_2\psi - \mathcal{L}_3\psi, \psi^\dagger \rangle \\
&= \langle \mathcal{L}_1\psi, \psi^\dagger \rangle + \langle \mathcal{L}_2\psi, \psi^\dagger \rangle - \langle \mathcal{L}_3\psi, \psi^\dagger \rangle \\
&= P[\psi, \psi^\dagger] + \langle \psi, \mathcal{L}_1^\dagger \psi^\dagger \rangle + \langle \psi, \mathcal{L}_2^\dagger \psi^\dagger \rangle - \langle \psi, \mathcal{L}_3^\dagger \psi^\dagger \rangle \\
&= P[\psi, \psi^\dagger] + \langle \psi, \mathcal{L}_1^\dagger \psi^\dagger + \mathcal{L}_2^\dagger \psi^\dagger - \mathcal{L}_3^\dagger \psi^\dagger \rangle \\
&= P[\psi, \psi^\dagger] + \langle \psi, (\mathcal{L}_1^\dagger + \mathcal{L}_2^\dagger - \mathcal{L}_3^\dagger) \psi^\dagger \rangle \\
&= P[\psi, \psi^\dagger] + \langle \psi, \mathcal{L}^\dagger \psi^\dagger \rangle,
\end{aligned} \tag{3.24}$$

estabelecendo, com isso, o operador \mathcal{L}^\dagger por

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}^\dagger \psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega) &= -\Omega \cdot \nabla \psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega) + \sigma(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega) \\
&\quad - \int_{\mathbb{S}'} \sigma_s(\mathbf{r}) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega', E') d\Omega',
\end{aligned} \tag{3.25}$$

onde ψ^\dagger é o fluxo angular adjunto. É destacado que a relação estabelecida na Equação (3.24) difere daquela buscada na Equação (3.4), uma vez que o termo $P[\psi, \psi^\dagger]$, definido na Equação (3.16), não é necessariamente nulo.

Dada uma fonte interna S^\dagger , a ser posteriormente definida nas aplicações, a adjunta da equação de transporte de nêutrons é, então, definida como

$$\mathcal{L}^\dagger \psi^\dagger = S^\dagger. \tag{3.26}$$

Adicionalmente, são impostas como condições de contorno da adjunta da equação de transporte uma variação homogênea das condições de contorno apresentadas na Equação (2.16), na qual são alternadas as direções de entrada e saídas de partículas. Assim, é escrita a equação

$$\psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega_{out}) = \rho \psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega_{in}). \tag{3.27}$$

Tal imposição permite simplificar o termo $P[\psi, \psi^\dagger]$ definido na Equação (3.16). Para isso, é preciso destacar que para cada direção de entrada Ω , o seu oposto, $-\Omega$, é

uma direção de saída. Com isso, inicialmente é separada em uma adição a integral sobre as direções em Ω nas direções de entrada e saída, conforme

$$\begin{aligned} P[\psi, \psi^\dagger] &= \int_{\partial V} \int_{\mathbb{S}'} \mathbf{n} \cdot \Omega \psi(\mathbf{r}, \Omega) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega) d\Omega d\Gamma \\ &= \int_{\partial V} \int_{\Omega \cdot \mathbf{n} < 0} \mathbf{n} \cdot \Omega \psi(\mathbf{r}, \Omega) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega) d\Omega d\Gamma \\ &\quad + \int_{\partial V} \int_{\Omega \cdot \mathbf{n} > 0} \mathbf{n} \cdot \Omega \psi(\mathbf{r}, \Omega) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega) d\Omega d\Gamma, \end{aligned} \quad (3.28)$$

onde, devido às hipóteses estabelecidas no Capítulo 2, as direções de entrada são aquelas nas quais $\Omega \cdot \mathbf{n} < 0$, com \mathbf{n} vetor unitário normal à ∂V , e as direções de saída são tais que $\Omega \cdot \mathbf{n} > 0$.

Para as direções de entrada, é possível aplicar as condições de contorno da equação de transporte, definidas na Equação (3.3), para escrever

$$\begin{aligned} \int_{\partial V} \int_{\Omega \cdot \mathbf{n} < 0} \mathbf{n} \cdot \Omega \psi(\mathbf{r}, \Omega) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega) d\Omega d\Gamma &= \int_{\partial V} \int_{\Omega \cdot \mathbf{n} < 0} \mathbf{n} \cdot \Omega \psi_b(\mathbf{r}, \Omega) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega) d\Omega d\Gamma \\ &\quad + \rho \int_{\partial V} \int_{\Omega \cdot \mathbf{n} < 0} \mathbf{n} \cdot \Omega \psi(\mathbf{r}, -\Omega) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega) d\Omega d\Gamma. \end{aligned} \quad (3.29)$$

Por outro lado, para as direções de saída, é possível utilizar as condições de contorno da adjunta da equação de transporte, definidas na Equação (3.27), para escrever

$$\int_{\partial V} \int_{\Omega \cdot \mathbf{n} > 0} \mathbf{n} \cdot \Omega \psi(\mathbf{r}, \Omega) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega) d\Omega d\Gamma = \rho \int_{\partial V} \int_{\Omega \cdot \mathbf{n} > 0} \mathbf{n} \cdot \Omega \psi(\mathbf{r}, \Omega) \psi^\dagger(\mathbf{r}, -\Omega) d\Omega d\Gamma. \quad (3.30)$$

A partir da mudança de variáveis $\Omega' = -\Omega$, é possível reescrever a Equação (3.30) como

$$\int_{\partial V} \int_{\Omega \cdot \mathbf{n} > 0} \mathbf{n} \cdot \Omega \psi(\mathbf{r}, \Omega) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega) d\Omega d\Gamma = -\rho \int_{\partial V} \int_{\Omega' \cdot \mathbf{n} < 0} \mathbf{n} \cdot \Omega' \psi(\mathbf{r}, -\Omega') \psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega') d\Omega' d\Gamma. \quad (3.31)$$

A substituição da Equação (3.31) na Equação (3.28) permite reescrever o termo $P[\psi, \psi^\dagger]$ como

$$P[\psi, \psi^\dagger] = \int_{\partial V} \int_{\Omega \cdot \mathbf{n} < 0} \mathbf{n} \cdot \Omega \psi_b(\mathbf{r}, \Omega) \psi^\dagger(\mathbf{r}, \Omega) d\Omega d\Gamma. \quad (3.32)$$

Na próxima seção, é obtida a adjunta da equação de transporte no contexto da geometria cartesiana unidimensional dependente da energia. Os passos para a sua obtenção são essencialmente os mesmos aplicados no caso bidimensional, com cuidados adicionais em decorrência da aproximação multigrupos considerada.

3.2 A Adjunta da Equação de Transporte em Geometria Cartesiana Unidimensional

Assim como no caso anterior, a aproximação multigrupos da equação de transporte em geometria cartesiana unidimensional, conforme desenvolvida no Capítulo 2, pode ser escrita como

$$\mathcal{L}\boldsymbol{\psi} = \mathbf{S}, \quad (3.33)$$

sujeita às condições de contorno nas direções de entrada

$$\boldsymbol{\psi}(0, \mu) = \mathbf{f}_1(\mu) + \rho_1 \boldsymbol{\psi}^\dagger(0, -\mu), \quad (3.34)$$

e

$$\boldsymbol{\psi}(Z, -\mu) = \mathbf{f}_2(\mu) + \rho_2 \boldsymbol{\psi}(Z, \mu), \quad (3.35)$$

para $\mu \in (0, 1]$, conforme estabelecido na Equação (2.16). A função vetorial $\boldsymbol{\psi}$ representa o fluxo angular de nêutrons

$$\boldsymbol{\psi}(z, \mu) = [\psi_1(z, \mu) \ \psi_2(z, \mu) \ \cdots \ \psi_G(z, \mu)]^T, \quad (3.36)$$

onde, para $g \in \{1, \dots, G\}$, ψ_g representa o fluxo angular de nêutrons do g -ésimo grupo de energia, \mathbf{S} é um termo fonte dado por

$$\mathbf{S}(z, \mu) = [S_1(z, \mu) \ S_2(z, \mu) \ \cdots \ S_G(z, \mu)]^T, \quad (3.37)$$

onde S_g é o termo fonte do grupo g .

O operador do transporte \mathcal{L} é definido por

$$\mathcal{L}\boldsymbol{\psi} = \mu \frac{\partial}{\partial z} \boldsymbol{\psi}(z, \mu) + \boldsymbol{\sigma}(z) \boldsymbol{\psi}(z, \mu) - \sum_{l=0}^L P_l(\mu) \boldsymbol{\sigma}_{s,l} \int_{-1}^1 P_l(\mu') \boldsymbol{\psi}(z, \mu') d\mu', \quad (3.38)$$

para $z \in [0, Z]$ e $\mu \in [-1, 1]$.

De maneira análoga ao procedimento realizado para a obtenção da adjunta do modelo monoenergético em geometria cartesiana bidimensional, será considerada uma função $\boldsymbol{\psi}^\dagger$ definida por

$$\boldsymbol{\psi}^\dagger(z, \mu) = [\psi_1^\dagger(z, \mu) \ \psi_2^\dagger(z, \mu) \ \cdots \ \psi_G^\dagger(z, \mu)]^T, \quad (3.39)$$

e será buscado um operador \mathcal{L}^\dagger tal que

$$\langle \mathcal{L}\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\psi}^\dagger \rangle = \langle \boldsymbol{\psi}, \mathcal{L}^\dagger \boldsymbol{\psi}^\dagger \rangle, \quad (3.40)$$

onde o produto interno $\langle \cdot, \cdot \rangle$ será definido de maneira diferente ao do caso bidimensional, conforme [117]

$$\langle \boldsymbol{f}, \boldsymbol{g} \rangle = \sum_{g=1}^G \int_{-1}^1 \int_0^Z f_g(z, \mu) g_g(z, \mu) dz d\mu. \quad (3.41)$$

De forma semelhante ao caso bidimensional, o operador \mathcal{L} é particionado conforme

$$\mathcal{L} = \mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2 - \sum_{l=0}^L \mathcal{L}_{3,l}, \quad (3.42)$$

onde \mathcal{L}_1 é tal que

$$\mathcal{L}_1 \boldsymbol{\psi}(z, \mu) = \mu \frac{\partial}{\partial z} \boldsymbol{\psi}(z, \mu), \quad (3.43)$$

por sua vez, \mathcal{L}_2 é definido por

$$\mathcal{L}_2 \boldsymbol{\psi}(z, \mu) = \boldsymbol{\sigma}(z) \boldsymbol{\psi}(z, \mu), \quad (3.44)$$

e, por fim, para $l = 0, \dots, L$, $\mathcal{L}_{3,l}$ é da forma

$$\mathcal{L}_{3,l} \boldsymbol{\psi}(z, \mu) = P_l(\mu) \boldsymbol{\sigma}_{s,l}(z) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \boldsymbol{\psi}(z, \mu') d\mu'. \quad (3.45)$$

Com isso, é possível obter \mathcal{L}_1^\dagger utilizando trocas nas ordens de integração e integração por partes, conforme

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{L}_1 \boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\psi}^\dagger \rangle &= \sum_{g=1}^G \int_{-1}^1 \int_0^Z \left(\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi_g(z, \mu) \right) \psi_g^\dagger(z, \mu) dz d\mu \\
&= \sum_{g=1}^G \int_{-1}^1 \int_0^Z \frac{\partial}{\partial z} \psi_g(z, \mu) [\mu \psi_g^\dagger(z, \mu)] dz d\mu \\
&= \sum_{g=1}^G \int_{-1}^1 \left(\mu \psi_g(z, \mu) \psi_g^\dagger(z, \mu) \Big|_{z=0}^Z - \int_0^Z \psi_g(z, \mu) \left(\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi_g^\dagger(z, \mu) \right) dz \right) d\mu \\
&= \sum_{g=1}^G \int_{-1}^1 \mu \psi_g(z, \mu) \psi_g^\dagger(z, \mu) \Big|_{z=0}^Z d\mu + \sum_{g=1}^G \int_{-1}^1 \int_0^Z \psi_g(z, \mu) \left(-\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi_g^\dagger(z, \mu) \right) dz d\mu \\
&= P[\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\psi}^\dagger] + \langle \boldsymbol{\psi}, \mathcal{L}_1^\dagger \boldsymbol{\psi}^\dagger \rangle,
\end{aligned} \tag{3.46}$$

onde o funcional $P[\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\psi}^\dagger]$ é definido por

$$P[\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\psi}^\dagger] = \sum_{g=1}^G \int_{-1}^1 \mu [\psi_g(0, \mu) \psi_g^\dagger(0, \mu) + \psi_g(Z, \mu) \psi_g^\dagger(Z, \mu)] d\mu, \tag{3.47}$$

e \mathcal{L}_1^\dagger é o operador adjunto de \mathcal{L} , escrito como

$$\mathcal{L}_1^\dagger \boldsymbol{\psi}^\dagger(z, \mu) = -\mu \frac{\partial}{\partial z} \boldsymbol{\psi}^\dagger(z, \mu). \tag{3.48}$$

Assim como no caso bidimensional, o operador \mathcal{L}_2^\dagger é idêntico à \mathcal{L}_2 , uma vez que

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{L}_2 \boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\psi}^\dagger \rangle &= \sum_{g=1}^G \int_{-1}^1 \int_0^Z [\sigma_g(z) \psi_g(z, \mu)] \psi_g^\dagger(z, \mu) dz d\mu \\
&= \sum_{g=1}^G \int_{-1}^1 \int_0^Z \psi_g(z, \mu) [\sigma_g(z) \psi_g^\dagger(z, \mu)] dz d\mu \\
&= \langle \boldsymbol{\psi}, \mathcal{L}_2^\dagger \boldsymbol{\psi}^\dagger \rangle.
\end{aligned} \tag{3.49}$$

Com isso, o operador \mathcal{L}_2 é escrito como

$$\mathcal{L}_2^\dagger \boldsymbol{\psi}^\dagger(z, \mu) = \boldsymbol{\sigma}(z) \boldsymbol{\psi}^\dagger(z, \mu). \tag{3.50}$$

Para $l \in \{0, \dots, L\}$, o operador adjunto de $\mathcal{L}_{3,l}$ requer alguns cuidados com respeito a ordem dos índices das seções de choque de espalhamento. Assim, é possível escrever

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{L}_3 \boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\psi}^\dagger \rangle &= \sum_{g=1}^G \int_{-1}^1 \int_0^Z \left(P_l(\mu) \sum_{g'=1}^G \sigma_{s,g',g,l}(z) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi_{g'}(z, \mu') d\mu' \right) \psi_g^\dagger(z, \mu) dz d\mu \\
&= \sum_{g=1}^G \sum_{g'=1}^G \sigma_{s,g',g,l}(z) \int_0^Z \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 P_l(\mu) \left(P_l(\mu') \psi_{g'}(z, \mu') \right) \psi_g^\dagger(z, \mu) d\mu' d\mu dz \\
&= \sum_{g'=1}^G \sum_{g=1}^G \sigma_{s,g',g,l}(z) \int_0^Z \int_{-1}^1 \int_{-1}^1 P_l(\mu') \left(P_l(\mu) \psi_g^\dagger(z, \mu) \right) \psi_{g'}(z, \mu') d\mu d\mu' dz \\
&= \sum_{g'=1}^G \int_{-1}^1 \int_0^Z \psi_{g'}(z, \mu') \left(P_l(\mu') \sum_{g=1}^G \sigma_{s,g',g,l}(z) \int_{-1}^1 P_l(\mu) \psi_g^\dagger(z, \mu) d\mu \right) dz d\mu' \\
&= \sum_{g=1}^G \int_{-1}^1 \int_0^Z \psi_g(z, \mu) \left(P_l(\mu) \sum_{g'=1}^G \sigma_{s,g,g',l}(z) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi_{g'}^\dagger(z, \mu') d\mu' \right) dz d\mu \\
&= \langle \boldsymbol{\psi}, \mathcal{L}_3^\dagger \boldsymbol{\psi}^\dagger \rangle,
\end{aligned} \tag{3.51}$$

onde vale destacar que, enquanto $\sigma_{s,g',g,l}$ é o g -ésimo elemento da g' -ésima linha da matriz $\boldsymbol{\sigma}_{s,l}$, $\sigma_{s,g,g',l}$ é o g -ésimo elemento da g' -ésima linha da matriz transposta $\boldsymbol{\sigma}_{s,l}^T$. Com isso, o operador adjunto de $\mathcal{L}_{3,l}$ é escrito como

$$\mathcal{L}_{3,l}^\dagger \boldsymbol{\psi}(z, \mu) = P_l(\mu) \boldsymbol{\sigma}_l^T(z) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \boldsymbol{\psi}^\dagger(z, \mu') d\mu', \tag{3.52}$$

para $l \in \{0, \dots, L\}$.

Uma vez encontrados os operadores adjuntos \mathcal{L}_1^\dagger , \mathcal{L}_2^\dagger e \mathcal{L}_3^\dagger , é possível obter o operador adjunto de \mathcal{L} por meio da bilinearidade do produto interno definido na

Equação (3.41). Com isso,

$$\begin{aligned}
\langle \mathcal{L}\psi, \psi^\dagger \rangle &= \left\langle \left(\mathcal{L}_1 + \mathcal{L}_2 - \sum_{l=0}^L \mathcal{L}_{3,l} \right) \psi, \psi^\dagger \right\rangle \\
&= \left\langle \mathcal{L}_1\psi + \mathcal{L}_2\psi - \sum_{l=0}^L \mathcal{L}_{3,l}\psi, \psi^\dagger \right\rangle \\
&= \langle \mathcal{L}_1\psi, \psi^\dagger \rangle + \langle \mathcal{L}_2\psi, \psi^\dagger \rangle - \sum_{l=0}^L \langle \mathcal{L}_{3,l}\psi, \psi^\dagger \rangle \\
&= P[\psi, \psi^\dagger] + \langle \psi, \mathcal{L}_1^\dagger \psi^\dagger \rangle + \langle \psi, \mathcal{L}_2^\dagger \psi^\dagger \rangle - \sum_{l=0}^L \langle \psi, \mathcal{L}_{3,l}^\dagger \psi^\dagger \rangle \quad (3.53) \\
&= P[\psi, \psi^\dagger] + \left\langle \psi, \mathcal{L}_1^\dagger \psi^\dagger + \mathcal{L}_2^\dagger \psi^\dagger - \sum_{l=0}^L \mathcal{L}_{3,l}^\dagger \psi^\dagger \right\rangle \\
&= P[\psi, \psi^\dagger] + \left\langle \psi, \left(\mathcal{L}_1^\dagger + \mathcal{L}_2^\dagger - \sum_{l=0}^L \mathcal{L}_{3,l}^\dagger \right) \psi^\dagger \right\rangle \\
&= P[\psi, \psi^\dagger] + \langle \psi, \mathcal{L}^\dagger \psi^\dagger \rangle,
\end{aligned}$$

de onde decorre que o operador \mathcal{L}^\dagger pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
\mathcal{L}^\dagger \psi^\dagger(z, \mu) &= -\mu \frac{\partial}{\partial z} \psi^\dagger(z, \mu) + \sigma(z) \psi^\dagger(z, \mu) \\
&\quad - \sum_{l=0}^L P_l(\mu) \sigma_{s,l}^T(z) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \psi^\dagger(z, \mu') d\mu'. \quad (3.54)
\end{aligned}$$

Dada uma fonte S^\dagger , a ser posteriormente escolhida nas aplicações, a adjunta da equação de transporte de nêutrons é, então, definida como

$$\mathcal{L}^\dagger \psi^\dagger = S^\dagger. \quad (3.55)$$

Por fim, são impostas condições de contorno para a adjunta da equação de transporte semelhantes àsquelas apresentadas nas Equações (3.34) e (3.35), contudo homogêneas e com as direções alternadas, conforme

$$\psi^\dagger(0, -\mu) = \rho_1 \psi^\dagger(0, \mu), \quad (3.56)$$

e

$$\psi^\dagger(Z, \mu) = \rho_2 \psi^\dagger(Z, -\mu). \quad (3.57)$$

Tal imposição de condições de contorno permite a simplificação do termo $P[\psi, \psi^\dagger]$ definido na Equação (3.47). Com isso, é possível escrever

$$P[\psi, \psi^\dagger] = - \sum_{g=1}^G \int_0^1 \mu [f_{1,g}(\mu) \psi_g^\dagger(0, \mu) + f_{2,g}(\mu) \psi_g^\dagger(Z, -\mu)] d\mu. \quad (3.58)$$

Vale destacar que os operadores adjuntos obtidos nas formulações bidimensional e unidimensional são bastante semelhantes aos operadores originais, fato este que sugere a extensão dos métodos empregados na resolução da equação de transporte à sua adjunta.

No próximo capítulo, é desenvolvida a solução ADO-Nodal para o modelo em ordenadas discretas da adjunta da equação de transporte de nêutrons em geometria cartesiana bidimensional.

4 MÉTODO ADO-NODAL PARA A ADJUNTA DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE

Neste capítulo é feita a dedução do método ADO-Nodal para a equação adjunta à equação de transporte de nêutrons. O modelo considerado é aquele em geometria cartesiana bidimensional, monoenergético com espalhamento isotrópico, conforme discutido no Capítulo 3.

De acordo com a Equação (3.26), a adjunta da equação de transporte em geometria cartesiana bidimensional pode ser escrita como

$$\begin{aligned} -\eta \frac{\partial}{\partial x} \psi^\dagger(x, y, \boldsymbol{\Omega}) - \xi \frac{\partial}{\partial x} \psi^\dagger(x, y, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma(x, y) \psi^\dagger(x, y, \boldsymbol{\Omega}) \\ = \sigma_s(x, y) \int_{\mathcal{S}'} \psi^\dagger(x, y, \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' + S^\dagger(x, y, \boldsymbol{\Omega}), \end{aligned} \quad (4.1)$$

com (x, y) no interior de D . Neste trabalho, conforme discutido no Capítulo 2, o conjunto D é um retângulo no plano com lados paralelos aos eixos ordenados, isto é, $D = [0, X] \times [0, Y]$, para X e Y números reais positivos.

Adicionalmente, são introduzidas as partições $\{0 = x_1 < x_2 < \dots < x_{n_x} < x_{n_x+1} = X\}$ e $\{Y = y_1 > y_2 > \dots > y_{n_y} > y_{n_y+1} = 0\}$ dos intervalos $[0, X]$ e $[0, Y]$, respectivamente. Além disso, é assumido que as seções de choque, σ e σ_s , são constantes em cada retângulo $D_{p,q} = [x_q, x_{q+1}] \times [y_{p+1}, y_p]$ em D . Em outras palavras, para cada $p \in \{1, \dots, n_y\}$ e para cada $q \in \{1, \dots, n_x\}$, $\sigma(x, y) = \sigma_{p,q}$ e $\sigma_s(x, y) = \sigma_{s,p,q}$, com $(x, y) \in D_{p,q}$, onde $\sigma_{p,q}$ e $\sigma_{s,p,q}$ são constantes que representam, respectivamente, o valor da seção de choque total e de espalhamento no retângulo $D_{p,q}$. A Figura 4.1 exemplifica a configuração das partições, conforme a indexação estabelecida.

Além disso, em decorrência da geometria de D , é possível reescrever as condições de contorno definidas na Equação (3.27) como

$$\psi^\dagger(0, y, \boldsymbol{\Omega}_{out}) = \rho_1 \psi^\dagger(0, y, \boldsymbol{\Omega}_{in}), \quad (4.2)$$

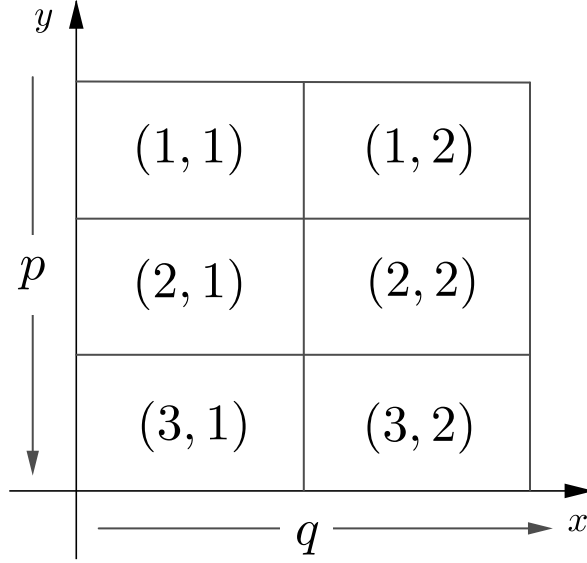


Figura 4.1: Exemplo de configuração de uma malha com $n_x = 2$ e $n_y = 3$.

e

$$\psi^\dagger(X, y, \mathbf{\Omega}_{out}) = \rho_2 \psi^\dagger(X, y, \mathbf{\Omega}_{in}), \quad (4.3)$$

para $x = 0$ e $x = X$, isto é, nos extremos da esquerda e nos da direita de D , e

$$\psi^\dagger(x, 0, \mathbf{\Omega}_{out}) = \rho_3 \psi^\dagger(x, 0, \mathbf{\Omega}_{in}), \quad (4.4)$$

e

$$\psi^\dagger(x, Y, \mathbf{\Omega}_{out}) = \rho_4 \psi^\dagger(x, Y, \mathbf{\Omega}_{in}). \quad (4.5)$$

para $y = 0$ e $y = Y$, ou seja, nos extremos de baixo e nos de cima de D .

Os números ρ_1 , ρ_2 , ρ_3 e ρ_4 representam os coeficientes de reflexão especular, conforme a Equação (3.27) e são, neste trabalho, assumidos como constantes tais que $\rho_i \in [0, 1]$, para $i \in \{1, 2, 3, 4\}$.

Por fim, embora as seções de choque possam ser descontínuas na interface entre regiões distintas de D , o número esperado de nêutrons não pode ser alterado por simplesmente cruzar a interface entre duas regiões com diferentes propriedades físicas. Dessa forma, é imposta a continuidade do fluxo angular adjunto nas interfaces.

Na próxima seção, são utilizadas integrais nas variáveis x e y para que sejam obtidas equações para os fluxos médios em cada uma das regiões $D_{p,q}$ do domínio D .

4.1 Equações para os Fluxos Médios Locais

Nesta seção, são estabelecidas as equações para os fluxos médios da Equação (4.1) para cada uma das regiões $D_{p,q}$. Para isso, é, primeiro, assumida a aproximação em ordenadas discretas da Equação (4.1), de forma a escrever [30, 82, 105]

$$\begin{aligned}
 -\eta_m \frac{\partial}{\partial x} \psi_{p,q}^\dagger(x,y,\mathbf{\Omega}_m) - \xi_m \frac{\partial}{\partial y} \psi_{p,q}^\dagger(x,y,\mathbf{\Omega}_m) + \sigma_{p,q} \psi_{p,q}^\dagger(x,y,\mathbf{\Omega}_m) = \\
 \sigma_{s,p,q} \sum_{n=1}^M w_n \psi_{p,q}^\dagger(x,y,\mathbf{\Omega}_n) + S_{p,q}^\dagger(x,y,\mathbf{\Omega}_m),
 \end{aligned} \tag{4.6}$$

para $m \in \{1, \dots, M\}$, onde $\psi_{p,q}^\dagger$ e $S_{p,q}^\dagger$ representam, respectivamente, as restrições do fluxo angular adjunto e do termo fonte S^\dagger à região $D_{p,q}$.

Cada um dos pares $\mathbf{\Omega}_m = (\eta_m, \xi_m)$ representa a projeção de um nó da conhecida quadratura LQ_N no plano $\eta O \xi$ e w_m é o respectivo peso associado ao nó [82, 105]. Com o uso de tal regra de quadratura, o número total M de ordenadas discretas consideradas é dado pela relação $M = N(N + 2)/2$ [82]. Para o cálculo dos fluxos médios, são considerados dois ordenamentos para os nós e para os pesos da quadratura LQ_N , um para a direção y e outro para a x .

4.1.1 Equações para os Fluxos Médios na Variável y

Para a obtenção das equações do fluxo médio na variável y , é considerado o seguinte ordenamento para as direções da regra de quadratura [21]:

- Para $m = 1, \dots, M/4$, direções nas quais $\eta_m > 0$ e $\xi_m > 0$;

- Para $m = M/4 + 1, \dots, M/2$, direções nas quais $\eta_m > 0$ e $\xi_m < 0$;
- Para $m = M/2 + 1, \dots, 3M/4$, direções nas quais $\eta_m < 0$ e $\xi_m > 0$;
- Para $m = 3M/4 + 1, \dots, M$, direções nas quais $\eta_m < 0$ e $\xi_m < 0$.

A Figura 4.2 apresenta o ordenamento da quadratura para $M = 12$.

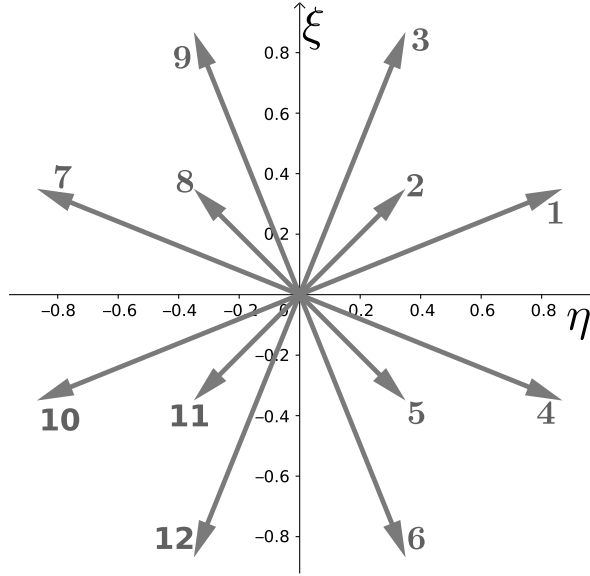


Figura 4.2: Ordenamento da regra de quadratura para os fluxos médios na variável y .

Ao considerar o ordenamento escolhido, é possível reescrever a Equação (4.6) como [21]

$$\begin{aligned}
& -\eta_m \frac{\partial}{\partial x} \psi_{p,q}^\dagger(x,y,\mathbf{\Omega}_m) + \sigma_{p,q} \psi_{p,q}^\dagger(x,y,\mathbf{\Omega}_m) \\
& - \sigma_{s,p,q} \sum_{n=1}^{M/2} w_n [\psi_{p,q}^\dagger(x,y,\mathbf{\Omega}_n) + \psi_{p,q}^\dagger(x,y,\mathbf{\Omega}_{n+M/2})] \quad (4.7) \\
& = \xi_m \frac{\partial}{\partial y} \psi_{p,q}^\dagger(x,y,\mathbf{\Omega}_m) + S_{p,q}^\dagger(x,y,\mathbf{\Omega}_m),
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
& \eta_m \frac{\partial}{\partial x} \psi_{p,q}^\dagger(x, y, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) + \sigma_{p,q} \psi_{p,q}^\dagger(x, y, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) \\
& \quad - \sigma_{s,p,q} \sum_{n=1}^{M/2} w_n [\psi_{p,q}^\dagger(x, y, \mathbf{\Omega}_n) + \psi_{p,q}^\dagger(x, y, \mathbf{\Omega}_{n+M/2})] \quad (4.8) \\
& = \xi_m \frac{\partial}{\partial y} \psi_{p,q}^\dagger(x, y, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) + S_{p,q}^\dagger(x, y, \mathbf{\Omega}_m),
\end{aligned}$$

para $m \in \{1, \dots, M/2\}$. É destacada aqui a utilização do fato de que $\xi_m = \xi_{m+M/2}$, conforme pode ser verificado na Figura 4.2, para manter as Equações (4.7) e (4.8) consistentes com a Equação (4.6).

O fluxo médio com respeito à variável y na região $D_{p,q}$ é definido por meio de

$$\psi_{y,p,q}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{1}{h_{y,p,q}} \int_{y_{p+1}}^{y_p} \psi_{p,q}^\dagger(x, y, \mathbf{\Omega}_m) dy, \quad (4.9)$$

para $p \in \{1, \dots, n_y\}$, $q \in \{1, \dots, n_x\}$ e $m \in \{1, \dots, M\}$, onde $h_{y,p,q}$ é o comprimento do intervalo $[y_{p+1}, y_p]$, isto é,

$$h_{y,p,q} = y_p - y_{p+1}. \quad (4.10)$$

Na sequência, as Equações (4.7) e (4.8) são integradas com respeito à variável y no intervalo $[y_{p+1}, y_p]$, multiplicadas por $1/h_{y,p,q}$, e, por fim, após a aplicação do teorema fundamental do cálculo no termo com a derivada parcial em y , é obtido o sistema de equações

$$\begin{aligned}
& -\eta_m \frac{d}{dx} \psi_{y,p,q}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_m) + \sigma_{p,q} \psi_{y,p,q}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_m) \\
& \quad - \sigma_{s,p,q} \sum_{n=1}^{M/2} w_n [\psi_{y,p,q}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_n) + \psi_{y,p,q}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_{n+M/2})] = S_{y,p,q}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_m), \quad (4.11)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
& \eta_m \frac{d}{dx} \psi_{y,p,q}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) + \sigma_{p,q} \psi_{y,p,q}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) \\
& \quad - \sigma_{s,p,q} \sum_{n=1}^{M/2} w_n [\psi_{y,p,q}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_n) + \psi_{y,p,q}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_{n+M/2})] = S_{y,p,q}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}), \quad (4.12)
\end{aligned}$$

onde $S_{y,p,q}^\dagger$ é tal que

$$S_{y,p,q}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{\xi_m}{h_{y,p,q}} [\psi_{p,q}^\dagger(x, y_p, \mathbf{\Omega}_m) - \psi_{p,q}^\dagger(x, y_{p+1}, \mathbf{\Omega}_m)] + S_y^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_m), \quad (4.13)$$

com

$$S_y^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{1}{h_{y,p,q}} \int_{y_{p+1}}^{y_p} S_{p,q}^\dagger(x, y, \mathbf{\Omega}_m) dy. \quad (4.14)$$

É importante destacar a dependência das Equações (4.11) e (4.12) sobre o fluxo angular (não médio) nas fronteiras $y = y_{p+1}$ e $y = y_p$ do domínio, conforme observado na Equação (4.13). Os termos $\psi_{p,q}^\dagger(x, y_p, \mathbf{\Omega}_m)$ e $\psi_{p,q}^\dagger(x, y_{p+1}, \mathbf{\Omega}_m)$, na Equação (4.13), são os chamados termos de fuga transversal em y . Tais termos são aqui tratados como parte da fonte de partículas das Equações (4.11) e (4.12), contudo são desconhecidos, e carecem de hipóteses adicionais para o seu tratamento.

4.1.2 Equações para os Fluxos Médios na Variável x

De maneira semelhante, para a obtenção das equações do fluxo médio na variável x , também é considerado um ordenamento especial para as direções da regra de quadratura. O ordenamento proposto para o fluxo médio na variável x é distinto do caso anterior, a saber [21]:

- Para $m = 1, \dots, M/4$, direções nas quais $\eta_m > 0$ e $\xi_m > 0$;
- Para $m = M/4 + 1, \dots, M/2$, direções nas quais $\eta_m < 0$ e $\xi_m > 0$;
- Para $m = M/2 + 1, \dots, 3M/4$, direções nas quais $\eta_m > 0$ e $\xi_m < 0$;
- Para $m = 3M/4 + 1, \dots, M$, direções nas quais $\eta_m < 0$ e $\xi_m < 0$.

A Figura 4.3 apresenta o ordenamento da quadratura para $M = 12$.

O fluxo médio na variável x na região $D_{p,q}$ do domínio é escrito como

$$\psi_{x,p,q}^\dagger(y, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{1}{h_{x,p,q}} \int_{x_q}^{x_{q+1}} \psi_{p,q}^\dagger(x, y, \mathbf{\Omega}_m) dx, \quad (4.15)$$

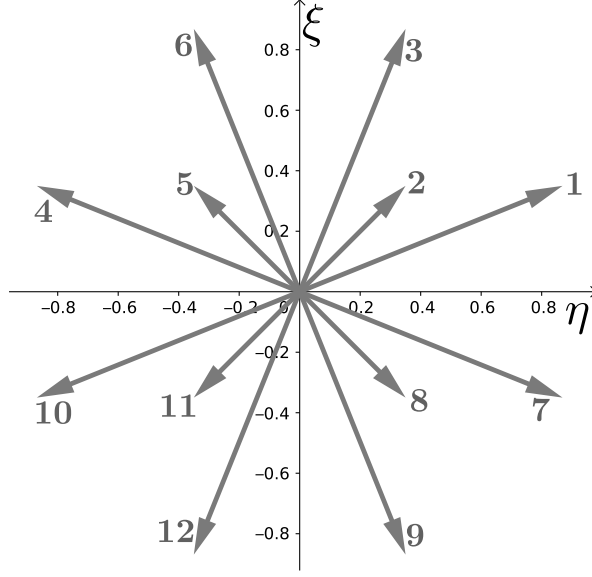


Figura 4.3: Ordenamento da regra de quadratura para os fluxos médios na variável x .

para $m \in \{1, \dots, M\}$, onde $h_{x,p,q}$ é o comprimento do intervalo $[x_q, x_{q+1}]$, isto é,

$$h_{x,p,q} = x_{q+1} - x_q. \quad (4.16)$$

Através do novo ordenamento estabelecido, é possível proceder de maneira análoga ao que foi feito para a obtenção das Equações (4.11) e (4.12) para, com isso, escrever [21]

$$\begin{aligned} & -\xi_m \frac{d}{dy} \psi_{x,p,q}^\dagger(y, \Omega_m) + \sigma_{p,q} \psi_{x,p,q}^\dagger(y, \Omega_m) \\ & - \sigma_{s,p,q} \sum_{n=1}^{M/2} w_n [\psi_{x,p,q}^\dagger(y, \Omega_n) + \psi_{x,p,q}^\dagger(y, \Omega_{n+M/2})] = S_{x,p,q}^\dagger(y, \Omega_m), \end{aligned} \quad (4.17)$$

e

$$\begin{aligned} & \xi_m \frac{d}{dy} \psi_{x,p,q}^\dagger(y, \Omega_{m+M/2}) + \sigma_{p,q} \psi_{x,p,q}^\dagger(y, \Omega_{m+M/2}) \\ & - \sigma_{s,p,q} \sum_{n=1}^{M/2} w_n [\psi_{x,p,q}^\dagger(y, \Omega_n) + \psi_{x,p,q}^\dagger(y, \Omega_{n+M/2})] = S_{x,p,q}^\dagger(y, \Omega_{m+M/2}), \end{aligned} \quad (4.18)$$

onde

$$S_{x,p,q}^\dagger(y, \Omega_m) = \frac{\eta_m}{h_{x,p,q}} [\psi_{p,q}^\dagger(x_{q+1}, y, \Omega_m) - \psi_{p,q}^\dagger(x_q, y, \Omega_m)] + S_x^\dagger(y, \Omega_m), \quad (4.19)$$

para $m \in \{1, \dots, M\}$, com

$$S_x^\dagger(y, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{1}{h_{x,p,q}} \int_{x_q}^{x_{q+1}} S_{p,q}^\dagger(x, y, \mathbf{\Omega}_m) dx. \quad (4.20)$$

Assim como na Equação (4.13), a Equação (4.19) contém os chamados termos de fuga transversal, no entanto, na variável x , os quais também são tratados como parte da fonte de partículas das Equações (4.17) e (4.18), embora desconhecidos.

4.2 Soluções Homogêneas para as Equações dos Fluxos

Médios Locais

As Equações (4.11), (4.12), (4.17) e (4.18) são lineares e, portanto, é possível escrever a solução destas como uma superposição da solução das suas soluções homogêneas com soluções particulares. Assim, nesta seção, serão estabelecidas as soluções para as versões homogêneas das equações dos fluxos médios obtidas na seção anterior. Para isso, é lembrado que os termos de fuga transversal são considerados como parte da fonte das Equações (4.13) e (4.19), sendo posteriormente tratados quando forem necessárias as soluções particulares.

4.2.1 Solução Homogênea para as Equações dos Fluxos Médios Locais em y

Inicialmente, são consideradas as versões homogêneas das equações dos fluxos médios locais na variável y , apresentadas nas Equações (4.11) e (4.12). Ademais, em decorrência dos procedimentos aqui aplicados serem idênticos para quaisquer subíndices p e q , os mesmos são suprimidos. Com isso, as equações homogêneas

são escritas na forma

$$\begin{aligned}
& -\eta_m \frac{d}{dx} \psi_{y,h}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_m) + \sigma \psi_{y,h}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_m) \\
& - \sigma_s \sum_{n=1}^{M/2} w_n \left[\psi_{y,h}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_n) + \psi_{y,h}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_{n+M/2}) \right] = 0,
\end{aligned} \tag{4.21}$$

e

$$\begin{aligned}
& \eta_m \frac{d}{dx} \psi_{y,h}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) + \sigma \psi_{y,h}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) \\
& - \sigma_s \sum_{n=1}^{M/2} w_n \left[\psi_{y,h}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_n) + \psi_{y,h}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_{n+M/2}) \right] = 0,
\end{aligned} \tag{4.22}$$

para $x \in (x_a, x_b)$ arbitrário. Além disso, a função $\psi_{y,h}^\dagger$ representa a solução homogênea do fluxo adjunto médio na variável y . E, ainda, as seções de choque σ e σ_s são constantes para $x \in (x_a, x_b)$.

Na sequência, são buscadas soluções espectrais para as Equações (4.21) e (4.22) na forma

$$\psi_{y,h}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_m) = \phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m) e^{-x/\nu}, \tag{4.23}$$

para $m \in \{1, \dots, M\}$ e $x \in (x_a, x_b)$, onde ν e $\phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m)$ representam, respectivamente, uma constante de separação e uma autofunção ainda a serem determinadas.

A substituição da Equação (4.23) nas Equações (4.21) e (4.22) tem como consequência, após algumas simplificações, o sistema de equações algébricas

$$\left(\sigma + \frac{\eta_m}{\nu} \right) \phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m) - \sigma_s \sum_{n=1}^{M/2} w_n \left(\phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_n) + \phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{n+M/2}) \right) = 0, \tag{4.24}$$

e

$$\left(\sigma - \frac{\eta_m}{\nu} \right) \phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) - \sigma_s \sum_{n=1}^{M/2} w_n \left(\phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_n) + \phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{n+M/2}) \right) = 0, \tag{4.25}$$

para $m \in \{1, \dots, M/2\}$.

Para o próximo passo, é conveniente definir a soma

$$U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m) = \phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m) + \phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}), \tag{4.26}$$

e a diferença

$$V_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m) = \phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m) - \phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}), \quad (4.27)$$

das autofunções $\phi(\nu, \mathbf{\Omega}_m)$ e $\phi(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+M/2})$ [21].

Com isso, ao somar a Equação (4.24) com a Equação (4.25), é escrita a expressão

$$\frac{\eta_m}{\nu} V_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m) + \sigma U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m) = 2\sigma_s \sum_{n=1}^{M/2} w_n U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_n), \quad (4.28)$$

de onde, ao isolar $V_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m)$, é obtida

$$V_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m) = -\frac{\nu\sigma}{\eta_m} U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m) + \frac{2\nu\sigma_s}{\eta_m} \sum_{n=1}^{M/2} w_n U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_n). \quad (4.29)$$

Ao subtrair a Equação (4.25) da Equação (4.24), é possível proceder de maneira semelhante ao que foi feito na Equação (4.28) a fim de escrever

$$\frac{\eta_m}{\nu} U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m) + \sigma V_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m) = 0, \quad (4.30)$$

de onde decorre que

$$V_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m) = -\frac{\eta_m}{\sigma\nu} U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m). \quad (4.31)$$

Ao remover $V_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m)$ nas Equações (4.29) e (4.31) é, então, obtida

$$\frac{\sigma^2}{\eta_m^2} U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m) - \frac{2\sigma\sigma_s}{\eta_m^2} \sum_{n=1}^{M/2} w_n U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_n) = \frac{1}{\nu^2} U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m), \quad (4.32)$$

para $m \in \{1, \dots, M/2\}$.

Algumas definições são necessárias para os próximos passos [21]. Dessa forma, $\mathbf{U}_y(\nu)$ é um vetor de $M/2$ componentes escrito como

$$\mathbf{U}_y(\nu) = [U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_1) \ U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_2) \ \cdots \ U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{M/2})]^T. \quad (4.33)$$

Além disso, são introduzidas as matrizes de ordem $M/2$

$$\mathbf{D}_y = \text{diag} \left(\cdots, \frac{\sigma^2}{\eta_m^2}, \cdots \right), \quad (4.34)$$

e

$$\mathbf{A}_y = (A_{y,m,n}), \quad (4.35)$$

cujas componentes, $A_{y,m,n}$, são dadas por

$$A_{y,m,n} = \frac{2w_n\sigma\sigma_s}{\eta_m^2}. \quad (4.36)$$

Por meio das definições feitas nas Equações (4.33), (4.34) e (4.35), é possível reescrever a Equação (4.32) de maneira vetorial, obtendo, com isso, o problema de autovalores e autovetores

$$(\mathbf{D}_y - \mathbf{A}_y) \mathbf{U}_y(\lambda) = \lambda \mathbf{U}_y(\lambda), \quad (4.37)$$

onde o autovalor λ é tal que $\lambda = \frac{1}{\nu^2}$.

Uma vez obtido um autovalor λ e um autovetor \mathbf{U}_y , é possível calcular autofunções $\phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m)$ e $\phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+M/2})$ por meio das relações

$$\phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m) + V_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m)}{2} = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\eta_m}{2\sigma\nu} \right) U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m), \quad (4.38)$$

e

$$\phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) = \frac{U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m) - V_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m)}{2} = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\eta_m}{2\sigma\nu} \right) U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m), \quad (4.39)$$

para $m \in \{1, \dots, M/2\}$, onde a Equação (4.31) foi utilizada para escrever $V_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m)$ em função de $U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m)$.

É preciso destacar que, devido à definição dos autovalores na Equação (4.37), as constantes de separação são obtidas em pares ν e $-\nu$. Além disso, a substituição de $-\nu$ na Equação (4.38) tem como consequência uma relação muito útil entre as autofunções, a saber,

$$\begin{aligned} \phi_y(-\nu, \mathbf{\Omega}_m) &= \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\eta_m}{2\sigma(-\nu)} \right) U_y(-\nu, \mathbf{\Omega}_m) \\ &= \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\eta_m}{2\sigma\nu} \right) U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m) = \phi_y(\nu, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}), \end{aligned} \quad (4.40)$$

a própria Equação (4.39), uma vez que $U_y(-\nu, \mathbf{\Omega}_m) = U_y(\nu, \mathbf{\Omega}_m)$, novamente em decorrência da Equação (4.37).

Por fim, dado um conjunto completo de autovalores λ_j , para $j \in \{1, \dots, M/2\}$, são obtidos pares de constantes de separação $\pm\nu_j$. Com isso, as soluções homogêneas das Equações (4.21) e (4.22) podem ser escritas como uma combinação linear das autofunção, isto é,

$$\begin{aligned} \psi_{y,h}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_m) &= \sum_{j=1}^{M/2} \{A_j \phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(x-x_a)/\nu_j} \\ &\quad + A_{j+M/2} \phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(x_b-x)/\nu_j}\}, \end{aligned} \quad (4.41)$$

e

$$\begin{aligned} \psi_{y,h}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) &= \sum_{j=1}^{M/2} \{A_j \phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(x-x_a)/\nu_j} \\ &\quad + A_{j+M/2} \phi_y(\nu_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(x_b-x)/\nu_j}\}, \end{aligned} \quad (4.42)$$

para $m \in \{1, \dots, M/2\}$ e $x \in (x_a, x_b)$, onde a Equação (4.40) foi utilizada para simplificar a formulação. Além disso, com o objetivo de evitar possíveis problemas de *overflow* numérico no posterior cálculo das exponenciais nas Equações (4.41) e (4.42), as mesmas foram transladadas [14].

4.2.2 Solução Homogênea para as Equações dos Fluxos Médios Locais em x

O processo para a obtenção da solução da versão homogênea das equações dos fluxos médios locais na variável x , Equações (4.17) e (4.18), é análogo ao que foi feito para os fluxos médios locais na variável y . Dessa maneira, para uma região arbitrária do domínio, com $y \in (y_a, y_b)$, são escritas

$$\begin{aligned} \psi_{x,h}^\dagger(y, \mathbf{\Omega}_m) &= \sum_{j=1}^{M/2} \{B_j \phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(y-y_a)/\gamma_j} \\ &\quad + B_{j+M/2} \phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(y_b-y)/\gamma_j}\}, \end{aligned} \quad (4.43)$$

e

$$\begin{aligned} \psi_{x,h}^\dagger(y, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) &= \sum_{j=1}^{M/2} \{B_j \phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) e^{-(y-y_a)/\gamma_j} \\ &\quad + B_{j+M/2} \phi_x(\gamma_j, \mathbf{\Omega}_m) e^{-(y_b-y)/\gamma_j}\}, \end{aligned} \quad (4.44)$$

para $m \in \{1, \dots, M/2\}$ e $y \in (y_a, y_b)$.

Para a obtenção das autofunções nas Equações (4.43) e (4.44), são calculadas

$$\phi_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_m) = \frac{1}{2} \left(1 - \frac{\xi_m}{2\sigma\gamma} \right) U_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_m), \quad (4.45)$$

e

$$\phi_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) = \frac{1}{2} \left(1 + \frac{\xi_m}{2\sigma\gamma} \right) U_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_m), \quad (4.46)$$

para $m \in \{1, \dots, M/2\}$.

As constantes de separação γ e autovetores $U_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_m)$ nas Equações (4.45) e (4.46) são provenientes do problema de autovalores

$$(\mathbf{D}_x - \mathbf{A}_x) \mathbf{U}_x(\lambda) = \lambda \mathbf{U}_x(\lambda), \quad (4.47)$$

com $\lambda = \frac{1}{\gamma^2}$, onde o vetor de $M/2$ componentes \mathbf{U}_x é dado por

$$\mathbf{U}_x(\gamma) = [U_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_1) \ U_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_2) \ \dots \ U_x(\gamma, \mathbf{\Omega}_{M/2})]^T, \quad (4.48)$$

e as matrizes D_x e A_x , de ordem $M/2$, são definidas por

$$\mathbf{D}_x = \text{diag} \left(\dots, \frac{\sigma^2}{\xi_m^2}, \dots \right), \quad (4.49)$$

e

$$\mathbf{A}_x = (A_{x,m,n}), \quad (4.50)$$

com componentes

$$A_{x,m,n} = \frac{2w_n\sigma_t\sigma_s}{\xi_m^2}. \quad (4.51)$$

Na próxima seção são introduzidas as soluções gerais para as equações dos fluxos médios locais nas variáveis x e y , bem como um sistema de equações lineares a ser resolvido para a obtenção da solução ADO-Nodal para a adjunta da equação do transporte de nêutrons.

4.3 Soluções ADO-Nodal para as Equações dos Fluxos Médios Locais

Nesta seção será estabelecido um sistema de equações lineares para a obtenção dos fluxos médios locais nas variáveis x e y . Para isso, é preciso realizar o adequado tratamento dos termos de fuga transversal que aparecem nas Equações (4.11), (4.12), (4.17) e (4.18).

Neste trabalho, são consideradas aproximações constantes em cada região $D_{p,q}$, com $p \in \{1, \dots, n_y\}$ e $q \in \{1, \dots, n_x\}$, e direção $m \in \{1, \dots, M\}$, para os termos de fuga transversal. Aproximações polinomiais de ordens mais elevadas não trouxeram benefícios compatíveis com a dificuldade adicional encontrada no equacionamento, além do relevante acréscimo no tempo computacional [19, 21]. Além disso, os termos de fuga transversal são apenas parte das Equações (4.11), (4.12), (4.17) e (4.18); elas possuem, também, termos referentes à fonte interna de partículas. Aqui, são consideradas apenas fontes constantes no interior de cada região, portanto são, também, supostas soluções particulares constantes para as equações dos fluxos médios locais.

Adicionalmente, o equacionamento necessário para a obtenção do sistema de equações a ser resolvido é longo e requer certos cuidados com respeito aos termos de fuga transversais, pois estes acoplam os fluxos médios locais nas variáveis x e y , sendo, com isso, necessária a adequada conversão das equações entre os dois ordenamentos da regra de quadratura. Assim, é conveniente dividir o equacionamento nos seguintes casos

- (i) Soluções particulares para os fluxos médios locais:
 - (a) Em regiões que não incluem o contorno;
 - (b) Em regiões que incluem o contorno.

- (ii) Condições de contorno para os fluxos médios locais;
- (iii) Requisitos de continuidade dos fluxos médios locais.

Tendo em vista a discussão do início desta seção, são propostas, para cada região $D_{p,q}$, com $p \in \{1, \dots, n_y\}$ e $q \in \{1, \dots, n_x\}$, soluções particulares constantes para as Equações (4.11), (4.12), (4.17) e (4.18). Assim, são assumidas

$$\psi_{y,p,q}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_m) = K_m^{p,q}, \quad (4.52)$$

e

$$\psi_{x,p,q}^\dagger(y, \mathbf{\Omega}_m) = W_m^{p,q}, \quad (4.53)$$

para $m \in \{1, \dots, M\}$.

Pelo princípio da superposição, soluções gerais para as Equações (4.11) e (4.12) são escritas por meio das Equações (4.41), (4.42) e (4.52) como

$$\begin{aligned} \psi_{y,p,q}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_m) = & \sum_{j=1}^{M/2} \{ A_j^{p,q} \phi_{y,j,m}^{p,q} e^{-(x-x_q)/\nu_j^{p,q}} \\ & + A_{j+M/2}^{p,q} \phi_{y,j,m+M/2}^{p,q} e^{-(x_{q+1}-x)/\nu_j^{p,q}} \} + K_m^{p,q}, \end{aligned} \quad (4.54)$$

e

$$\begin{aligned} \psi_{y,p,q}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) = & \sum_{j=1}^{M/2} \{ A_j^{p,q} \phi_{y,j,m+M/2}^{p,q} e^{-(x-x_q)/\nu_j^{p,q}} \\ & + A_{j+M/2}^{p,q} \phi_{y,j,m}^{p,q} e^{-(x_{q+1}-x)/\nu_j^{p,q}} \} + K_{m+M/2}^{p,q}, \end{aligned} \quad (4.55)$$

para os fluxos médios locais na variável y , nas direções $m \in \{1, \dots, M/2\}$, com $\phi_{y,j,m}^{p,q} = \phi_{y,p,q}(\nu_{j,p,q}, \mathbf{\Omega}_m)$, conforme definição nas Equações (4.38) e (4.39).

Analogamente, são utilizadas as Equações (4.43), (4.44) e (4.53) para escrever soluções gerais para as Equações (4.17) e (4.18) na forma

$$\begin{aligned} \psi_{x,p,q}^\dagger(y, \mathbf{\Omega}_m) = & \sum_{j=1}^{M/2} \{ B_j^{p,q} \phi_{x,j,m}^{p,q} e^{-(y-y_{p+1})/\gamma_j^{p,q}} \\ & + B_{j+M/2}^{p,q} \phi_{x,j,m+M/2}^{p,q} e^{-(y_p-y)/\gamma_j^{p,q}} \} + W_m^{p,q}, \end{aligned} \quad (4.56)$$

e

$$\begin{aligned} \psi_{x,p,q}^\dagger(y, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) = \sum_{j=1}^{M/2} \{ & B_j^{p,q} \phi_{x,j,m+M/2}^{p,q} e^{-(y-y_{p+1})/\gamma_j^{p,q}} \\ & + B_{j+M/2}^{p,q} \phi_{x,j,m}^{p,q} e^{-(y_q-y)/\gamma_j^{p,q}} \} + W_{m+M/2}^{p,q}, \end{aligned} \quad (4.57)$$

para os fluxos médios locais na variável x , com $m \in \{1, \dots, M/2\}$, onde $\phi_{x,j,m}^{p,q} = \phi_{x,p,q}(\gamma_{j,p,q}, \mathbf{\Omega}_m)$, de acordo com as Equações (4.45) e (4.46).

A substituição da Equação (4.52) nas Equações (4.11) e (4.12) permite verificar que as soluções particulares para o fluxo médio local em y devem satisfazer o sistema de equações

$$\begin{aligned} \sigma_{p,q} K_m^{p,q} - \sigma_{s,p,q} \sum_{n=1}^M w_n K_n^{p,q} = S_{y,p,q}^\dagger \\ + \frac{\xi_m}{h_{y,p,q}} (\psi_{p,q}^\dagger(x, y_p, \mathbf{\Omega}_m) - \psi_{p,q}^\dagger(x, y_{p+1}, \mathbf{\Omega}_m)), \end{aligned} \quad (4.58)$$

para $m \in \{1, \dots, M\}$, onde foi utilizado o fato de que $w_m = w_{m+M/2}$ e $\xi_m = \xi_{m+M/2}$.

Os termos de fuga transversal $\psi_{p,q}^\dagger(x, y_p, \mathbf{\Omega}_m)$ e $\psi_{p,q}^\dagger(x, y_{p+1}, \mathbf{\Omega}_m)$ são desconhecidos. Neste trabalho, são consideradas aproximações constantes da forma $\psi_{p,q}^\dagger(x, y_p, \mathbf{\Omega}_m) = C_{m,p,q}$ e $\psi_{p,q}^\dagger(x, y_{p+1}, \mathbf{\Omega}_m) = D_{m,p,q}$ para estes termos, de onde decorre que, ao integrar para $x \in [x_q, x_{q+1}]$,

$$\psi_{x,p,q}^\dagger(y_p, \mathbf{\Omega}_m) = C_m^{p,q}, \quad (4.59)$$

na parte superior da região $D_{p,q}$, e

$$\psi_{x,p,q}^\dagger(y_{p+1}, \mathbf{\Omega}_m) = D_m^{p,q}, \quad (4.60)$$

na parte inferior da região $D_{p,q}$, com $m \in \{1, \dots, M\}$.

É preciso destacar que as Equações (4.59) e (4.60) utilizam o ordenamento do fluxo integrado em x , enquanto a Equação (4.58) utiliza o ordenamento do fluxo integrado em y , não sendo possível, portanto, a direta substituição. Para que isso seja contornado, é preciso determinar os índices equivalentes em cada um dos ordenamentos. Tais equivalências são dadas por

- $m \in \{1, \dots, M/4\}$ no ordenamento y equivale a $m \in \{1, \dots, M/4\}$ no ordenamento x ;
- $m \in \{M/4 + 1, \dots, M/2\}$ no ordenamento y equivale a $m \in \{M/2 + 1, \dots, 3M/4\}$ no ordenamento x ;
- $m \in \{M/2 + 1, \dots, 3M/4\}$ no ordenamento y equivale a $m \in \{M/4 + 1, \dots, M/2\}$ no ordenamento x ;
- $m \in \{3M/4 + 1, \dots, M\}$ no ordenamento y equivale a $m \in \{3M/4 + 1, \dots, M\}$ no ordenamento x .

Nas regiões $D_{p,q}$ que não pertencem à fronteira do domínio, isto é, naquelas para as quais $p \in \{2, \dots, n_y - 1\}$ e $q \in \{2, \dots, n_x - 1\}$, é possível reescrever a Equação (4.58) como

$$\sigma_{p,q} K_m^{p,q} - \sigma_{s,p,q} \sum_{n=1}^M w_n K_n^{p,q} - \frac{\xi_m}{h_{y,p,q}} (C_m^{p,q} - D_m^{p,q}) = S_{y,p,q}^\dagger, \quad (4.61)$$

$$\sigma_{p,q} K_{m+M/4}^{p,q} - \sigma_{s,p,q} \sum_{n=1}^M w_n K_n^{p,q} + \frac{\xi_m}{h_{y,p,q}} (C_{m+M/2}^{p,q} - D_{m+M/2}^{p,q}) = S_{y,p,q}^\dagger, \quad (4.62)$$

$$\sigma_{p,q} K_{m+M/2}^{p,q} - \sigma_{s,p,q} \sum_{n=1}^M w_n K_n^{p,q} - \frac{\xi_m}{h_{y,p,q}} (C_{m+M/4}^{p,q} - D_{m+M/4}^{p,q}) = S_{y,p,q}^\dagger, \quad (4.63)$$

e, por fim,

$$\sigma_{p,q} K_{m+3M/4}^{p,q} - \sigma_{s,p,q} \sum_{n=1}^M w_n K_n^{p,q} + \frac{\xi_m}{h_{y,p,q}} (C_{m+3M/4}^{p,q} - D_{m+3M/4}^{p,q}) = S_{y,p,q}^\dagger, \quad (4.64)$$

para $m \in \{1, \dots, M/4\}$.

Dessa forma, a substituição das expansões em autofunções dadas pelas Equações (4.56) e (4.57) no lado esquerdo das Equações (4.59) e (4.60) para posterior substituição das equações resultantes no lado direito das Equações (4.61), (4.62),

(4.63) e (4.64) gera o sistema de equações

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\xi_m}{h_{y,p,q}} \left[e^{-(y_p - y_{p+1})/\gamma_j^{p,q}} - 1 \right] \left\{ -\phi_{x,j,m}^{p,q} B_j^{p,q} + \phi_{x,j,m+M/2}^{p,q} B_{j+M/2}^{p,q} \right\} \\ + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{p,q} \delta_{m,n} - \sigma_{s,p,q} w_n \right) K_n^{p,q} = S_{y,p,q}^\dagger, \end{aligned} \quad (4.65)$$

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\xi_m}{h_{y,p,q}} \left[e^{-(y_p - y_{p+1})/\gamma_j^{p,q}} - 1 \right] \left\{ \phi_{x,j,m+M/2}^{p,q} B_j^{p,q} - \phi_{x,j,m}^{p,q} B_{j+M/2}^{p,q} \right\} \\ + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{p,q} \delta_{m+M/4,n} - \sigma_{s,p,q} w_n \right) K_n^{p,q} = S_{y,p,q}^\dagger, \end{aligned} \quad (4.66)$$

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\xi_m}{h_{y,p,q}} \left[e^{-(y_p - y_{p+1})/\gamma_j^{p,q}} - 1 \right] \left\{ -\phi_{x,j,m+M/4}^{p,q} B_j^{p,q} + \phi_{x,j,m+3M/4}^{p,q} B_{j+M/2}^{p,q} \right\} \\ + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{p,q} \delta_{m+M/2,n} - \sigma_{s,p,q} w_n \right) K_n^{p,q} = S_{y,p,q}^\dagger, \end{aligned} \quad (4.67)$$

e

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\xi_m}{h_{y,p,q}} \left[e^{-(y_p - y_{p+1})/\gamma_j^{p,q}} - 1 \right] \left\{ \phi_{x,j,m+3M/4}^{p,q} B_j^{p,q} - \phi_{x,j,m+M/4}^{p,q} B_{j+M/2}^{p,q} \right\} \\ + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{p,q} \delta_{m+3M/4,n} - \sigma_{s,p,q} w_n \right) K_n^{p,q} = S_{y,p,q}^\dagger, \end{aligned} \quad (4.68)$$

para $m \in \{1, \dots, M/4\}$, onde $\delta_{m,n}$ é o delta de Kronecker.

De forma semelhante ao que foi feito na Equação (4.58), as soluções particulares para o fluxo médio local em x satisfazem o sistema de equações

$$\begin{aligned} \sigma_{p,q} W_m^{p,q} - \sigma_{s,p,q} \sum_{n=1}^M w_n W_n^{p,q} = S_{x,p,q}^\dagger \\ + \frac{\eta_m}{h_{x,p,q}} \left(\psi_{p,q}^\dagger(x_{q+1}, y, \mathbf{\Omega}_m) - \psi_{p,q}^\dagger(x_q, y, \mathbf{\Omega}_m) \right), \end{aligned} \quad (4.69)$$

para $m \in \{1, \dots, M\}$ após a substituição das hipóteses de soluções particulares para o fluxo médio local em y nas Equações (4.11) e (4.12), onde foi utilizado o fato de que $w_m = w_{m+M/2}$ e $\eta_m = \eta_{m+M/2}$.

Adicionalmente, se os termos de fuga transversal presentes na Equação (4.19) forem, também, considerados constantes, isto é, $\psi_{p,q}^\dagger(x_{q+1}, y, \mathbf{\Omega}_m) = E_m^{p,q}$ e $\psi_{p,q}^\dagger(x_q, y, \mathbf{\Omega}_m) = F_m^{p,q}$, decorre que, ao integrar para $y \in [y_{p+1}, y_p]$, são obtidas as equações

$$\psi_{y,p,q}^\dagger(x_{q+1}, \mathbf{\Omega}_m) = E_m^{p,q}, \quad (4.70)$$

na parte direita de $D_{p,q}$, e

$$\psi_{y,p,q}^\dagger(x_q, \mathbf{\Omega}_m) = F_m^{p,q}, \quad (4.71)$$

na parte esquerda de $D_{p,q}$, para $m \in \{1, \dots, M\}$.

Assim como no caso anterior, é preciso adequar o ordenamento dos índices considerados nas Equações (4.70) e (4.71), do fluxo integrado em y , com os índices da Equação (4.69), do fluxo integrado em x .

Com isso, ao considerar apenas regiões que não incluem a fronteira, após manipulações algébricas análogas àquelas utilizadas para a obtenção das Equações (4.65), (4.66), (4.67) e (4.68), é obtido o sistema de equações

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\eta_m}{h_{x,p,q}} \left[e^{-(x_{q+1}-x_q)/\nu_j^{p,q}} - 1 \right] \left\{ -\phi_{y,j,m}^{p,q} A_j^{p,q} + \phi_{y,j,m+M/2}^{p,q} A_{j+M/2}^{p,q} \right\} \\ + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{p,q} \delta_{m,n} - \sigma_{s,p,q} w_n \right) W_n^{p,q} = S_{x,p,q}^\dagger, \end{aligned} \quad (4.72)$$

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\eta_m}{h_{x,p,q}} \left[e^{-(x_{q+1}-x_q)/\nu_j^{p,q}} - 1 \right] \left\{ \phi_{y,j,m+M/2}^{p,q} A_j^{p,q} - \phi_{y,j,m}^{p,q} A_{j+M/2}^{p,q} \right\} \\ + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{p,q} \delta_{m+M/4,n} - \sigma_{s,p,q} w_n \right) W_n^{p,q} = S_{x,p,q}^\dagger, \end{aligned} \quad (4.73)$$

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\eta_m}{h_{x,p,q}} \left[e^{-(x_{q+1}-x_q)/\nu_j^{p,q}} - 1 \right] \left\{ -\phi_{y,j,m+M/4}^{p,q} A_j^{p,q} + \phi_{y,j,m+3M/4}^{p,q} A_{j+M/2}^{p,q} \right\} \\ + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{p,q} \delta_{m+M/2,n} - \sigma_{s,p,q} w_n \right) W_n^{p,q} = S_{x,p,q}^\dagger, \end{aligned} \quad (4.74)$$

e

$$\sum_{j=1}^{M/2} \frac{\eta_m}{h_{x,p,q}} \left[e^{-(x_{q+1}-x_q)/\nu_j^{p,q}} - 1 \right] \left\{ \phi_{y,j,m+3M/4}^{p,q} A_j^{p,q} - \phi_{y,j,m+M/4}^{p,q} A_{j+M/2}^{p,q} \right\} + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{p,q} \delta_{m+3M/4,n} - \sigma_{s,p,q} w_n \right) W_n^{p,q} = S_{x,p,q}^\dagger, \quad (4.75)$$

para $m \in \{1, \dots, M/4\}$.

Até o momento foram obtidas equações para as soluções particulares em todas as regiões que não envolvem o contorno do problema. Para as regiões que estão em contato com a fronteira do problema, os termos de fuga transversal não são totalmente desconhecidos. De fato, as condições de contorno da adjunta da equação do transporte são aplicadas sempre que o termo de fuga transversal envolver as direções de saída do domínio.

Com isso, as condições de contorno à esquerda e à direita do domínio, dadas pelas Equações (4.2) e (4.3), são integradas para $y \in [y_{p+1}, y_p]$, com $p \in \{1, \dots, n_y\}$, para que sejam obtidos os fluxos médios na variável y

$$\psi_{y,p,1}^\dagger(x_1, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) = \rho_1 \psi_{y,p,1}^\dagger(x_1, \mathbf{\Omega}_m), \quad (4.76)$$

e

$$\psi_{y,p,n_x}^\dagger(x_{n_x+1}, \mathbf{\Omega}_m) = \rho_2 \psi_{y,p,n_x}^\dagger(x_{n_x+1}, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}), \quad (4.77)$$

para $m \in \{1, \dots, M/2\}$. Para $q \in \{1, \dots, n_x\}$, as condições de contorno abaixo e acima do domínio, dadas pelas Equações (4.4) e (4.5), são integradas para $x \in [x_q, x_{q+1}]$ para que se obtenha

$$\psi_{x,n_y,q}^\dagger(y_{n_y+1}, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}) = \rho_3 \psi_{x,n_y,q}^\dagger(y_{n_y+1}, \mathbf{\Omega}_m), \quad (4.78)$$

e

$$\psi_{x,1,q}^\dagger(y_1, \mathbf{\Omega}_m) = \rho_4 \psi_{x,1,q}^\dagger(y_1, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}), \quad (4.79)$$

para $m \in \{1, \dots, M/2\}$.

Para $p = 1$ e $q \in \{1, \dots, n_x\}$, as hipóteses feitas na Equação (4.59) aliadas às condições de contorno da Equação (4.79) originam

$$C_m^{1,q} = \rho_4 C_{m+M/2}^{1,q}, \quad (4.80)$$

para $m \in \{1, \dots, M/2\}$, de onde são obtidas as Mn_x equações nas $3Mn_x$ incógnitas $B_m^{1,q}$, $K_m^{1,q}$ e $W_m^{1,q}$

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\xi_m}{h_{y,1,q}} \left\{ \left[\phi_{x,j,m}^{1,q} - \rho_4 \phi_{x,j,m+M/2}^{1,q} e^{-(y_1-y_2)/\gamma_j^{1,q}} \right] B_j^{1,q} \right. \\ \left. + \left[\phi_{x,j,m+M/2}^{1,q} e^{-(y_1-y_2)/\gamma_j^{1,q}} - \rho_4 \phi_{x,j,m}^{1,q} \right] B_{j+M/2}^{1,q} \right\} \\ + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{1,q} \delta_{m,n} - \sigma_{s,1,q} w_n \right) K_n^{1,q} \\ + \frac{\xi_m}{h_{y,1,q}} \left(W_m^{1,q} - \rho_4 W_{m+M/2}^{1,q} \right) = S_{y,1,q}^\dagger, \end{aligned} \quad (4.81)$$

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\xi_m}{h_{y,1,q}} \left[e^{-(y_1-y_2)/\gamma_j^{1,q}} - 1 \right] \left\{ \phi_{x,j,m+M/2}^{1,q} B_j^{1,q} - \phi_{x,j,m}^{1,q} B_{j+M/2}^{1,q} \right\} \\ + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{1,q} \delta_{m+M/4,n} - \sigma_{s,1,q} w_n \right) K_n^{1,q} = S_{y,1,q}^\dagger, \end{aligned} \quad (4.82)$$

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\xi_m}{h_{y,1,q}} \left\{ \left[\phi_{x,j,m+M/4}^{1,q} - \rho_4 \phi_{x,j,m+3M/4}^{1,q} e^{-(y_1-y_2)/\gamma_j^{1,q}} \right] B_j^{1,q} \right. \\ \left. + \left[\phi_{x,j,m+3M/4}^{1,q} e^{-(y_1-y_2)/\gamma_j^{1,q}} - \rho_4 \phi_{x,j,m+M/4}^{1,q} \right] B_{j+M/2}^{1,q} \right\} \\ + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{1,q} \delta_{m+M/2,n} - \sigma_{s,1,q} w_n \right) K_n^{1,q} \\ + \frac{\xi_m}{h_{y,1,q}} \left(W_{m+M/4}^{1,q} - \rho_4 W_{m+3M/4}^{1,q} \right) = S_{y,1,q}^\dagger, \end{aligned} \quad (4.83)$$

e

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\xi_m}{h_{y,1,q}} \left[e^{-(y_1-y_2)/\gamma_j^{1,q}} - 1 \right] \left\{ \phi_{x,j,m+3M/4}^{1,q} B_j^{1,q} - \phi_{x,j,m+M/4}^{1,q} B_{j+M/2}^{1,q} \right\} \\ + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{1,q} \delta_{m+3M/4,n} - \sigma_{s,1,q} w_n \right) K_n^{1,q} = S_{y,1,q}^\dagger, \end{aligned} \quad (4.84)$$

para $m \in \{1, \dots, M/4\}$.

Na sequência, quando $p = n_y$ e $q \in \{1, \dots, n_x\}$, é utilizada a Equação (4.60) e as condições de contorno da Equação (4.79) para escrever

$$D_{m+M/2}^{n_y, q} = \rho_3 D_m^{n_y, q}, \quad (4.85)$$

para $m \in \{1, \dots, M/2\}$, de onde são obtidas adicionais Mn_x equações nas $3Mn_x$ incógnitas $B_m^{n_y, q}$, $K_m^{n_y, q}$ e $W_m^{n_y, q}$

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\xi_m}{h_{y, n_y, q}} \left[e^{-(y_{n_y} - y_{n_y+1})/\gamma_j^{n_y, q}} - 1 \right] \left\{ -\phi_{x, j, m}^{n_y, q} B_j^{n_y, q} + \phi_{x, j, m+M/2}^{n_y, q} B_{j+M/2}^{n_y, q} \right\} \\ + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{n_y, q} \delta_{m, n} - \sigma_{s, n_y, q} w_n \right) K_n^{n_y, q} = S_{y, n_y, q}^\dagger, \end{aligned} \quad (4.86)$$

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\xi_m}{h_{y, n_y, q}} \left\{ \left[\phi_{x, j, m+M/2}^{n_y, q} e^{-(y_{n_y} - y_{n_y+1})/\gamma_j^{n_y, q}} - \rho_3 \phi_{x, j, m}^{n_y, q} \right] B_j^{n_y, q} \right. \\ \left. + \left[\phi_{x, j, m}^{n_y, q} - \rho_3 \phi_{x, j, m+M/2}^{n_y, q} e^{-(y_{n_y} - y_{n_y+1})/\gamma_j^{n_y, q}} \right] B_{j+M/2}^{n_y, q} \right\} \\ + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{n_y, q} \delta_{m+M/4, n} - \sigma_{s, n_y, q} w_n \right) K_n^{n_y, q} \\ + \frac{\xi_m}{h_{y, n_y, q}} \left(W_{m+M/2}^{n_y, q} - \rho_3 W_m^{n_y, q} \right) = S_{y, n_y, q}^\dagger, \end{aligned} \quad (4.87)$$

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\xi_m}{h_{y, n_y, q}} \left[e^{-(y_{n_y} - y_{n_y+1})/\gamma_j^{n_y, q}} - 1 \right] \left\{ -\phi_{x, j, m+M/4}^{n_y, q} B_j^{n_y, q} + \phi_{x, j, m+3M/4}^{n_y, q} B_{j+M/2}^{n_y, q} \right\} \\ + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{n_y, q} \delta_{m+M/2, n} - \sigma_{s, n_y, q} w_n \right) K_n^{n_y, q} = S_{y, n_y, q}^\dagger, \end{aligned} \quad (4.88)$$

e

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\xi_m}{h_{y,n_y,q}} \left\{ \left[\phi_{x,j,m+3M/4}^{n_y,q} e^{-(y_{n_y}-y_{n_y+1})/\gamma_j^{n_y,q}} - \rho_3 \phi_{x,j,m+M/4}^{n_y,q} \right] B_j^{n_y,q} \right. \\
& \quad \left. + \left[\phi_{x,j,m+M/4}^{n_y,q} - \rho_3 \phi_{x,j,m+3M/4}^{n_y,q} e^{-(y_{n_y}-y_{n_y+1})/\gamma_j^{n_y,q}} \right] B_{j+M/2}^{n_y,q} \right\} \\
& \quad + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{n_y,q} \delta_{m+3M/4,n} - \sigma_{s,n_y,q} w_n \right) K_n^{n_y,q} \\
& \quad + \frac{\xi_m}{h_{y,n_y,q}} \left(W_{m+3M/4}^{n_y,q} - \rho_3 W_{m+M/4}^{n_y,q} \right) = S_{y,n_y,q}^\dagger,
\end{aligned} \tag{4.89}$$

para $m \in \{1, \dots, M/4\}$.

Para $q = n_x$ e $p \in \{1, \dots, n_y\}$, as hipóteses feitas na Equação (4.70) aliadas às condições de contorno da Equação (4.77) originam

$$E_m^{p,n_x} = \rho_2 E_{m+M/2}^{p,n_x}, \tag{4.90}$$

para $m \in \{1, \dots, M/2\}$, de onde são obtidas as Mn_y equações nas $3Mn_y$ incógnitas A_m^{p,n_x} , K_m^{p,n_x} e W_m^{p,n_x}

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\eta_m}{h_{x,p,n_x}} \left\{ \left[\phi_{y,j,m}^{p,n_x} - \rho_2 \phi_{y,j,m+M/2}^{p,n_x} e^{-(x_{n_x+1}-x_{n_x})/\nu_j^{p,n_x}} \right] A_j^{p,n_x} \right. \\
& \quad \left. + \left[\phi_{y,j,m+M/2}^{p,n_x} e^{-(x_{n_x+1}-x_{n_x})/\nu_j^{p,n_x}} - \rho_2 \phi_{y,j,m}^{p,n_x} \right] A_{j+M/2}^{p,n_x} \right\} \\
& \quad + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{p,n_x} \delta_{m,n} - \sigma_{s,p,n_x} w_n \right) W_n^{p,n_x} \\
& \quad + \frac{\eta_m}{h_{x,p,n_x}} \left(K_m^{p,n_x} - \rho_2 K_{m+M/2}^{p,n_x} \right) = S_{x,p,n_x}^\dagger,
\end{aligned} \tag{4.91}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\eta_m}{h_{x,p,n_x}} \left[e^{-(x_{n_x+1}-x_{n_x})/\nu_j^{p,n_x}} - 1 \right] \left\{ \phi_{y,j,m+M/2}^{p,n_x} A_j^{p,n_x} - \phi_{y,j,m}^{p,n_x} A_{j+M/2}^{p,n_x} \right\} \\
& \quad + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{p,n_x} \delta_{m+M/4,n} - \sigma_{s,p,n_x} w_n \right) W_n^{p,n_x} = S_{y,p,n_x}^\dagger,
\end{aligned} \tag{4.92}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\eta_m}{h_{x,p,n_x}} \left\{ \left[\phi_{y,j,m+M/4}^{p,n_x} - \rho_2 \phi_{y,j,m+3M/4}^{p,n_x} e^{-(x_{n_x+1}-x_{n_x})/\nu_j^{p,n_x}} \right] A_j^{p,n_x} \right. \\
& \quad \left. + \left[\phi_{y,j,m+3M/4}^{p,n_x} e^{-(y_1-y_2)/\nu_j^{p,n_x}} - \rho_2 \phi_{y,j,m+M/4}^{p,n_x} \right] A_{j+M/2}^{p,n_x} \right\} \\
& \quad + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{p,n_x} \delta_{m+M/2,n} - \sigma_{s,p,n_x} w_n \right) W_n^{p,n_x} \\
& \quad + \frac{\eta_m}{h_{y,1,q}} \left(K_{m+M/4}^{p,n_x} - \rho_2 K_{m+3M/4}^{p,n_x} \right) = S_{y,1,q}^\dagger,
\end{aligned} \tag{4.93}$$

e

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\eta_m}{h_{x,1,q}} \left[e^{-(x_{n_x+1}-x_{n_x})/\nu_j^{p,n_x}} - 1 \right] \left\{ \phi_{y,j,m+3M/4}^{p,n_x} A_j^{p,n_x} - \phi_{y,j,m+M/4}^{p,n_x} A_{j+M/2}^{p,n_x} \right\} \\
& \quad + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{p,n_x} \delta_{m+3M/4,n} - \sigma_{s,p,n_x} w_n \right) W_n^{p,n_x} = S_{x,p,n_x}^\dagger,
\end{aligned} \tag{4.94}$$

para $m \in \{1, \dots, M/4\}$.

Por fim, quando $q = 1$ e $p \in \{1, \dots, n_y\}$, são utilizadas a Equação (4.71) e as condições de contorno da Equação (4.78) para escrever

$$F_{m+M/2}^{p,1} = \rho_1 F_m^{p,1}, \tag{4.95}$$

para $m \in \{1, \dots, M/2\}$, de onde são obtidas adicionais Mn_y equações nas $3Mn_y$ incógnitas $A_m^{p,1}$, $K_m^{p,1}$ e $W_m^{p,1}$

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\eta_m}{h_{x,p,1}} \left[e^{-(x_2-x_1)/\nu_j^{p,1}} - 1 \right] \left\{ -\phi_{y,j,m}^{p,1} A_j^{p,1} + \phi_{y,j,m+M/2}^{p,1} A_{j+M/2}^{p,1} \right\} \\
& \quad + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{p,1} \delta_{m,n} - \sigma_{s,p,1} w_n \right) W_n^{p,1} = S_{x,p,1}^\dagger,
\end{aligned} \tag{4.96}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\eta_m}{h_{x,p,1}} \left\{ \left[\phi_{y,j,m+M/2}^{p,1} e^{-(x_2-x_1)/\nu_j^{p,1}} - \rho_1 \phi_{y,j,m}^{p,1} \right] A_j^{p,1} \right. \\
& \quad \left. + \left[\phi_{y,j,m}^{p,1} - \rho_1 \phi_{y,j,m+M/2}^{p,1} e^{-(x_2-x_1)/\nu_j^{p,1}} \right] A_{j+M/2}^{p,1} \right\} \\
& \quad + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{p,1} \delta_{m+M/4,n} - \sigma_{s,p,1} w_n \right) W_n^{p,1} \\
& \quad + \frac{\eta_m}{h_{x,p,1}} \left(K_{m+M/2}^{p,1} - \rho_1 K_m^{p,1} \right) = S_{x,p,1}^\dagger,
\end{aligned} \tag{4.97}$$

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\eta_m}{h_{x,p,1}} \left[e^{-(x_2-x_1)/\nu_j^{p,1}} - 1 \right] \left\{ -\phi_{y,j,m+M/4}^{p,1} A_j^{p,1} + \phi_{y,j,m+3M/4}^{p,1} A_{j+M/2}^{p,1} \right\} \\
& + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{p,1} \delta_{m+M/2,n} - \sigma_{s,p,1} w_n \right) W_n^{p,1} = S_{x,p,1}^\dagger,
\end{aligned} \tag{4.98}$$

e

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^{M/2} \frac{\eta_m}{h_{x,p,1}} \left\{ \left[\phi_{y,j,m+3M/4}^{p,1} e^{-(x_2-x_1)/\nu_j^{p,1}} - \rho_1 \phi_{y,j,m+M/4}^{p,1} \right] A_j^{p,1} \right. \\
& \quad \left. + \left[\phi_{y,j,m+M/4}^{p,1} - \rho_1 \phi_{y,j,m+3M/4}^{p,1} e^{-(x_2-x_1)/\nu_j^{p,1}} \right] A_{j+M/2}^{p,1} \right\} \\
& + \sum_{n=1}^M \left(\sigma_{p,1} \delta_{m+3M/4,n} - \sigma_{s,p,1} w_n \right) W_n^{p,1} \\
& + \frac{\eta_m}{h_{x,p,1}} \left(K_{m+3M/4}^{p,1} - \rho_1 K_{m+M/4}^{p,1} \right) = S_{x,p,1}^\dagger,
\end{aligned} \tag{4.99}$$

para $m \in \{1, \dots, M/2\}$.

Ao considerar apenas as equações das soluções particulares, existem $8Mn_x n_y$ variáveis para apenas $4Mn_x n_y$ equações. As demais equações necessárias são provenientes das condições de contorno e das exigências de continuidade nas interfaces das regiões $D_{p,q}$.

Com respeito às condições de contorno, para $p \in \{1, \dots, n_y\}$, a substituição das Equações (4.54) e (4.55) nas Equações (4.76) e (4.77) permite que sejam escritas para o fluxo médio na variável y as expressões

$$\begin{aligned}
& \sum_{j=1}^{M/2} \left\{ \left[\phi_{y,j,m+M/2} - \rho_1 \phi_{y,j,m} \right] A_j^{p,1} \right. \\
& \quad \left. + \left[\phi_{y,j,m} - \rho_1 \phi_{y,j,m+M/2} \right] e^{-(x_2-x_1)/\nu_j^{p,1}} A_{j+M/2}^{p,1} \right\} \\
& - \rho_1 K_m^{p,1} + K_{m+M/2}^{p,1} = 0,
\end{aligned} \tag{4.100}$$

ao considerar $q = 1$, e

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{M/2} \left\{ \left[\phi_{y,j,m} - \rho_2 \phi_{y,j,m+M/2} \right] e^{-(x_{n_x+1}-x_{n_x})/\nu_j^{p,n_x}} A_j^{p,n_x} \right. \\ \left. + \left[\phi_{y,j,m+M/2} - \rho_2 \phi_{y,j,m} \right] A_{j+M/2}^{p,n_x} \right\} \\ - \rho_2 K_{m+M/2}^{p,n_x} + K_m^{p,n_x} = 0, \end{aligned} \quad (4.101)$$

com $q = n_x$, para $m \in \{1, \dots, M/2\}$.

Para o fluxo integrado em x , dado $q \in \{1, \dots, n_x\}$, ao substituir as Equações (4.56) e (4.57) nas Equações (4.78) e (4.79) são obtidas

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{M/2} \left\{ \left[\phi_{x,j,m+M/2} - \rho_3 \phi_{x,j,m} \right] B_j^{n_y,q} \right. \\ \left. + \left[\phi_{x,j,m} - \rho_3 \phi_{x,j,m+M/2} \right] e^{-(y_{n_y}-y_{n_y+1})/\gamma_j^{n_y,q}} B_{j+M/2}^{n_y,q} \right\} \\ - \rho_3 W_m^{n_y,q} + W_{m+M/2}^{n_y,q} = 0, \end{aligned} \quad (4.102)$$

para $p = n_y$, e

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^{M/2} \left\{ \left[\phi_{x,j,m} - \rho_4 \phi_{x,j,m+M/2} \right] e^{-(y_1-y_2)/\gamma_j^{n_y,q}} B_j^{1,q} \right. \\ \left. + \left[\phi_{x,j,m+M/2} - \rho_4 \phi_{x,j,m} \right] B_{j+M/2}^{1,q} \right\} \\ - \rho_4 W_{m+M/2}^{1,q} + W_m^{1,q} = 0, \end{aligned} \quad (4.103)$$

para $p = 1$, com $m \in \{1, \dots, M/2\}$.

As últimas equações do sistema são provenientes das exigências de continuidade nas interfaces entre regiões contíguas para os fluxos médios locais. Assim, ao exigir que sejam satisfeitas para os fluxos integrados na variável y

$$\psi_{y,p,q}^\dagger(x_{q+1}, \mathbf{\Omega}_m) = \psi_{y,p,q+1}^\dagger(x_{q+1}, \mathbf{\Omega}_m), \quad (4.104)$$

para $p \in \{1, \dots, n_y\}$, $q \in \{1, \dots, n_x - 1\}$ e $m \in \{1, \dots, M\}$, são obtidas as equações

$$\sum_{j=1}^{M/2} \left[A_j^{p,q} \phi_{y,j,m}^{p,q} e^{-(x_{q+1}-x_q)/\nu_j^{p,q}} + A_{j+M/2}^{p,q} \phi_{y,j,m+M/2}^{p,q} - A_j^{p,q+1} \phi_{y,j,m}^{p,q+1} \right. \\ \left. - A_{j+M/2}^{p,q+1} \phi_{y,j,m+M/2}^{p,q+1} e^{-(x_{q+2}-x_{q+1})/\nu_j^{p,q+1}} \right] + K_m^{p,q} - K_m^{p,q+1} = 0, \quad (4.105)$$

e

$$\sum_{j=1}^{M/2} \left[A_j^{p,q} \phi_{y,j,m+M/2}^{p,q} e^{-(x_{q+1}-x_q)/\nu_j^{p,q}} + A_{j+M/2}^{p,q} \phi_{y,j,m}^{p,q} - A_j^{p,q+1} \phi_{y,j,m+M/2}^{p,q+1} \right. \\ \left. - A_{j+M/2}^{p,q+1} \phi_{y,j,m}^{p,q+1} e^{-(x_{q+2}-x_{q+1})/\nu_j^{p,q+1}} \right] + K_{m+M/2}^{p,q} - K_{m+M/2}^{p,q+1} = 0, \quad (4.106)$$

para $m \in \{1, \dots, M/2\}$.

Por fim, os fluxos integrados na variável x devem satisfazer

$$\psi_{x,p,q}^\dagger(y_{p+1}, \mathbf{\Omega}_m) = \psi_{x,p+1,q}^\dagger(y_{p+1}, \mathbf{\Omega}_m), \quad (4.107)$$

para $p \in \{1, \dots, n_y - 1\}$, $q \in \{1, \dots, n_x\}$ e $m \in \{1, \dots, M\}$. Dessa forma, podem ser obtidas as equações

$$\sum_{j=1}^{M/2} \left[B_j^{p,q} \phi_{x,j,m}^{p,q} + B_{j+M/2}^{p,q} \phi_{x,j,m+M/2}^{p,q} e^{-(y_p-y_{p+1})/\gamma_j^{p,q}} \right. \\ \left. - B_j^{p+1,q} \phi_{x,j,m}^{p+1,q} e^{-(y_{p+1}-y_{p+2})/\gamma_j^{p+1,q}} \right. \\ \left. - B_{j+M/2}^{p+1,q} \phi_{x,j,m+M/2}^{p+1,q} \right] + W_m^{p,q} - W_m^{p+1,q} = 0, \quad (4.108)$$

e

$$\sum_{j=1}^{M/2} \left[B_j^{p,q} \phi_{x,j,m+M/2}^{p,q} + B_{j+M/2}^{p,q} \phi_{x,j,m}^{p,q} e^{-(y_p-y_{p+1})/\gamma_j^{p,q}} \right. \\ \left. - B_j^{p+1,q} \phi_{x,j,m+M/2}^{p+1,q} e^{-(y_{p+1}-y_{p+2})/\gamma_j^{p+1,q}} \right. \\ \left. - B_{j+M/2}^{p+1,q} \phi_{x,j,m}^{p+1,q} \right] + W_{m+M/2}^{p,q} - W_{m+M/2}^{p+1,q} = 0, \quad (4.109)$$

para $m \in \{1, \dots, M/2\}$.

O sistema linear formado pelas Equações (4.65) – (4.68), (4.72) – (4.75), (4.81) – (4.84), (4.86) – (4.89), (4.91) – (4.94), (4.96) – (4.99), (4.100) – (4.103), (4.105) – (4.106) e (4.108) – (4.109) possui $4Mn_xn_y$ incógnitas e $4Mn_xn_y$ equações e sua solução determina os coeficientes $A_j^{p,q}$, $B_j^{p,q}$, $K_j^{p,q}$ e $W_j^{p,q}$ das soluções ADO-Nodal para os fluxos médios na variável y , conforme as Equações (4.54) e (4.55), e para os fluxos médios na variável x , de acordo com as Equações (4.56) e (4.57).

5 MÉTODO ADO PARA A APROXIMAÇÃO MULTIGRUPOS DE ENERGIA DA ADJUNTA DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE

Neste capítulo, é desenvolvida a formulação ADO para a aproximação multigrupos da equação adjunta à equação de transporte. É considerado o modelo em geometria cartesiana unidimensional com grau arbitrário de anisotropia.

De acordo com a Equação (3.55), a aproximação multigrupos de energia da adjunta da equação de transporte em geometria cartesiana unidimensional pode ser escrita como

$$\begin{aligned}
 -\mu \frac{\partial}{\partial z} \boldsymbol{\psi}^\dagger(z, \mu) + \boldsymbol{\sigma}(z) \boldsymbol{\psi}^\dagger(z, \mu) \\
 = \sum_{l=0}^L P_l(\mu) \boldsymbol{\sigma}_{s,l}^T(z) \int_{-1}^1 P_l(\mu') \boldsymbol{\psi}^\dagger(z, \mu') d\mu' + \mathbf{S}^\dagger(z, \mu),
 \end{aligned} \tag{5.1}$$

com $z \in [0, Z]$, onde $\boldsymbol{\psi}^\dagger$ é um vetor de dimensão G , cujos componentes representam o fluxo angular adjunto de cada grupo de energia, $\boldsymbol{\sigma}$ e $\boldsymbol{\sigma}_s$ são matrizes de ordem G contendo as seções de choque total e de espalhamento, respectivamente, e \mathbf{S}^\dagger é um vetor de ordem G contendo o termo fonte de cada grupo de energia.

Neste trabalho, as seções de choque são constantes por partes. Dessa forma, é assumida a existência de uma partição $\{0 = z_0 < z_1 < \dots < z_{n_z-1} < z_{n_z} = Z\}$ do intervalo $[0, Z]$ de forma que $\boldsymbol{\sigma}$ e $\boldsymbol{\sigma}_{s,l}$ sejam matrizes constantes em cada intervalo $[z_{r-1}, z_r]$. Em outras palavras, para cada $z \in \{1, \dots, n_z\}$, $\boldsymbol{\sigma}(z) = \boldsymbol{\sigma}_r$ e $\boldsymbol{\sigma}_{s,l}(z) = \boldsymbol{\sigma}_{s,l,r}$, com $z \in [z_{r-1}, z_r]$, onde $\boldsymbol{\sigma}_r$ e $\boldsymbol{\sigma}_{s,l,r}$ são matrizes constantes que representam, respectivamente, o valor da seção de choque total e de espalhamento no intervalo $[z_{r-1}, z_r]$. A Figura 5.1 exemplifica a configuração das partições, conforme a indexação estabelecida.

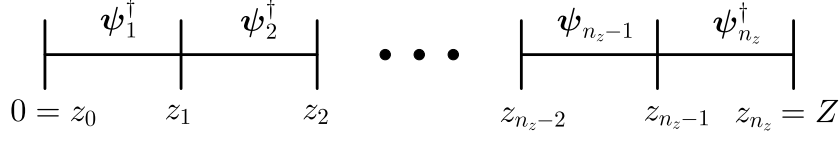


Figura 5.1: Exemplo de configuração de uma malha com n_z regiões.

Além disso, a Equação (5.1) está sujeita às condições de contorno definidas nas Equações (3.56) e (3.57) na forma

$$\boldsymbol{\psi}^\dagger(0, -\mu) = \rho_1 \boldsymbol{\psi}^\dagger(0, \mu), \quad (5.2)$$

na fronteira esquerda do domínio, e

$$\boldsymbol{\psi}^\dagger(Z, \mu) = \rho_2 \boldsymbol{\psi}^\dagger(Z, -\mu). \quad (5.3)$$

na fronteira direita.

Os números ρ_1 e ρ_2 representam os coeficientes de reflexão especular, conforme as Equações (3.56) e (3.57) e são, neste trabalho, assumidos como constantes tais que $\rho_i \in [0, 1]$, para $i \in \{1, 2\}$.

Por fim, embora as seções de choque possam ser descontínuas na interface entre regiões distintas de $[0, Z]$, o número esperado de nêutrons não é alterado por simplesmente cruzar a interface entre duas regiões com diferentes propriedades físicas. Assim, é imposta a continuidade do fluxo angular adjunto nas interfaces.

A aproximação em ordenadas discretas para a adjunta da equação de transporte, Equação (5.1), para cada um dos intervalos $[z_{r-1}, z_r]$ de $[0, Z]$, é escrita como [30, 82]

$$\begin{aligned} -\mu_j \frac{\partial}{\partial z} \boldsymbol{\psi}_r^\dagger(z, \mu_j) + \boldsymbol{\sigma}_r \boldsymbol{\psi}_r^\dagger(z, \mu_j) \\ = \sum_{l=0}^L P_l(\mu_j) \boldsymbol{\sigma}_{s,l,r}^T \sum_{n=1}^N w_n P_l(\mu_n) \boldsymbol{\psi}_r^\dagger(z, \mu_n) + \mathbf{S}_r^\dagger(z, \mu_j), \end{aligned} \quad (5.4)$$

para $j \in \{1, \dots, N\}$, onde $\boldsymbol{\psi}_r^\dagger$ e \mathbf{S}_r^\dagger representam, respectivamente, as restrições do fluxo angular adjunto e do termo fonte \mathbf{S}^\dagger ao intervalo $[z_{r-1}, z_r]$.

Além disso, cada μ_n representa um nó de uma regra de quadratura para o intervalo $[-1,1]$ e w_n é o respectivo peso associado ao nó μ_n [82]. Neste trabalho, são consideradas quadraturas de Gauss-Legendre de ordem N , mapeadas para o intervalo $[0,1]$, sendo obtidas, com isso, quadraturas para o intervalo $[-1,1]$ ao considerar os opostos dos nós positivos [14]. Dessa maneira, são definidos os nós $\mu_n > 0$ e $\mu_{n+N} = -\mu_n$, e os pesos $w_n = w_{n+N}$, para $n \in \{1, \dots, N\}$.

Por fim, a Equação (5.4) pode ser reescrita como

$$-\mu_j \frac{d}{dz} \boldsymbol{\psi}_r^\dagger(z, \mu_j) + \boldsymbol{\sigma}_r \boldsymbol{\psi}_r^\dagger(z, \mu_j) = \sum_{l=0}^L P_l(\mu_j) \boldsymbol{\sigma}_{s,l,r}^T \sum_{n=1}^N w_n P_l(\mu_n) [\boldsymbol{\psi}_r^\dagger(z, \mu_n) + (-1)^l \boldsymbol{\psi}_r^\dagger(z, -\mu_n)] + \mathbf{S}_r^\dagger(z, \mu_j), \quad (5.5)$$

e

$$\mu_j \frac{d}{dz} \boldsymbol{\psi}_r^\dagger(z, -\mu_j) + \boldsymbol{\sigma}_r \boldsymbol{\psi}_r^\dagger(z, -\mu_j) = \sum_{l=0}^L P_l(\mu_j) \boldsymbol{\sigma}_{s,l,r}^T \sum_{n=1}^N w_n P_l(\mu_n) [\boldsymbol{\psi}_r^\dagger(z, -\mu_n) + (-1)^l \boldsymbol{\psi}_r^\dagger(z, \mu_n)] + \mathbf{S}_r^\dagger(z, \mu_j), \quad (5.6)$$

para $j \in \{1, \dots, N\}$.

Na próxima seção são estabelecidas soluções para as versões homogêneas das Equações (5.5) e (5.6).

5.1 Soluções Homogêneas para a Aproximação em Ordenadas Discretas da Adjunta da Equação de Transporte

Nesta seção, são obtidas soluções para as versões homogêneas das Equações (5.5) e (5.6). Para isso, será adotado o subíndice h para representar a solução da equação homogênea. Além disso, os procedimentos seguidos nesta seção são idênticos para cada intervalo $[z_{r-1}, z_r]$ do domínio, sendo, portanto, o subíndice r desconsiderado a fim de simplificar a notação.

A forma homogênea das Equações (5.5) e (5.6) são dadas por

$$-\mu_j \frac{d}{dz} \boldsymbol{\psi}_h^\dagger(z, \mu_j) + \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\psi}_h^\dagger(z, \mu_j) = \sum_{l=0}^L P_l(\mu_j) \boldsymbol{\sigma}_{s,l,r}^T \sum_{n=1}^N w_n P_l(\mu_n) \left[\boldsymbol{\psi}_h^\dagger(z, \mu_n) + (-1)^l \boldsymbol{\psi}_h^\dagger(z, -\mu_n) \right], \quad (5.7)$$

e

$$\mu_j \frac{d}{dz} \boldsymbol{\psi}_h^\dagger(z, -\mu_j) + \boldsymbol{\sigma} \boldsymbol{\psi}_h^\dagger(z, -\mu_j) = \sum_{l=0}^L P_l(\mu_j) \boldsymbol{\sigma}_{s,l,r}^T \sum_{n=1}^N w_n P_l(\mu_n) \left[\boldsymbol{\psi}_h^\dagger(z, -\mu_n) + (-1)^l \boldsymbol{\psi}_h^\dagger(z, \mu_n) \right], \quad (5.8)$$

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

Na sequência, são buscadas soluções espectrais para as Equações (5.7) e (5.8) na forma [115]

$$\boldsymbol{\psi}_h^\dagger(z, \mu) = \boldsymbol{\phi}(\nu, \mu) e^{-z/\nu}, \quad (5.9)$$

para $z \in [z_{r-1}, z_r]$, onde $\boldsymbol{\phi}(\nu, \mu)$ é um vetor de G componentes e ν é uma constante de separação. A substituição da Equação (5.9) nas Equações (5.7) e (5.8) resultam, após algumas manipulações algébricas, no sistema de $2NG$ equações

$$\left(\boldsymbol{\sigma} + \frac{\mu_j}{\nu} \mathbf{I}_G \right) \boldsymbol{\phi}(\nu, \mu_j) = \sum_{l=0}^L P_l(\mu_j) \boldsymbol{\sigma}_{s,l}^T \times \sum_{n=1}^N w_n P_l(\mu_n) \left[\boldsymbol{\phi}(\nu, \mu_n) + (-1)^l \boldsymbol{\phi}(\nu, -\mu_n) \right], \quad (5.10)$$

e

$$\left(\boldsymbol{\sigma} - \frac{\mu_j}{\nu} \mathbf{I}_G \right) \boldsymbol{\phi}(\nu, -\mu_j) = \sum_{l=0}^L P_l(\mu_j) \boldsymbol{\sigma}_{s,l}^T \times \sum_{n=1}^N w_n P_l(\mu_n) \left[\boldsymbol{\phi}(\nu, -\mu_n) + (-1)^l \boldsymbol{\phi}(\nu, \mu_n) \right], \quad (5.11)$$

onde $j = 1, \dots, N$ e \mathbf{I}_G é a matriz identidade de ordem G . É conveniente a introdução dos vetores de dimensão NG [115]

$$\boldsymbol{\Phi}_+(\nu) = \left[\boldsymbol{\phi}^T(\nu, \mu_1) \ \cdots \ \boldsymbol{\phi}^T(\nu, \mu_N) \right]^T, \quad (5.12)$$

e

$$\mathbf{\Phi}_-(\nu) = [\boldsymbol{\phi}^T(\nu, -\mu_1) \cdots \boldsymbol{\phi}^T(\nu, -\mu_N)]^T. \quad (5.13)$$

Além disso, são definidas as matrizes de ordem NG

$$\mathbf{M} = \text{diag}(\mu_1 \mathbf{I}_G, \dots, \mu_N \mathbf{I}_G), \quad (5.14)$$

$$\mathbf{W} = \text{diag}(w_1 \mathbf{I}_G, \dots, w_N \mathbf{I}_G), \quad (5.15)$$

e

$$\mathbf{D} = \text{diag}(\overbrace{(\boldsymbol{\sigma}, \dots, \boldsymbol{\sigma})}^{N \text{ vezes}}). \quad (5.16)$$

E, por fim, as matrizes de dimensão $NG \times G$

$$\mathbf{\Pi}_l = [P_l(\mu_1) \mathbf{I}_G \cdots P_l(\mu_N) \mathbf{I}_G]^T, \quad (5.17)$$

para $l = 1, \dots, L$.

Através das definições supracitadas, é possível reescrever as Equações (5.10)

e (5.11) como

$$\left(\mathbf{D} + \frac{1}{\nu} \mathbf{M} \right) \mathbf{\Phi}_+(\nu) = \sum_{l=0}^L \mathbf{\Pi}_l \boldsymbol{\sigma}_{s,l}^T \mathbf{\Pi}_l^T \mathbf{W} [\mathbf{\Phi}_+(\nu) + (-1)^l \mathbf{\Phi}_-(\nu)], \quad (5.18)$$

e

$$\left(\mathbf{D} - \frac{1}{\nu} \mathbf{M} \right) \mathbf{\Phi}_-(\nu) = \sum_{l=0}^L \mathbf{\Pi}_l \boldsymbol{\sigma}_{s,l}^T \mathbf{\Pi}_l^T \mathbf{W} [\mathbf{\Phi}_-(\nu) + (-1)^l \mathbf{\Phi}_+(\nu)]. \quad (5.19)$$

É destacado que as Equações (5.18) e (5.19) possuem certa simetria que podem ser melhor exploradas através da definição dos vetores de dimensão NG

$$\mathbf{U}(\nu) = \mathbf{\Phi}_+(\nu) + \mathbf{\Phi}_-(\nu), \quad (5.20)$$

e

$$\mathbf{V}(\nu) = \mathbf{\Phi}_+(\nu) - \mathbf{\Phi}_-(\nu). \quad (5.21)$$

Ao somar as Equações (5.18) e (5.19), é obtida, ao substituir as Equações (5.20) e (5.21) na soma resultante, a expressão

$$\left(\mathbf{D} - \sum_{l=0}^L \mathbf{\Pi}_l \boldsymbol{\sigma}_{s,l}^T \mathbf{\Pi}_l^T \mathbf{W} [1 + (-1)^l] \right) \mathbf{U}(\nu) = -\frac{1}{\nu} \mathbf{M} \mathbf{V}(\nu). \quad (5.22)$$

De maneira similar, ao subtrair a Equação (5.19) da Equação (5.18), é possível escrever

$$\left(\mathbf{D} - \sum_{l=0}^L \mathbf{\Pi}_l \boldsymbol{\sigma}_{s,l}^T \mathbf{\Pi}_l^T \mathbf{W} [1 - (-1)^l] \right) \mathbf{V}(\nu) = -\frac{1}{\nu} \mathbf{M} \mathbf{U}(\nu). \quad (5.23)$$

São introduzidas as matrizes de dimensão $NG \times NG$

$$\mathbf{A} = \left(\mathbf{D} - \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L \mathbf{\Pi}_l \boldsymbol{\sigma}_{s,l}^T \mathbf{\Pi}_l^T \mathbf{W} [1 + (-1)^l] \right) \mathbf{M}^{-1}, \quad (5.24)$$

e

$$\mathbf{B} = \left(\mathbf{D} - \frac{1}{2} \sum_{l=0}^L \mathbf{\Pi}_l \boldsymbol{\sigma}_{s,l}^T \mathbf{\Pi}_l^T \mathbf{W} [1 - (-1)^l] \right) \mathbf{M}^{-1}, \quad (5.25)$$

bem como os vetores de NG componentes

$$\mathbf{X}(\nu) = \mathbf{M} \mathbf{U}(\nu), \quad (5.26)$$

e

$$\mathbf{Y}(\nu) = \mathbf{M} \mathbf{V}(\nu), \quad (5.27)$$

com a finalidade de reescrever as Equações (5.22) e (5.23) como

$$\mathbf{A} \mathbf{X}(\nu) = -\frac{1}{\nu} \mathbf{Y}(\nu), \quad (5.28)$$

e

$$\mathbf{B} \mathbf{Y}(\nu) = -\frac{1}{\nu} \mathbf{X}(\nu), \quad (5.29)$$

respectivamente. Dessa forma, é possível utilizar a Equação (5.29) para remover o termo $\mathbf{Y}(\nu)$ da Equação (5.28), o que resulta no problema de autovalores

$$\mathbf{B} \mathbf{A} \mathbf{X}(\nu) = \frac{1}{\nu^2} \mathbf{X}(\nu). \quad (5.30)$$

Alternativamente, poderia ter sido utilizada a Equação (5.28) para remover $\mathbf{X}(\nu)$ da Equação (5.29), obtendo, com isso, o problema de autovalores

$$\mathbf{A} \mathbf{B} \mathbf{Y}(\nu) = \frac{1}{\nu^2} \mathbf{Y}(\nu). \quad (5.31)$$

É possível utilizar tanto a Equação (5.30) quanto a Equação (5.31) para obter constantes de separação ν e, subsequentemente, autofunções $\phi(\nu, \mu)$ para a Equação (5.9). Assim, ao multiplicar a Equação (5.28) por $-\nu$ e adicionar à expressão resultante $\mathbf{X}(\nu)$ é obtida a autofunção

$$\Phi_+(\nu) = \frac{1}{2} \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{I}_{NG} - \nu \mathbf{A}) \mathbf{X}(\nu), \quad (5.32)$$

onde \mathbf{I}_{NG} é a matriz identidade de ordem NG .

De maneira similar, ao multiplicar a Equação (5.28) por ν e adicionar à equação resultante $\mathbf{X}(\nu)$ é obtida a autofunção

$$\Phi_-(\nu) = \frac{1}{2} \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{I}_{NG} + \nu \mathbf{A}) \mathbf{X}(\nu). \quad (5.33)$$

A partir das Equações (5.30) (ou (5.31)), (5.32) e (5.33), é verificado que

$$\Phi_+(-\nu) = \frac{1}{2} \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{I}_{NG} + \nu \mathbf{A}) \mathbf{X}(\nu) = \Phi_-(\nu), \quad (5.34)$$

e

$$\Phi_-(-\nu) = \frac{1}{2} \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{I}_{NG} - \nu \mathbf{A}) \mathbf{X}(\nu) = \Phi_+(\nu), \quad (5.35)$$

equivalência que permite escrever de maneira mais simples a solução homogênea para o modelo de ordenadas discretas da aproximação multigrupo da equação de transporte.

Uma consequência da similaridade entre a equação de transporte (2.37) e a sua equação adjunta (3.55) é que os problemas de autovalores definidos pelas Equações (5.30) e (5.31) são exatamente os mesmos que aqueles encontrados por Siewert [115] para a equação de transporte. Contudo, as autofunções nas Equações (5.32) e (5.33) aparecem com os sinais \pm antes de ν , intercalados com respeito às autofunções do método ADO para equação de transporte, conforme deduzidas por Siewert [115]. Consequentemente, o código computacional para a equação de transporte pode ser adaptado para o problema adjunto de transporte.

Se obtido um conjunto de $2NGn_z$ constantes de separação $\pm\nu_{i,r}$, $i \in \{1, \dots, NG\}$, e autofunções $\Phi_{+,r}$ e $\Phi_{-,r}$, para cada região r , $r \in \{1, \dots, n_z\}$, é possível escrever a solução homogênea da adjunta da equação de transporte como

$$\Psi_{h+,r}^\dagger(z) = \sum_{i=1}^{NG} \left[A_{i,r} \Phi_{+,r}(\nu_{i,r}) e^{-(z-z_{r-1})/\nu_{i,r}} + B_{i,r} \Phi_{-,r}(\nu_{i,r}) e^{-(z_r-z)/\nu_{i,r}} \right], \quad (5.36)$$

e

$$\Psi_{h-,r}^\dagger(z) = \sum_{i=1}^{NG} \left[A_{i,r} \Phi_{-,r}(\nu_{i,r}) e^{-(z-z_{r-1})/\nu_{i,r}} + B_{i,r} \Phi_{+,r}(\nu_{i,r}) e^{-(z_r-z)/\nu_{i,r}} \right], \quad (5.37)$$

para $z \in [z_{r-1}, z_r]$, onde as exponenciais foram transladada a fim de evitar riscos *overflow* numérico. Os vetores $\Psi_{h+,r}^\dagger(z)$ e $\Psi_{h-,r}^\dagger(z)$ nas Equações (5.36) e (5.37) são definidos como

$$\Psi_{h+,r}^\dagger(z) = \left[\psi_{hr}^{\dagger T}(z, \mu_1) \cdots \psi_{hr}^{\dagger T}(z, \mu_N) \right]^T, \quad (5.38)$$

e

$$\Psi_{h-,r}^\dagger(z) = \left[\psi_{hr}^{\dagger T}(z, -\mu_1) \cdots \psi_{hr}^{\dagger T}(z, -\mu_N) \right]^T. \quad (5.39)$$

Para a determinação das $2NGn_z$ constantes $A_{i,r}$ e $B_{i,r}$, com $i \in \{1, \dots, NG\}$ e $r \in \{1, \dots, n_z\}$, é preciso, ainda, de alguma solução particular para a adjunta da equação de transporte, tópico da próxima seção.

5.2 Soluções Gerais para a Aproximação em Ordenadas Discretas da Adjunta da Equação de Transporte

Neste trabalho, são consideradas apenas fontes de partículas que são constantes dentro de uma determinada região r , $r \in \{1, \dots, n_z\}$. Portanto, em decorrência da linearidade da Equação (5.1), é buscado um vetor constante de G

componentes, $\psi_{p_r}^\dagger$, como solução particular para a Equação (5.1). Assim, se \mathbf{S}_r^\dagger é a restrição de \mathbf{S}^\dagger sobre $[z_{r-1}, z_r]$, é obtida

$$\boldsymbol{\sigma}_r \psi_{p_r}^\dagger = \boldsymbol{\sigma}_{s,0,r}^T \psi_{p_r}^\dagger + \mathbf{S}_r^\dagger. \quad (5.40)$$

Uma solução particular pode ser obtida ao isolar $\psi_{p_r}^\dagger$ na Equação (5.40)

$$\psi_{p_r}^\dagger = (\boldsymbol{\sigma}_r - \boldsymbol{\sigma}_{s,0,r}^T)^{-1} \mathbf{S}_r^\dagger, \quad (5.41)$$

para $z \in [z_{r-1}, z_r]$, com $r \in \{1, \dots, n_z\}$, contando que $\boldsymbol{\sigma}_r - \boldsymbol{\sigma}_{s,0,r}^T$ seja uma matriz não-singular.

Por fim, ao definir os vetores de dimensão NG

$$\boldsymbol{\Psi}_{+,r}^\dagger(z) = \left[\psi_r^{\dagger T}(z, \mu_1) \cdots \psi_r^{\dagger T}(z, \mu_N) \right]^T, \quad (5.42)$$

e

$$\boldsymbol{\Psi}_{-,r}^\dagger(z) = \left[\psi_r^{\dagger T}(z, -\mu_1) \cdots \psi_r^{\dagger T}(z, -\mu_N) \right]^T, \quad (5.43)$$

é possível escrever a solução geral do modelo de ordenadas discretas da adjunta da equação de transporte como

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Psi}_{+,r}^\dagger(z) = \sum_{i=1}^{NG} \left[A_{i,r} \boldsymbol{\Phi}_{+,r}(\nu_{i,r}) e^{-(z-z_{r-1})/\nu_{i,r}} + \right. \\ \left. B_{i,r} \boldsymbol{\Phi}_{-,r}(\nu_{i,r}) e^{-(z_r-z)/\nu_{i,r}} \right] + \boldsymbol{\Psi}_{p_r}^\dagger, \end{aligned} \quad (5.44)$$

e

$$\begin{aligned} \boldsymbol{\Psi}_{-,r}^\dagger(z) = \sum_{i=1}^{NG} \left[A_{i,r} \boldsymbol{\Phi}_{-,r}(\nu_{i,r}) e^{-(z-z_{r-1})/\nu_{i,r}} + \right. \\ \left. B_{i,r} \boldsymbol{\Phi}_{+,r}(\nu_{i,r}) e^{-(z_r-z)/\nu_{i,r}} \right] + \boldsymbol{\Psi}_{p_r}^\dagger, \end{aligned} \quad (5.45)$$

para $r \in \{1, \dots, n_z\}$ e $z \in [z_{r-1}, z_r]$, onde a parcela da solução particular é definida como

$$\boldsymbol{\Psi}_{p_r}^\dagger = \overbrace{\left[\psi_{p_r}^{\dagger T} \cdots \psi_{p_r}^{\dagger T} \right]}^{N \text{ vezes}}. \quad (5.46)$$

Ainda é necessária a determinação das constantes $A_{i,j}$ e $B_{i,j}$. Para isso, podemos gerar um sistema linear matricial de ordem $2NGn_z$ através das condições de contorno do problema adjunto, Equações (5.2) e (5.3), e através das imposições de continuidade nas interfaces de regiões adjacentes.

6 O PROBLEMA FONTE-DETECTOR

Estimativas para o fluxo de partículas provenientes de fontes internas ou incidentes na fronteira do domínio do problema podem ser obtidas através do uso de detectores de partículas situados no interior da região de interesse [82, 105].

Conforme estabelecido no Capítulo 2, o fluxo angular de partículas em um domínio D é modelado através da equação de transporte

$$\mathcal{L}\psi = S, \quad (6.1)$$

sujeita às condições de contorno dadas por

$$\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}_{in}, E) = \psi_b(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}_{in}, E) + \rho\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}_{out}, E), \quad (6.2)$$

onde $\boldsymbol{\Omega}_{in}$ indica as direções de fluxo incidente na fronteira ∂D do domínio, $\boldsymbol{\Omega}_{out}$ as direções de fluxo emergente, ψ_b o fluxo incidente prescrito em ∂D e $\rho \in [0,1]$ é o coeficiente de reflexão.

A fim de evitar repetições desnecessárias, o operador \mathcal{L} , na Equação (6.1), é utilizado tanto para representar a Equação (3.3), no contexto bidimensional, quanto a Equação (3.38), no contexto unidimensional. Dessa forma, o domínio D pode ser um intervalo $[0,Z]$ ou um retângulo $[0,X] \times [0,Y]$. Além disso, o fluxo angular, ψ , a fonte interna, S , o fluxo incidente na fronteira, ψ_b , a posição, \mathbf{r} , a direção, $\boldsymbol{\Omega}$, e a energia, E , devem ser interpretados de acordo com o contexto unidimensional ou bidimensional.

É suposta a presença de um detector de partículas, com seção de choque de absorção σ_d , posicionado no interior do domínio, conforme as Figuras 6.1 ou 6.2, definido de acordo com

$$\sigma_d(z) = \begin{cases} \sigma_{d,r}, & \text{para } z \in [z_{r-1}, z_r], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (6.3)$$

no contexto unidimensional, para algum r fixo, ou

$$\sigma_d(x,y) = \begin{cases} \sigma_{d,p,q}, & \text{para } (x,y) \in [x_q, x_{q+1}] \times [y_{p+1}, y_p], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (6.4)$$

no contexto bidimensional, para algum p e q fixos, onde, em ambos os casos, σ_d é um número real positivo.

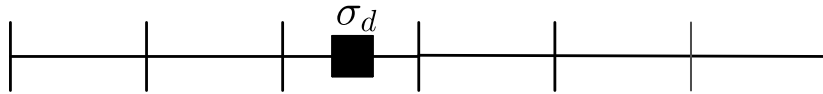


Figura 6.1: Detector no interior do domínio, caso em geometria cartesiana unidimensional.

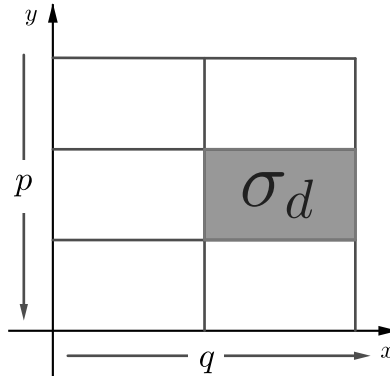


Figura 6.2: Detector no interior do domínio, caso em geometria cartesiana bidimensional.

A taxa de absorção de partículas, ou, ainda, a resposta do detector, é, então, definida por [30, 82, 105]

$$R = \langle \psi, \sigma_d \rangle, \quad (6.5)$$

onde $\langle \cdot, \cdot \rangle$ é o produto interno definido pelas Equações (3.5) ou (3.41).

A expressão apresentada na Equação (6.5), embora correta, não é a melhor opção quando for necessária a obtenção da absorção para fontes distintas, pois necessita que a equação de transporte seja resolvida sempre que as fontes internas ou

incidentes na fronteira forem alteradas. Nesse sentido, a introdução da adjunta da equação de transporte apresenta uma maneira mais conveniente de expressar a taxa de absorção, capaz de, com isso, superar tais dificuldades [82, 105]. Dada ψ^\dagger , solução da equação adjunta de transporte, representada nas Equações (3.26) ou (3.55), quando tomada por fonte a seção de choque de absorção do detector, isto é, ψ^\dagger é tal que

$$\mathcal{L}^\dagger \psi^\dagger = \sigma_d, \quad (6.6)$$

sujeita às condições de contorno

$$\psi^\dagger(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}_{out}, E) = \rho \psi^\dagger(\mathbf{r}, \mathbf{\Omega}_{in}, E), \quad (6.7)$$

então, através das Equações (3.4) ou (3.40), a taxa de absorção pode, também, ser obtida por meio da relação [30, 82, 105]

$$R = \langle \psi, \sigma_d \rangle = \langle \psi, \mathcal{L}^\dagger \psi^\dagger \rangle = \langle \mathcal{L} \psi, \psi^\dagger \rangle - P[\psi_b, \psi^\dagger] = \langle S, \psi^\dagger \rangle - P[\psi_b, \psi^\dagger], \quad (6.8)$$

onde o termo de fronteira, $P[\psi_b, \psi^\dagger]$, é definido pelas Equações (3.32) ou (3.47).

A vantagem da Equação (6.8) diante da Equação (6.5) está na forma com a qual elas dependem dos termos fonte: a Equação (6.5) depende indiretamente de S e ψ_b através de ψ , sendo necessária, portanto, uma nova avaliação da equação de transporte, Equação (6.1), sempre que fontes distintas forem utilizadas; por outro lado, como ψ^\dagger independe dos termos fonte S e ψ_b , a Equação (6.8) depende apenas diretamente dos termos fonte, requerendo, com isso, uma única avaliação da Equação (6.6) para o cálculo da taxa de absorção, desde que o detector permaneça inalterado.

Na próxima seção, o caráter analítico das formulações ADO é utilizado para deduzir expressões fechadas para a taxa de absorção, não requerendo, com isso, o uso de aproximações numérica adicionais.

6.1 Expressões Analíticas para a Taxa de Absorção em Geometria Cartesiana Bidimensional

Inicialmente é considerado o fluxo escalar adjunto de partículas, definido, aqui, por meio da expressão

$$\phi^\dagger(x,y) = \int_{\mathbb{S}'} \psi^\dagger(x,y,\mathbf{\Omega})d\mathbf{\Omega}, \quad (6.9)$$

para $(x,y) \in D$, onde $\mathbb{S}' = \{(\eta,\xi)|\eta^2 + \xi^2 \leq 1\}$.

Se, assim como definido no Capítulo 4, o domínio for particionado conforme $D = \bigcup D_{p,q}$, com $D_{p,q} = [x_q, x_{q+1}] \times [y_{p+1}, y_p]$, então, a partir da Equação (6.9), pode ser definido o fluxo escalar adjunto médio na variável y na região $D_{p,q}$ como

$$\phi_{y,p,q}^\dagger(x) = \frac{1}{h_{y,p,q}} \int_{y_{p+1}}^{y_p} \phi_{p,q}^\dagger(x,y)dy, \quad (6.10)$$

para $x \in [x_q, x_{q+1}]$, onde $h_{y,p,q}$ é dado pela Equação (4.10).

Ao considerar o ordenamento empregado para o fluxo médio na variável y , conforme estabelecido no Capítulo 4, o fluxo angular médio na variável y pode ser utilizado para reescrever a Equação (6.10) como

$$\phi_{y,p,q}^\dagger(x) = \sum_{n=1}^{M/2} w_n [\psi_{y,p,q}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_n) + \psi_{y,p,q}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_{n+M/2})]. \quad (6.11)$$

Com isso, é definido o fluxo escalar adjunto médio na região $D_{p,q}$ ao calcular a média da Equação (6.11) no intervalo $[x_q, x_{q+1}]$

$$\phi_{p,q}^\dagger = \frac{1}{h_{x,p,q}} \int_{x_q}^{x_{q+1}} \phi_{y,p,q}^\dagger(x)dx, \quad (6.12)$$

para $p \in \{1, \dots, n_y\}$ e $q \in \{1, \dots, n_x\}$, com $h_{x,p,q}$ definido pela Equação (4.16).

A fim de obter expressões baseadas na solução ADO-Nodal para a adjunta da equação de transporte, as Equações (4.54) e (4.55) podem ser utilizadas

para reescrever a Equação (6.11) como

$$\begin{aligned}
\phi_{y,p,q}^\dagger(x) = & \sum_{n=1}^{M/2} w_n \left\{ \right. \\
& \sum_{j=1}^{M/2} \left[A_j^{p,q} \phi_{y,j,n}^{p,q} e^{-(x-x_q)/\nu_j^{p,q}} + A_{j+\frac{M}{2}}^{p,q} \phi_{y,j,n+\frac{M}{2}}^{p,q} e^{-(x_{q+1}-x)/\nu_j^{p,q}} \right] \\
& + \sum_{j=1}^{M/2} \left[A_j^{p,q} \phi_{y,j,n+\frac{M}{2}}^{p,q} e^{-(x-x_q)/\nu_j^{p,q}} + A_{j+\frac{M}{2}}^{p,q} \phi_{y,j,n+\frac{M}{2}}^{p,q} e^{-(x_{q+1}-x)/\nu_j^{p,q}} \right] \\
& \left. + K_n^{p,q} + K_{n+\frac{M}{2}}^{p,q} \right\}. \tag{6.13}
\end{aligned}$$

Ao colocar em evidência na Equação (6.13) os termos com A_j e as autofunções $\phi_{y,j}$, é obtida a expressão

$$\begin{aligned}
\phi_{y,p,q}^\dagger(x) = & \sum_{n=1}^{M/2} w_n \sum_{j=1}^{M/2} \left\{ \left[A_j^{p,q} e^{-(x-x_q)/\nu_j^{p,q}} + A_{j+\frac{M}{2}}^{p,q} e^{-(x_{q+1}-x)/\nu_j^{p,q}} \right] \right. \\
& \left. \times \left[\phi_{y,j,n}^{p,q} + \phi_{y,j,n+\frac{M}{2}}^{p,q} \right] \right\} + \sum_{n=1}^{M/2} w_n \left[K_n^{p,q} + K_{n+\frac{M}{2}}^{p,q} \right]. \tag{6.14}
\end{aligned}$$

Como apenas as autofunções e os termos K_n dependem do índice n , a Equação (6.14) é reescrita como

$$\begin{aligned}
\phi_{y,p,q}^\dagger(x) = & \sum_{n=1}^{M/2} w_n \sum_{j=1}^{M/2} \left\{ \left[A_j^{p,q} e^{-(x-x_q)/\nu_j^{p,q}} + A_{j+\frac{M}{2}}^{p,q} e^{-(x_{q+1}-x)/\nu_j^{p,q}} \right] \phi_{y,j}^{0,p,q} \right\} \\
& + \phi_{y,j}^{1,p,q}, \tag{6.15}
\end{aligned}$$

onde $\phi_{y,j}^{0,p,q}$ e $\phi_{y,j}^{1,p,q}$ são tais que

$$\phi_{y,j}^{0,p,q} = \sum_{n=1}^{M/2} w_n \left[\phi_{y,j,n}^{p,q} + \phi_{y,j,n+\frac{M}{2}}^{p,q} \right], \tag{6.16}$$

e

$$\phi_{y,j}^{1,p,q} = \sum_{n=1}^{M/2} w_n \left[K_n^{p,q} + K_{n+\frac{M}{2}}^{p,q} \right]. \tag{6.17}$$

Com base na Equação (6.15), o fluxo escalar adjunto médio, conforme a Equação (6.12), pode ser escrito como

$$\phi_{p,q}^\dagger = \frac{1}{h_{x,p,q}} \sum_{j=1}^{M/2} \nu_j^{p,q} \left(1 - e^{-(x_{q+1}-x_q)/\nu_j^{p,q}}\right) \left(A_j^{p,q} + A_{j+M/2}^{p,q}\right) \phi_{y,j}^{0,p,q} + \phi_{y,j}^{1,p,q}, \quad (6.18)$$

onde foram utilizadas as integrais

$$\int_{x_q}^{x_{q+1}} e^{-(x-x_q)/\nu_j^{p,q}} dx = \int_{x_q}^{x_{q+1}} e^{-(x_{q+1}-x)/\nu_j^{p,q}} dx = \nu_j^{p,q} \left(1 - e^{-(x_{q+1}-x_q)/\nu_j^{p,q}}\right). \quad (6.19)$$

De forma análoga, uma expressão equivalente para a Equação (6.18) pode ser obtida com base nas Equações (4.56) e (4.57). Para isso, é considerado o fluxo escalar adjunto médio na variável x na região $D_{p,q}$

$$\phi_{x,p,q}^\dagger(y) = \frac{1}{h_{x,p,q}} \int_{x_q}^{x_{q+1}} \phi_{p,q}^\dagger(x,y) dx, \quad (6.20)$$

para $y \in [y_{p+1}, y_p]$, onde $h_{x,p,q}$ é dado pela Equação (4.16) e, por meio do ordenamento empregado para o fluxo médio na variável x , é obtida a expressão

$$\phi_{x,p,q}^\dagger(y) = \sum_{n=1}^{M/2} w_n [\psi_{x,p,q}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_n) + \psi_{x,p,q}^\dagger(x, \mathbf{\Omega}_{n+M/2})]. \quad (6.21)$$

Assim, é considerada uma definição alternativa para o fluxo escalar adjunto médio na região $D_{p,q}$ ao calcular a média da Equação (6.21) no intervalo $[y_{p+1}, y_p]$

$$\phi_{p,q}^\dagger = \frac{1}{h_{y,p,q}} \int_{y_{p+1}}^{y_p} \phi_{x,p,q}^\dagger(y) dy, \quad (6.22)$$

para $p \in \{1, \dots, n_y\}$ e $q \in \{1, \dots, n_x\}$, com $h_{y,p,q}$ definido pela Equação (4.10).

A partir de manipulações semelhantes àsquelas empregadas para a obtenção da Equação (6.18), é obtida a equação

$$\phi_{p,q}^\dagger = \frac{1}{h_{y,p,q}} \sum_{j=1}^{M/2} \gamma_j^{p,q} \left(1 - e^{-(y_p-y_{p+1})/\gamma_j^{p,q}}\right) \left(B_j^{p,q} + B_{j+M/2}^{p,q}\right) \phi_{x,j}^{0,p,q} + \phi_{x,j}^{1,p,q}, \quad (6.23)$$

onde $\phi_{x,j}^{0,p,q}$ e $\phi_{x,j}^{1,p,q}$ são tais que

$$\phi_{x,j}^{0,p,q} = \sum_{n=1}^{M/2} w_n \left[\phi_{x,j,n}^{p,q} + \phi_{x,j,n+\frac{M}{2}}^{p,q}\right], \quad (6.24)$$

e

$$\phi_{x,j}^{1,p,q} = \sum_{n=1}^{M/2} w_n \left[W_n^{p,q} + W_{n+\frac{M}{2}}^{p,q} \right]. \quad (6.25)$$

Vale destacar que o fluxo escalar adjunto médio é definido para cada uma das regiões do domínio do problema. Caso seja necessária a média em um número maior de regiões, é preciso adaptar a Equação (6.18) (ou (6.23)) para que a média seja calculada de forma adequada.

Através do uso das Equações (6.18) ou (6.23), a expressão para o cálculo do produto interno que faz parte da taxa de absorção definida na Equação (6.8) pode ser reescrita como

$$\begin{aligned} \langle S, \psi^\dagger \rangle &= \int_0^a \int_0^b \int_{\mathbb{S}'} S(x,y) \psi^\dagger(x,y, \mathbf{\Omega}) d\mathbf{\Omega} dy dx \\ &\approx \sum_{q=1}^{n_x} \sum_{p=1}^{n_y} \sum_{n=1}^{M/2} S_{p,q} w_n \int_{x_q}^{x_{q+1}} \int_{y_{p+1}}^{y_p} [\psi_{p,q}^\dagger(x,y, \mathbf{\Omega}_n) + \psi_{p,q}^\dagger(x,y, \mathbf{\Omega}_{n+M/2})] dy dx \\ &= \sum_{q=1}^{n_x} \sum_{p=1}^{n_y} S_{p,q} h_{y,p,q} \int_{x_q}^{x_{q+1}} \phi_{y,p,q}^\dagger(x) dx \\ &= \sum_{q=1}^{n_x} \sum_{p=1}^{n_y} S_{p,q} h_{x,p,q} h_{y,p,q} \phi_{p,q}^\dagger. \end{aligned} \quad (6.26)$$

Além disso, o termo $P[\psi_b, \psi^\dagger]$ na Equação (6.8) pode ser reescrito como

$$P[\psi, \psi^\dagger] = P_1[\psi, \psi^\dagger] + P_2[\psi, \psi^\dagger] + P_3[\psi, \psi^\dagger] + P_4[\psi, \psi^\dagger], \quad (6.27)$$

de onde decorre que, ao utilizar o ordenamento da quadratura do fluxo adjunto médio na variável x , os termos $P_1[\psi, \psi^\dagger]$ e $P_2[\psi, \psi^\dagger]$ podem ser escritos como

$$P_1[\psi, \psi^\dagger] = - \sum_{q=1}^{n_x} \sum_{m=1}^{M/2} w_m h_{x,n_y,q} f_{n_y,q} \psi_{x,n_y,q}^\dagger(0, \mathbf{\Omega}_m) \quad (6.28)$$

e

$$P_2[\psi, \psi^\dagger] = - \sum_{q=1}^{n_x} \sum_{m=1}^{M/2} w_m h_{x,1,q} f_{1,q} \psi_{x,1,q}^\dagger(b, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}), \quad (6.29)$$

onde foi utilizada a definição do fluxo angular médio na variável x dada na Equação (4.15).

Por outro lado, ao utilizar o ordenamento da quadratura para o fluxo integrado na variável y , $P_3[\psi, \psi^\dagger]$ e $P_4[\psi, \psi^\dagger]$ são tais que

$$P_3[\psi, \psi^\dagger] = - \sum_{p=1}^{n_y} \sum_{m=1}^{M/2} w_m h_{y,1,q} f_{p,1} \psi_{y,p,1}^\dagger(0, \mathbf{\Omega}_m) \quad (6.30)$$

e

$$P_4[\psi, \psi^\dagger] = - \sum_{p=1}^{n_y} \sum_{m=1}^{M/2} w_m h_{y,p,n_x} f_{p,n_x} \psi_{y,p,n_x}^\dagger(a, \mathbf{\Omega}_{m+M/2}), \quad (6.31)$$

pela definição do fluxo angular médio na variável y dada na Equação (4.9).

6.2 Expressões Analíticas para a Taxa de Absorção em Geometria Cartesiana Unidimensional

Assim como no cálculo das taxas de absorção em geometria cartesiana bidimensional, procedimentos análogos aos empregados na Seção 6.1 podem ser utilizados para a obtenção de expressões fechadas para a taxa de absorção no contexto da geometria cartesiana unidimensional.

Para isso, é assumido que o domínio do problema é particionado em uma união de intervalos contíguos, isto é,

$$[0, Z] = \bigcup_{r=1}^{n_z} [z_{r-1}, z_r], \quad (6.32)$$

para uma partição $\{0 = z_0 < z_1 < \dots < z_{n_z-1} < z_{n_z} = Z\}$ do intervalo $[0, Z]$.

Assim, é possível reescrever a expressão da taxa de absorção dada na Equação (6.8) como

$$\begin{aligned}
R = \langle \mathbf{S}, \boldsymbol{\psi}^\dagger \rangle - P[\boldsymbol{\psi}, \boldsymbol{\psi}^\dagger] = & \\
& \sum_{g=1}^G \sum_{r=1}^{n_z} \int_{z_{r-1}}^{z_r} \int_{-1}^1 \psi_{g,k}^\dagger(z, \mu) S_{g,k}(z, \mu) d\mu dz + \\
& \sum_{g=1}^G \int_0^1 \mu \left[f_{1,g}(\mu) \psi_{g,1}^\dagger(0, \mu) + f_{2,g}(\mu) \psi_{g,R}^\dagger(Z, -\mu) \right] d\mu,
\end{aligned} \tag{6.33}$$

ao utilizar as Equações (3.41) e (3.47).

Adicionalmente, no caso particular onde a fonte interna \mathbf{S} é um vetor constante em cada subintervalo $[z_{r-1}, z_r]$, para $r \in \{1, \dots, n_z\}$, e, além disso, sob a hipótese de que ambas \mathbf{f}_1 e \mathbf{f}_2 são vetores constantes, representando os fluxos incidentes nas fronteiras, é possível utilizar a linearidade da Equação (6.33) para escrever

$$R = r_{I,H} + r_{E,H} + r_{I,P} + r_{E,P}, \tag{6.34}$$

onde a parcela $r_{I,H}$ é definida como

$$r_{I,H} = \sum_{g=1}^G \sum_{r=1}^{n_z} S_{g,r} \int_{z_{r-1}}^{z_r} \int_{-1}^1 \psi_{h,g,r}^\dagger(z, \mu) d\mu dz, \tag{6.35}$$

o termo $r_{I,P}$ é dado por

$$r_{I,P} = \sum_{g=1}^G \sum_{r=1}^{n_z} S_{g,r} \int_{z_{r-1}}^{z_r} \int_{-1}^1 \psi_{p,g,r}^\dagger(z, \mu) d\mu dz, \tag{6.36}$$

por sua vez, $r_{E,H}$ é tal que

$$r_{E,H} = \sum_{g=1}^G \int_0^1 \mu \left[f_{1,g} \psi_{h,g,1}^\dagger(0, \mu) + f_{2,g} \psi_{h,g,n_z}^\dagger(Z, -\mu) \right] d\mu, \tag{6.37}$$

e, por fim, $r_{E,P}$ é dado por

$$r_{E,P} = \sum_{g=1}^G \int_0^1 \mu \left[f_{1,g} \psi_{p,g,1}^\dagger(0, \mu) + f_{2,g} \psi_{p,g,n_z}^\dagger(Z, -\mu) \right] d\mu, \tag{6.38}$$

onde $\psi_{h,g,r}^\dagger$ e $\psi_{p,g,r}^\dagger$ representam, respectivamente, as soluções homogênea e particular da adjunta da equação de transporte, referentes ao g -ésimo grupo de energia da r -ésima região, conforme as Equações (5.44) e (5.45).

Inicialmente, são considerados os termos advindos das soluções particulares. Assim, para $r_{I,P}$, é possível escrever

$$r_{I,P} = \sum_{g=1}^G \sum_{r=1}^{n_z} S_{g,r} \psi_{p,g,r}^\dagger \int_{z_{r-1}}^{z_r} \int_{-1}^1 d\mu dz = 2 \sum_{g=1}^G \sum_{r=1}^{n_z} (z_r - z_{r-1}) S_{g,r} \psi_{p,g,r}^\dagger, \quad (6.39)$$

e, para $r_{E,P}$,

$$\begin{aligned} r_{E,P} &= \sum_{g=1}^G \int_0^1 \mu \left[f_{1,g} \psi_{p,g,0}^\dagger + f_{2,g} \psi_{p,g,n_z}^\dagger \right] d\mu \\ &= \sum_{g=1}^G (f_{1,g} \psi_{p,g,0}^\dagger + f_{2,g} \psi_{p,g,n_z}^\dagger) \int_0^1 \mu d\mu \\ &= \sum_{g=1}^G \frac{f_{1,g} \psi_{p,g,0}^\dagger + f_{2,g} \psi_{p,g,n_z}^\dagger}{2}. \end{aligned} \quad (6.40)$$

Para as parcelas $r_{I,H}$ e $r_{E,H}$, é preciso considerar as expansões em autofunções para a solução homogênea da equação adjunta de transporte, dadas nas Equações (5.36) e (5.37). Assim, é escrita a expressão

$$\psi_{g,r}^\dagger(z, \pm \mu_i) = \sum_{j=1}^{NG} \left[A_{j,r} \phi_g(\nu_{j,r}, \pm \mu_i) e^{-\frac{(z-z_{r-1})}{\nu_{j,r}}} + B_{j,r} \phi_g(\nu_{j,r}, \mp \mu_i) e^{-\frac{(z_r-z)}{\nu_{j,r}}} \right], \quad (6.41)$$

para $g \in \{1, \dots, G\}$ e $r \in \{1, \dots, n_z\}$, onde $\phi_g(\nu_{j,r}, \pm \mu_i)$ representa a componente da autofunção $\Phi_{\pm,r}$ referente à direção $\pm \mu_i$ do g -ésimo grupo de energia.

O termo integral sobre as direções μ da Equação (6.35) pode ser reescrito como

$$\int_{-1}^1 \psi_{g,k}^\dagger(z, \mu) d\mu = \int_0^1 [\psi_{h,g,k}^\dagger(z, \mu) + \psi_{h,g,k}^\dagger(z, -\mu)] d\mu, \quad (6.42)$$

de onde, ao aplicar a aproximação em ordenadas discretas, é obtida a expressão

$$\int_{-1}^1 \psi_{g,r}^\dagger(z, \mu) d\mu \approx \sum_{i=1}^N w_i [\psi_{g,r}^\dagger(z, \mu) + \psi_{g,r}^\dagger(z, -\mu)]. \quad (6.43)$$

Com isso, ao substituir a Equação (6.41) na Equação (6.43), é obtida, após algumas manipulações algébricas, a expressão

$$\int_{-1}^1 \psi_{g,r}^\dagger(z, \mu) d\mu \approx \sum_{j=1}^{NG} \left(A_{j,r} e^{-(z-z_{r-1})/\nu_{j,r}} + B_{j,r} e^{-(z_r-z)/\nu_{j,r}} \right) \phi_{g,r,j}, \quad (6.44)$$

onde $\phi_{g,r,j}$ é tal que

$$\phi_{g,r,j} = \sum_{n=1}^N w_n [\phi_g(\nu_{j,r}, \mu_n) + \phi_g(\nu_{j,r}, -\mu_n)]. \quad (6.45)$$

Por fim, ao substituir a Equação (6.44) na Equação (6.36) é possível reescrever $r_{I,H}$ como

$$r_{I,H} = \sum_{g=1}^G \phi_{g,r} S_{g,r}, \quad (6.46)$$

onde $\phi_{g,r}$ é tal que

$$\phi_{g,k} = \sum_{i=1}^{NG} \nu_{i,k} \left(A_{i,k} + B_{i,k} \right) \left(1 - e^{-(z_k-z_{k-1})/\nu_{i,k}} \right) \phi_{i,g,k}, \quad (6.47)$$

expressão obtida ao integrar a Equação (6.44) em z , onde foram utilizadas as integrais

$$\int_{\alpha}^{\beta} e^{(z-z_{r-1})/\nu_{j,r}} dz = \nu_{j,r} \left[e^{(\alpha-z_{r-1})/\nu_{j,r}} - e^{(\beta-z_{r-1})/\nu_{j,r}} \right], \quad (6.48)$$

e

$$\int_{\alpha}^{\beta} e^{(z_r-z)/\nu_{j,r}} dz = \nu_{j,r} \left[e^{(z_r-\alpha)/\nu_{j,r}} - e^{(z_r-\beta)/\nu_{j,r}} \right]. \quad (6.49)$$

De forma semelhante, para o termo $r_{E,H}$ na Equação (6.37), a contribuição dos termos da fronteira que carregam a parte homogênea pode ser calculada como

$$r_{E,H} = \sum_{j=1}^{NG} \sum_{n=1}^N w_n \mu_n \left[\hat{\phi}_{g,j,n,1} f_{1,g} + \hat{\phi}_{g,j,n,n_z} f_{2,g} \right], \quad (6.50)$$

com

$$\hat{\phi}_{g,j,n,1} = A_{j,1} \phi_g(\nu_{j,1}, \mu_n) + B_{j,1} \phi_g(\nu_{j,1}, -\mu_n) e^{-z_1/\nu_{j,1}}, \quad (6.51)$$

e

$$\hat{\phi}_{g,j,n,n_z} = A_{j,n_z} \phi_g(\nu_{j,n_z}, -\mu_n) e^{-(Z-z_{n_z-1})/\nu_{j,n_z}} + B_{j,n_z} \phi_g(\nu_{j,n_z}, \mu_n). \quad (6.52)$$

Nas próximas seções, a formulação ADO-Nodal para a adjunta da equação de transporte em geometria cartesiana bidimensional e a formulação ADO para o problema dependente da energia em geometria cartesiana unidimensional são testados por meio do problema fonte-detector.

6.3 O Problema Fonte-Detector em Geometria Cartesiana Bidimensional

O método ADO-Nodal para a equação adjunta da equação de transporte, Equação (3.26), derivado no Capítulo 4, foi implementado em Fortran, utilizando o compilador gfortran 8.3¹, em um computador equipado com um processador Intel Core i5-4670, com frequência de 3,40 GHz, 16 GiB de RAM, rodando a distribuição Linux Manjaro 18.1.1². As operações de álgebra linear, como a resolução de problemas de autovalores e sistemas lineares, são efetuadas por meio das sub-rotinas da LAPACK [2], *DSPEV* e *DGESV*, respectivamente.

A verificação do método ADO-Nodal para a equação adjunta é feita de maneira numérica, através da abordagem fonte-detector apresentada neste capítulo. Para isso, é utilizada a regra de quadratura numérica LQ_N [82, 105], na qual o número de direções discretas consideradas é dada pela fórmula $M = N(N + 2)/2$, onde N representa a ordem da quadratura. Neste trabalho, são adotados nós e pesos disponíveis na literatura [82, 105], com $N \in \{2,4,6,8,12,16\}$. Dessa forma, o número máximo de direções utilizadas é 144 quando $N = 16$.

Por fim, para verificar a formulação ADO-Nodal desenvolvida, são considerados três problemas testes. A taxa de absorção obtida por meio da equação de transporte, Equação (6.5), é comparada com a taxa calculada a partir da solução do problema adjunto, Equação (6.8). Em cada um dos testes, a equação de transporte

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

²Disponível em <https://manjaro.org/>

é resolvida pela sua versão do método ADO-Nodal [21]. Além disso, em cada um dos problemas testes, o caso com a maior seção de choque de espalhamento – o mais complexo – é, também, resolvido através do método DD [82], onde o número de dígitos significativos é fixado por meio do refino tanto da malha espacial quanto do número de direções.

6.3.1 Problema Teste I

Neste problema teste é considerada uma variação do problema discutido por Kim e Lee [73] e Barichello *et. al.* [22]. Como domínio do problema, é suposto um quadrado $D = [0, 1] \times [0, 1]$, composto por material homogêneo e isotrópico. Além disso, é assumida a presença de fluxos incidentes prescritos ao longo da fronteira do problema. Em outras palavras, é assumido que

$$\psi(0, y, \mathbf{\Omega}_{in}) = 0, \quad (6.53)$$

$$\psi(1, y, \mathbf{\Omega}_{in}) = 0, \quad (6.54)$$

$$\psi(x, 0, \mathbf{\Omega}_{in}) = \frac{1}{\pi}, \quad (6.55)$$

e

$$\psi(x, 1, \mathbf{\Omega}_{in}) = 0, \quad (6.56)$$

nas fronteiras do domínio, bem como σ e σ_s constantes ao longo do domínio. De fato, a seção de choque macroscópica total é $\sigma_t = 1.0 \text{ cm}^{-1}$ e são considerados seis valores para a seção de choque de espalhamento σ_s , para qualquer $(x, y) \in D$. Por fim, a fonte interna de partículas é considerada nula no interior do domínio do problema. A Figura 6.3 ilustra a configuração do Problema Teste I.

Conforme a Figura 6.3 aponta, é assumida a presença de um detector de partículas na região definida por $[0,5, 1] \times [0, 0,5]$, com seção de choque de absorção $\sigma_d = 0,35 \text{ cm}^{-1}$, isto é,

$$\sigma_d(x, y) = \begin{cases} 0,35, & \text{para } (x, y) \in [0,5, 1] \times [0, 0,5], \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (6.57)$$

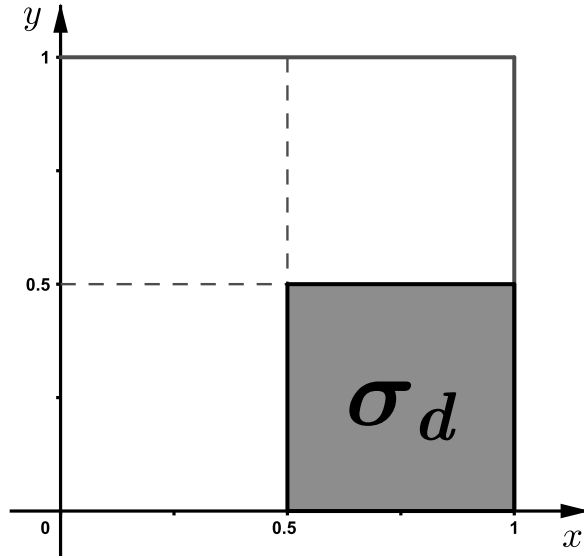


Figura 6.3: Problema Teste I: configuração do problema fonte-detector.

Na Tabela 6.1 são listados os resultados obtidos para a taxa de absorção, considerando a formulação via equação de transporte, Equação (6.5), denotado por R , e a formulação via equação adjunta, Equação (6.8), denotado por R^\dagger . É considerada uma malha uniforme 2×2 para o domínio.

Já, na Tabela 6.2, constam os mesmos resultados, considerando, contudo, uma malha uniforme 10×10 para o domínio do problema. Neste caso, vale destacar que não foi possível a determinação das taxas de absorção no computador utilizado nos testes ao considerar $N = 16$, devido a dimensão do sistema linear a ser resolvido para a obtenção da solução ADO-Nodal (sistema de ordem 57 600).

O número de dígitos apresentados na Tabela 6.2 foi utilizado para enfatizar a concordância entre as taxas de absorção ao manter número de direções e a discretização constante da malha. Com o acréscimo do número de direções ou o refino da malha, os resultados passaram a concordar em três ou dois dígitos, respectivamente.

Na Tabela 6.3, R_{DD} representa o valor da taxa de absorção calculada através do método DD para a equação de transporte, considerando 100 nós por cm

Tabela 6.1: Problema Teste I: taxas de absorção ($cm^{-1}s^{-1}$) do problema fonte-detector, malha 2×2 .

N	2		4	
	R	R^\dagger	R	R^\dagger
σ_s				
0,1	0,0310972717	0,0310972717	0,0284029635	0,0284029635
0,3	0,0331860651	0,0331860651	0,0305665043	0,0305665043
0,5	0,0356343040	0,0356343040	0,0331446573	0,0331446573
0,7	0,0385550827	0,0385550827	0,0362833610	0,0362833610
0,9	0,0421176579	0,0421176579	0,0402109946	0,0402109946
0,999	0,0441950116	0,0441950116	0,0425551210	0,0425551210
N	6		8	
	R	R^\dagger	R	R^\dagger
σ_s				
0,1	0,0276601510	0,0276601510	0,0272802093	0,0272802093
0,3	0,0298267423	0,0298267423	0,0294483852	0,0294483852
0,5	0,0324168556	0,0324168556	0,0320446356	0,0320446356
0,7	0,0355823105	0,0355823105	0,0352237229	0,0352237229
0,9	0,0395625030	0,0395625030	0,0392305561	0,0392305561
0,999	0,0419483302	0,0419483302	0,0416374647	0,0416374647
N	12		16	
	R	R^\dagger	R	R^\dagger
σ_s				
0,1	0,0269884422	0,0269884422	0,0268742014	0,0268742014
0,3	0,0291561584	0,0291561584	0,0290416522	0,0290416522
0,5	0,0317546258	0,0317546258	0,0316408265	0,0316408265
0,7	0,0349402638	0,0349402638	0,0348286863	0,0348286863
0,9	0,0389610448	0,0389610448	0,0388541674	0,0388541674
0,999	0,0413792940	0,0413792941	0,0412761783	0,0412761783

e tolerância de 10^{-12} para o processo iterativo. Os valores de $R_{2 \times 2}$ e $R_{10 \times 10}$, por sua vez, representam as taxas de absorção obtidas a partir do método ADO-Nodal para a adjunta da equação de transporte. Na tabela em questão, todos os testes são realizados considerando $\sigma_s = 0,999 \text{ cm}^{-1}$.

Conforme a Tabela 6.3 aponta, a partir de $N = 4$, os resultados concordaram em ao menos três dígitos. Entretanto, no que tange a utilização do método DD para este problema teste, é destacado que, mesmo com a utilização de malhas mais refinadas (de 200 até 500 nós por cm), não foi possível a obtenção de um

Tabela 6.2: Problema Teste I: taxas de absorção ($cm^{-1}s^{-1}$) do problema fonte-detector, malha 10×10 .

N	2		4	
σ_s	R	R^\dagger	R	R^\dagger
0,1	0,0302603066	0,0302603066	0,0270954168	0,0270954168
0,3	0,0323842772	0,0323842772	0,0292303461	0,0292303461
0,5	0,0348841559	0,0348841559	0,0317783214	0,0317783214
0,7	0,0378809047	0,0378809047	0,0348833826	0,0348833826
0,9	0,0415570866	0,0415570866	0,0387695397	0,0387695397
0,999	0,0437113450	0,0437113450	0,0410874627	0,0410874627
N	6		8	
σ_s	R	R^\dagger	R	R^\dagger
0,1	0,0264544797	0,0264544797	0,0262138098	0,0262138098
0,3	0,0285844225	0,0285844225	0,0283455886	0,0283455886
0,5	0,0311335142	0,0311335142	0,0309004716	0,0309004716
0,7	0,0342498544	0,0342498544	0,0340290639	0,0340290639
0,9	0,0381647912	0,0381647912	0,0379672514	0,0379672514
0,999	0,0405073817	0,0405073817	0,0403278693	0,0403278693
N	12			
σ_s	R	R^\dagger		
0,1	0,0260576294	0,0260576294		
0,3	0,0282488038	0,0282488038		
0,5	0,0308073434	0,0308073434		
0,7	0,0338984584	0,0338984584		
0,9	0,0378349969	0,0378349969		
0,999	0,0402405517	0,0402405516		

Tabela 6.3: Problema Teste I: taxas de absorção ($cm^{-1}s^{-1}$) do problema fonte-detector, obtidas a partir do método DD (R_{DD}) e do método ADO-Nodal para a adjunta em malha 2×2 ($R_{2 \times 2}$) e em malha 10×10 ($R_{10 \times 10}$).

N	R_{DD}	$R_{2 \times 2}$	$R_{10 \times 10}$
2	0,0376	0,0442	0,0437
4	0,0460	0,0426	0,0411
6	0,0477	0,0419	0,0405
8	0,0482	0,0416	0,0403
12	0,0486	0,0414	0,0402

número de dígitos de concordância superior aos apresentados na Tabela 6.3. Na Figura 6.4 são exibidos os erros relativos entre as taxas de absorção, considerando as várias seções de choque de espalhamento e as duas malhas.

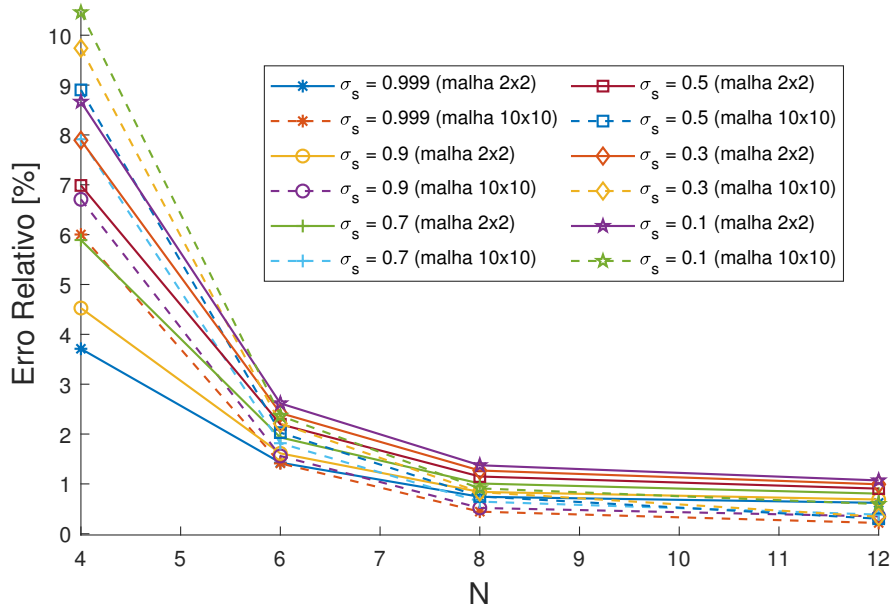


Figura 6.4: Problema Teste I: erros relativos percentuais entre R e R^\dagger , considerando malhas 2×2 e 10×10 para diversos valores de σ_s .

6.3.2 Problema Teste II

Neste problema teste é considerada uma variação do Problema Teste I. Para isso, é suposta a presença de 4 detectores de partículas, com seções de choque de absorção dadas por $\sigma_{d,1} = 0,2 \text{ cm}^{-1}$, $\sigma_{d,2} = 0,1 \text{ cm}^{-1}$, $\sigma_{d,3} = 0,3 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_{d,4} = 0,5 \text{ cm}^{-1}$. A Figura 6.5 indica a posição dos detectores no interior do domínio do problema.

Em decorrência da linearidade da equação adjunta, Equação (6.6), podem ser resolvidos quatro problemas adjuntos de transporte, considerando como

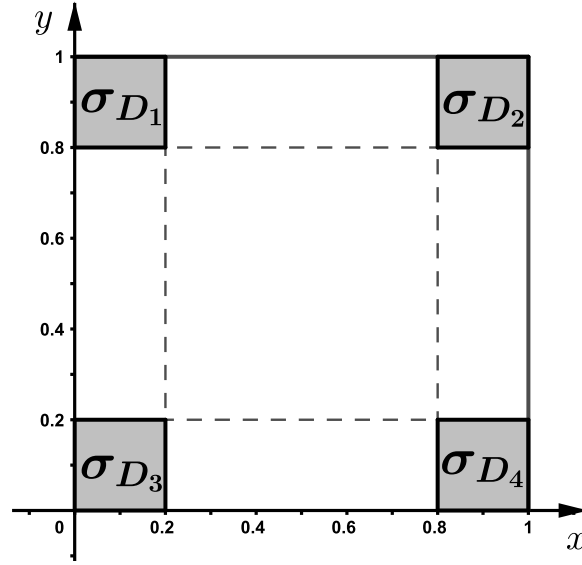


Figura 6.5: Problema Teste II: configuração do problema fonte-detector.

termo fonte a seção de choque de absorção de cada um dos detectores. Com isso, a taxa de absorção total dos quatro detectores, R^\dagger , pode ser calculada a partir da soma das taxas de absorção obtidas com cada um dos detectores. Contudo, é mais simples considerar a Equação (6.58) e resolver uma única vez a Equação (6.6) para determinar R^\dagger . Dessa forma, a seção de choque dos detectores podem ser escritas como

$$\sigma_d(x,y) = \begin{cases} 0,2, & \text{para } (x,y) \in [0, 0,2] \times [0,8, 1], \\ 0,1, & \text{para } (x,y) \in [0,8, 1] \times [0,8, 1], \\ 0,3, & \text{para } (x,y) \in [0, 0,2] \times [0, 0,2], \\ 0,5, & \text{para } (x,y) \in [0,8, 1] \times [0, 0,2], \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (6.58)$$

A Tabela 6.4 apresenta os resultados para a taxa de absorção calculada por meio da Equação (6.5), denotada por R , considerando a soma das taxas de absorção de todos os detectores. Analogamente, R^\dagger é utilizado para denotar a taxa de absorção calculada por meio da Equação (6.8). É assumido que o domínio do problema é uniformemente dividido em uma malha 5×5 .

Tabela 6.4: Problema Teste II: taxas de absorção ($cm^{-1}s^{-1}$) do problema fonte-detector, malha 5×5 .

N	2		4	
σ_s	R	R^\dagger	R	R^\dagger
0,3	0,7358495075	0,7358495075	0,7238909929	0,7238909929
0,5	0,7813789106	0,7813789106	0,7713596874	0,7713596874
0,9	0,9050096638	0,9050096638	0,9011726421	0,9011726421
0,999	0,9455976553	0,9455976552	0,9442610110	0,9442610110
N	6		8	
σ_s	R	R^\dagger	R	R^\dagger
0,3	0,7170449030	0,7170449030	0,7121059813	0,7121059813
0,5	0,7657100607	0,7657100607	0,7616020443	0,7616020443
0,9	0,8988920343	0,8988920343	0,8972466074	0,8972466074
0,999	0,9431464512	0,9431464508	0,9423827104	0,9423827106
N	12			
σ_s	R	R^\dagger		
0,3	0,7075609122	0,7075609122		
0,5	0,7578019411	0,7578019411		
0,9	0,8956325866	0,8956325866		
0,999	0,9415394423	0,9415394420		

Por sua vez, na Tabela 6.5 são apresentados os resultados para uma malha uniforme 10×10 .

Embora não tenham sido apresentados todos os dígitos nas Tabelas 6.4 e 6.5, as taxas de absorção calculadas via ambas as abordagens demonstraram grande concordância. Além disso, como no Problema Teste I, foram obtidas concordâncias de até dois ou três dígitos com o acréscimo da ordem de quadratura ou refino da malha, respectivamente.

Assim como no Problema Teste I, a Tabela 6.6 apresenta o valor da taxa de absorção calculada através do método DD para a equação de transporte, considerando 100 nós por cm e tolerância de 10^{-10} para o processo iterativo (R_{DD}), bem como as taxas de absorção obtidas a partir do método ADO-Nodal para a adjunta da equação de transporte ao utilizar malhas 5×5 ($R_{5 \times 5}$) e 10×10 ($R_{10 \times 10}$).

Tabela 6.5: Problema Teste II: taxas de absorção ($cm^{-1}s^{-1}$) do problema fonte-detector, malha 10×10 .

N	2		4	
σ_s	R	R^\dagger	R	R^\dagger
0,3	0,7322990263	0,7322990263	0,7201703460	0,7201703460
0,5	0,7785312351	0,7785312351	0,7686360182	0,7686360182
0,9	0,9041718289	0,9041718289	0,9009090151	0,9009090151
0,999	0,9454609234	0,9454609234	0,9447273148	0,9447273146
N	6		8	
σ_s	R	R^\dagger	R	R^\dagger
0,3	0,7135843073	0,7135843073	0,7090469879	0,7090469879
0,5	0,7632069548	0,7632069548	0,7594088529	0,7594088529
0,9	0,8988374540	0,8988374540	0,8972748823	0,8972748823
0,999	0,9438399965	0,9438399963	0,9430897803	0,9430897804
N	12			
σ_s	R	R^\dagger		
0,3	0,7049893659	0,7049893659		
0,5	0,7560075722	0,7560075722		
0,9	0,8958710125	0,8958710125		
0,999	0,9424151224	0,9424151228		

Ainda, na Tabela 6.6, todos os testes são realizados considerando $\sigma_s = 0,999 \text{ cm}^{-1}$.

Tabela 6.6: Problema Teste II: taxas de absorção ($cm^{-1}s^{-1}$) do problema fonte-detector, obtidas a partir do método DD (R_{DD}) e do método ADO-Nodal para a adjunta em malha 5×5 ($R_{5 \times 5}$) e em malha 10×10 ($R_{10 \times 10}$).

N	R_{DD}	$R_{5 \times 5}$	$R_{10 \times 10}$
2	0,945	0,946	0,946
4	0,945	0,944	0,945
6	0,944	0,943	0,944
8	0,944	0,942	0,943
12	0,942	0,942	0,942

Conforme a Tabela 6.6 indica, para todos os valores de N , os resultados concordaram em ao menos três dígitos. Assim como no Problema Teste I,

nos resultados apresentados na Tabela 6.6 para o método DD, não foi possível a obtenção de um número maior de dígitos de concordância com o refinamento da malha espacial. A Figura 6.6 apresenta erro relativo máximo inferior à 2% entre R e R^\dagger , considerando todas as configurações de seção de choque de espalhamento e de malha.

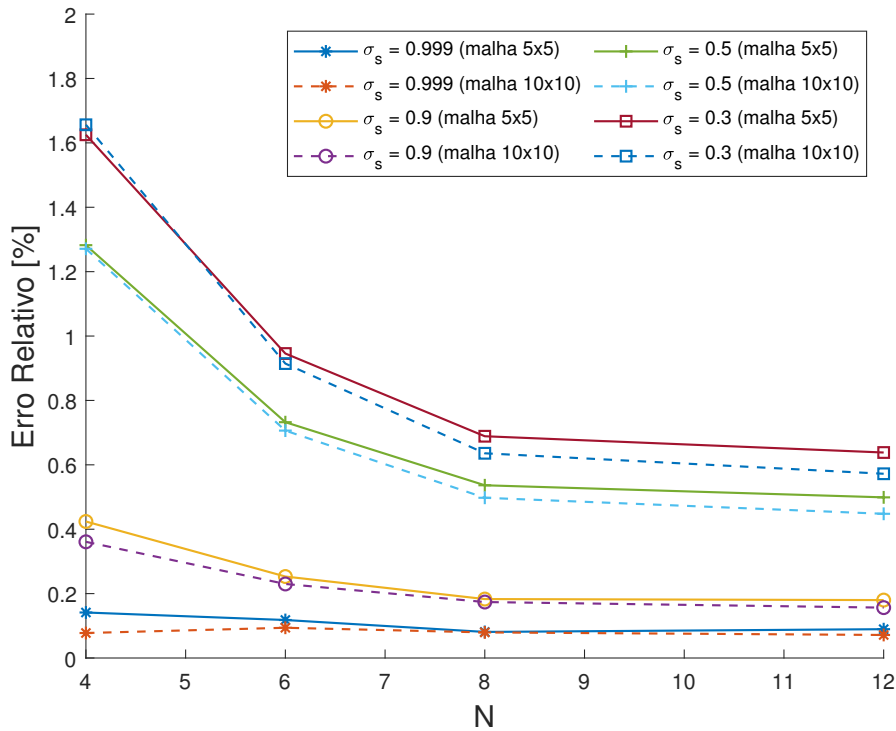


Figura 6.6: Problema Teste II: erros relativos percentuais entre R e R^\dagger , considerando malhas 5×5 e 10×10 para diversos valores de σ_s .

6.3.3 Problema Teste III

Para o Problema Teste III, é considerado um problema de fonte-fixa [44] em um domínio quadrado definido por $D = [0, 30] \times [0, 30]$. É suposta a presença de uma fonte isotrópica de partículas dada por $S(x,y) = 1.0$ na sub-região $[0, 10] \times [0, 10]$

do domínio do problema, isto é,

$$S(x,y) = \begin{cases} 1, & \text{para } (x,y) \in [0, 10] \times [0, 10], \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (6.59)$$

Adicionalmente, são supostas condições de contorno de vácuo em $x = 30$ cm e $y = 30$ cm, bem como reflexão em $x = 0$ cm e $y = 0$ cm, conforme

$$\psi(0,y,\mathbf{\Omega}_{in}) = \psi(0,y,\mathbf{\Omega}_{out}), \quad (6.60)$$

$$\psi(30,y,\mathbf{\Omega}_{in}) = 0, \quad (6.61)$$

$$\psi(x,0,\mathbf{\Omega}_{in}) = \psi(x,0,\mathbf{\Omega}_{out}), \quad (6.62)$$

e

$$\psi(x,30,\mathbf{\Omega}_{in}) = 0. \quad (6.63)$$

Com respeito ao meio físico, este é considerado homogêneo, com espalhamento isotrópico, onde a seção de choque macroscópica total vale $\sigma = 1.0 \text{ cm}^{-1}$, bem como três valores para a seção de choque de espalhamento, $\sigma_s = 0,3 \text{ cm}^{-1}$, $\sigma_s = 0,5 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_s = 0,9 \text{ cm}^{-1}$.

Além disso, é suposta a presença de um detector de partículas com seção de choque de absorção $\sigma_d = 0,1 \text{ cm}^{-1}$ na sub-região $[0, 10] \times [10, 20]$ do domínio, isto é,

$$\sigma_d(x,y) = \begin{cases} 0,1, & \text{para } (x,y) \in [0, 10] \times [10, 20], \\ 0, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (6.64)$$

A Figura 6.7 ilustra a configuração do problema teste.

Nas Tabelas 6.7 e 6.8 são apresentados os resultados para R e R^\dagger , considerando malhas 3×3 e 6×6 , respectivamente. Assim como anteriormente, ao fixar o número de direções discretas e a discretização da malha, os valores de R e R^\dagger concordaram em até dez dígitos. Com o refino da regra de quadratura ou da malha, os resultados concordaram em até dois ou três dígitos, respectivamente.

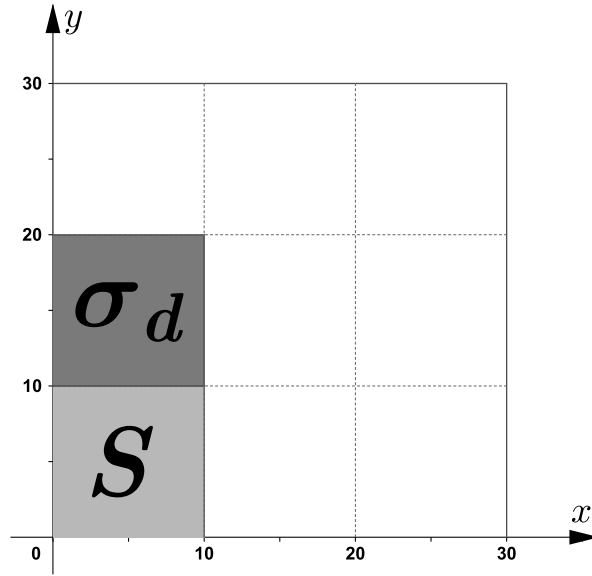


Figura 6.7: Problema Teste III: configuração do problema fonte-detector.

Tabela 6.7: Problema Teste III: taxas de absorção ($cm^{-1}s^{-1}$) do problema fonte-detector, malha 3×3 .

N	4		6	
σ_s	R	R^\dagger	R	R^\dagger
0.3	1.7143299409	1.7143299409	1.6935596138	1.6935596138
0.5	2.8451693217	2.8451693217	2.8205869480	2.8205869480
0.9	30.2961992311	30.2961992311	30.2647714814	30.2647714814
N	8		12	
σ_s	R	R^\dagger	R	R^\dagger
0.3	1.6837505322	1.6837505322	1.6765125777	1.6765125777
0.5	2.8093879971	2.8093879971	2.8014633679	2.8014633679
0.9	30.2525983726	30.2525983726	30.2457855079	30.2457855079
N	16			
σ_s	R	R^\dagger		
0.3	1.6735047539	1.6735047539		
0.5	2.7982618876	2.7982618876		
0.9	30.2429516821	30.2429516821		

A Tabela 6.9 apresenta o valor da taxa de absorção calculada através do método DD para a equação de transporte, considerando 30 nós por cm e tolerância de 10^{-6} para o processo iterativo (R_{DD}). As taxas de absorção obtidas a partir do

Tabela 6.8: Problema Teste III: taxas de absorção ($cm^{-1}s^{-1}$) do problema fonte-detector, malha 6×6 .

N	4		6	
	R	R^\dagger	R	R^\dagger
σ_s				
0.3	1.7125395942	1.7125395942	1.6918557950	1.6918557950
0.5	2.8438406986	2.8438406986	2.8194014924	2.8194014924
0.9	30.5567526996	30.5567526996	30.5279702823	30.5279702823
N	8		12	
	R	R^\dagger	R	R^\dagger
σ_s				
0.3	1.6820872500	1.6820872500	1.6748803849	1.6748803849
0.5	2.8082721202	2.8082721202	2.8004035637	2.8004035637
0.9	30.5171318713	30.5171318713	30.5114281310	30.5114281310
N	16			
	R	R^\dagger		
σ_s				
0.3	1.6718859346	1.6718859346		
0.5	2.7972270178	2.7972270178		
0.9	30.5090804275	30.5090804275		

método ADO-Nodal para a adjunta da equação são calculadas com malhas 3×3 ($R_{3 \times 3}$) e 6×6 ($R_{6 \times 6}$). Por fim, na Tabela 6.9 é considerado apenas o caso com $\sigma_s = 0,9 \text{ cm}^{-1}$.

Tabela 6.9: Problema Teste III: taxas de absorção ($cm^{-1}s^{-1}$) do problema fonte-detector, obtidas a partir do método DD (R_{DD}) e do método ADO-Nodal para a adjunta em malha 3×3 ($R_{3 \times 3}$) e em malha 6×6 ($R_{6 \times 6}$).

N	R_{DD}	$R_{3 \times 3}$	$R_{6 \times 6}$
4	31,608	30,296	30,557
6	31,045	30,265	30,528
8	31,002	30,253	30,517
12	30,984	30,246	30,511
16	30,973	30,243	30,509

A Tabela 6.9 mostra concordância de apenas um dígito entre os resultados obtidos via método DD e aqueles calculados com o método ADO-Nodal para a adjunta da equação de transporte. Contudo, é preciso destacar que, em decorrência

da dimensão do domínio deste problema teste ser muito maior que a dimensão dos casos anteriores, o número de nós por cm considerados na aplicação do método DD foi muito menor, a fim de viabilizar a execução computacional em tempo hábil. Por fim, na Figura 6.8 são comparados os erros relativos entre R e R^\dagger considerando as diversas seções de choque de espalhamento, bem como ambas as malhas consideradas.

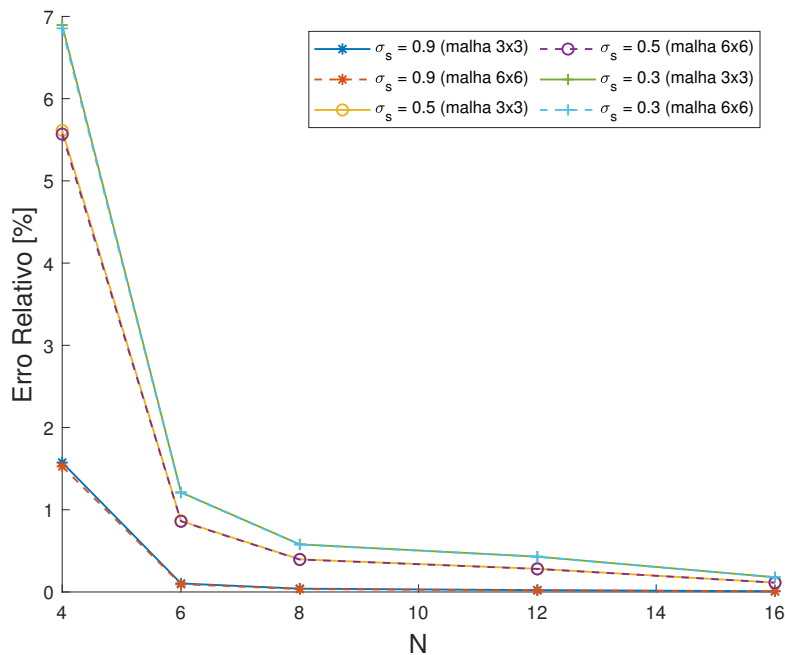


Figura 6.8: Problema Teste III: erros relativos percentuais entre R e R^\dagger , considerando malhas 3×3 e 6×6 para diversos valores de σ_s .

Com o uso da abordagem fonte-detector, o método ADO-Nodal para a adjunta da equação de transporte no contexto da geometria cartesiana bidimensional conseguiu reproduzir as taxas de absorção obtidas através da formulação ADO-Nodal para a equação de transporte com excelente precisão [22]. Além disso, quando comparado com os resultados obtidos através do método DD, houve concordância de até dois dígitos em todos os casos. Ainda, a abordagem ADO-Nodal para a adjunta da equação de transporte possibilitou o uso de expressões fechadas para as

taxas de absorção, fato que eliminou a necessidade do uso de regras de quadratura ou aproximações adicionais.

Por fim, é preciso destacar que os parâmetros das simulações apresentadas neste trabalho foram escolhidos de acordo com a capacidade da máquina previamente descrita, bem como para a utilização de técnicas diretas para a resolução do sistema linear envolvido no último passo da obtenção das soluções dos fluxos médios via formulação ADO-Nodal. De fato, para o Problema Teste III, com malha 6×6 e $N = 16$, foram necessários cerca de 5 minutos para a obtenção da solução ADO-Nodal. Em contraste, o método DD necessitou de uma malha muito mais refinada (900×900) para obter um número equivalente de dígitos de convergência, tomando, para isso, cerca de 1 hora e 40 minutos.

6.4 O Problema Fonte-Detector em Geometria Cartesiana Unidimensional

O método ADO para a aproximação multigrupos de energia da equação adjunta da equação de transporte no contexto unidimensional, derivado no Capítulo 5, foi implementado no mesmo sistema computacional utilizado para a obtenção dos resultados em geometria cartesiana bidimensional.

Assim como anteriormente, a verificação do método ADO para a equação adjunta se dá de maneira numérica, através da abordagem fonte-detector apresentada neste capítulo. Para isso, é utilizada a regra de quadratura clássica de Gauss-Legendre [35] de ordem N , par, mapeada do intervalo $[-1,1]$ para o intervalo $[0,1]$. Portanto, o número de direções discretas consideradas é $2N$ ao refletir a quadratura do intervalo $[0,1]$ para o intervalo $[-1,1]$.

Assim como no caso anterior, o último passo para a obtenção da solução ADO da adjunta da equação de transporte é a resolução de um sistema linear de equações, contudo de ordem $2n_z N$.

Por fim, para verificar a formulação ADO desenvolvida, são considerados dois problemas testes. A taxa de absorção obtida por meio da equação de transporte, Equação (6.5), é comparada com a taxa obtida a partir da solução do problema adjunto, Equação (6.8). A equação de transporte é resolvida pela sua versão do método ADO [14], bem como por meio do método DD.

6.4.1 Problema Teste IV

É considerado um problema com dois grupos de energia em meio isotrópico heterogêneo definido no intervalo $[0, 100]$. O meio em questão é composto por quatro regiões, com diferentes propriedades físicas, conforme a Figura 6.9 [24].

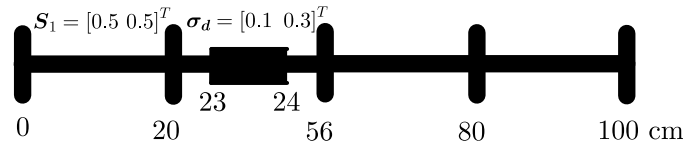


Figura 6.9: Problema Teste IV: configuração do problema fonte-detector.

Adicionalmente, são assumidas condições de contorno reflexivas em $z = 0$ cm e de vácuo em $z = 100$ cm, isto é,

$$\psi(0, \mu) = \psi(0, -\mu), \quad (6.65)$$

$$\psi(100, -\mu) = \mathbf{0}, \quad (6.66)$$

para $\mu \in (0, 1]$.

Além disso, é assumida a existência de uma fonte interna de partículas \mathbf{S} no interior do domínio do problema, dada por $\mathbf{S}_r = \mathbf{0}$ para a região r , com

$r \in \{2,3,4\}$. Na primeira região, $r = 1$, é suposto que

$$\mathbf{S}_1(z, \mu) = \begin{pmatrix} 0,5 \\ 0,5 \end{pmatrix}, \quad (6.67)$$

para $z \in [0, 20]$ e $\mu \in [-1, 1]$. Em adição, as seções de choque macroscópicas totais (cm^{-1}) e de transferência entre grupos (cm^{-1}) são, para cada região r , $r \in \{1,2,3,4\}$, dadas por [24]

$$\boldsymbol{\sigma}_1 = \begin{bmatrix} 1,00 & 0,00 \\ 0,00 & 1,20 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_{s,0,1} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0,90 & 0,05 \\ 0,20 & 0,80 \end{bmatrix}, \quad (6.68)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_2 = \begin{bmatrix} 0,90 & 0,00 \\ 0,00 & 1,50 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_{s,0,2} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0,75 & 0,10 \\ 0,30 & 0,99 \end{bmatrix}, \quad (6.69)$$

$$\boldsymbol{\sigma}_3 = \begin{bmatrix} 1,10 & 0,00 \\ 0,00 & 0,85 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_{s,0,3} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0,95 & 0,00 \\ 0,60 & 0,20 \end{bmatrix}, \quad (6.70)$$

e

$$\boldsymbol{\sigma}_4 = \begin{bmatrix} 1,00 & 0,00 \\ 0,00 & 1,20 \end{bmatrix}, \quad \boldsymbol{\sigma}_{s,0,4} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 0,90 & 0,05 \\ 0,20 & 0,80 \end{bmatrix}, \quad (6.71)$$

respectivamente. Por fim, é assumida a presença de um detector de partículas no interior da placa, para o qual é definida a seção de choque macroscópica de absorção $\boldsymbol{\sigma}_d$ (cm^{-1}) como

$$\boldsymbol{\sigma}_d(z, \mu) = \begin{cases} \begin{pmatrix} 0,1 \\ 0,3 \end{pmatrix}, & \text{para } z \in [23, 24], \\ \mathbf{0}, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (6.72)$$

É salientado que antes de comparar as taxas de absorção estimadas por ambas as formulações ADO, foram realizados testes com o fluxo escalar, comparando os valores obtidos com os resultados previamente listados por Barros e Larsen [24], não sendo possível, porém, encontrar concordância entre os dados. De fato, de acordo com um dos autores, os resultados tabulados em [24] foram posteriormente

corrigidos por uma implementação alternativa que fez uso do método *Response Matrix* [26]. Com isso, foi possível encontrar concordância entre oito e dez dígitos entre os resultados obtidos com a formulação ADO com os obtidos por Barros e Silva [26]. Além disso, o fluxo escalar foi, também, calculado utilizando uma implementação do método DD [82], apresentando, contudo, concordância de apenas seis dígitos quando comparado com os resultados do método ADO.

Na Tabela 6.10 são apresentados os resultados numéricos para a taxa de absorção R_{DD} , estimada através do método DD, considerando 100 nós por cm e tolerância de 10^{-12} para o processo iterativo; R , estimada através da Equação (6.5) via método ADO clássico; e, por fim, R^\dagger , por meio da Equação (6.8) utilizando a formulação ADO para a equação adjunta. Para os teste, é considerado $N \in \{2,4,8,16,32,64\}$.

Tabela 6.10: Problema Teste IV: taxas de absorção ($cm^{-1}s^{-1}$) do problema fonte-detector, obtidas a partir do método DD (R_{DD}), a partir do método ADO para a equação do transporte (R) e a partir do método ADO para a adjunta da equação do transporte (R^\dagger).

N	R_{DD}	R	R^\dagger
2	0,19672045103	0,19672070465	0,19672070465
4	0,19618888375	0,19618914572	0,19618914572
8	0,19618584726	0,19618610963	0,19618610963
16	0,19618584755	0,19618610990	0,19618610990
32	0,19618584751	0,19618610982	0,19618610982
64	0,19618584751	0,19618610981	0,19618610981

Ao analisar a Tabela 6.10, é possível verificar que todos os resultados foram idênticos para as taxas de absorção calculadas através de ambas as abordagens ADO. Vale destacar que o número de dígitos exibidos foram limitados pela convergência na variável angular. Além disso, $|R - R^\dagger| = O(10^{-16})$ para todos valores de N testados. É salientado que tais resultados foram possíveis apenas quando utilizadas as expressões analíticas para a taxa de absorção. Quanto utilizada inte-

gração numérica nas expressões das taxas de absorção, o melhor resultado obtido foi $|R - R^\dagger| = O(10^{-10})$. Adicionalmente, os testes com fórmulas explícitas tomaram menos de um segundo para serem executados, cerca de cem vezes mais rápido que utilizando integração numérica para a variável z . Além disso, ao comparar os resultados obtidos via método ADO com aqueles calculados a partir do método DD, é verificada concordância de até seis dígitos.

6.4.2 Problema Teste V

Inicialmente proposto por Siewert [114], um problema mais desafiador consiste em um modelo relacionado ao espalhamento de nêutrons em água, o qual considera uma aproximação para a dependência energética em seis grupos de energia. As cinco matrizes definidas nas Equações (6.73), (6.74), (6.75), (6.76) e (6.77) representam as seções de choque totais (cm^{-1}) e os dados de transferência entre grupos (cm^{-1}) de um problema em meio homogêneo, definido para $z \in [0, 30]$, onde é considerado grau de anisotropia $L = 3$. Em decorrência de ser um meio homogêneo, é deixado de lado o subíndice r utilizado para especificar as regiões. Além disso, é denotado $x \times 10^e$ por $x(+e)$, para qualquer número inteiro e . Assim, são definidas

$$\sigma = \text{diag}(1,50520, 1,57051, 3,51907, 6,26226, 14,0294, 42,14920), \quad (6.73)$$

$$\sigma_{s,0} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 8,07750(-1) & 0,00000(+0) & 0,00000(+0) & 0,00000(+0) & 0,00000(+0) & 0,00000(+0) \\ 6,26456(-1) & 9,84040(-1) & 9,79447(-2) & 4,70592(-2) & 1,26378(-1) & 3,97098(-1) \\ 6,16969(-2) & 5,22489(-1) & 3,09892(+0) & 2,01540(+0) & 3,24243(+0) & 9,62747(+0) \\ 6,16969(-3) & 5,15850(-2) & 2,97524(-1) & 3,88257(+0) & 8,22842(+0) & 2,42148(+1) \\ 6,16969(-4) & 5,15850(-3) & 3,48269(-3) & 2,43839(-1) & 2,09399(+0) & 5,46759(+0) \\ 6,83147(-5) & 5,72919(-4) & 9,81407(-5) & 6,67680(-3) & 1,27601(-1) & 1,77484(+0) \end{bmatrix}, \quad (6.74)$$

$$\sigma_{s,1} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1,73809(+0) & 0,00000(+0) & 0,00000(+0) & 0,00000(+0) & 0,00000(+0) & 0,00000(+0) \\ 1,00096(+0) & 2,06953(+0) & 3,65035(-2) & -7,17931(-3) & -6,57000(-3) & -6,21269(-3) \\ 3,23741(-2) & 7,97905(-1) & 1,84248(+0) & -8,37651(-1) & -9,50478(-1) & -8,87500(-1) \\ 1,16883(-3) & 2,58418(-2) & -1,42702(-2) & 1,51150(+0) & -1,42204(-1) & -5,72883(-1) \\ 8,28375(-5) & 9,49379(-4) & -1,60567(-3) & 7,80252(-2) & 1,18387(+0) & 1,21816(+0) \\ 2,28725(-5) & 9,04254(-5) & -1,63418(-5) & 3,64032(-4) & 2,94178(-2) & 5,93333(-1) \end{bmatrix}, \quad (6.75)$$

$$\sigma_{s,2} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1,89361(+0) & 0,00000(+0) & 0,00000(+0) & 0,00000(+0) & 0,00000(+0) & 0,00000(+0) \\ -1,16776(-2) & 2,03360(+0) & -2,78866(-2) & -3,66853(-3) & -5,40201(-3) & -1,56529(-2) \\ -1,38579(-1) & -1,00130(-1) & 4,28177(-1) & -4,78174(-1) & -1,90615(-1) & -3,91507(-1) \\ -1,52290(-2) & -1,16769(-1) & -6,28730(-2) & 5,52373(-1) & -5,57599(-1) & -1,08378(+0) \\ -1,53296(-3) & -1,27412(-2) & -3,69913(-4) & 4,15341(-2) & 7,64138(-1) & 1,96411(-1) \\ -1,61574(-4) & -1,41761(-3) & -4,41786(-6) & -2,23975(-4) & 3,03330(-2) & 2,98538(-1) \end{bmatrix}, \quad (6.76)$$

e

$$\sigma_{s,3} = \frac{1}{2} \begin{bmatrix} 1,28480(+0) & 0,00000(+0) & 0,00000(+0) & 0,00000(+0) & 0,00000(+0) & 0,00000(+0) \\ -1,17471(+0) & 1,09070(+0) & -2,12993(-2) & -7,43655(-4) & -5,91497(-4) & -5,66126(-4) \\ -1,05643(-1) & -1,00250(+0) & 4,61562(-1) & -1,88398(-1) & -8,54669(-2) & -7,69580(-2) \\ -4,05881(-3) & -8,45487(-2) & -2,85371(-2) & 7,24719(-1) & -1,03599(-2) & 6,50889(-2) \\ -2,88894(-4) & -3,29773(-3) & -1,53968(-4) & 5,10368(-2) & 7,61976(-1) & 2,89226(-1) \\ -7,47744(-5) & -3,13307(-4) & -1,46113(-6) & 5,06034(-5) & 3,23582(-2) & 2,85246(-1) \end{bmatrix}. \quad (6.77)$$

Uma modificação do problema original foi a inclusão de uma fonte interna de partículas $\mathbf{S} = [S_1 \ S_2 \ S_3 \ S_4 \ S_5 \ S_6]^T$, cujos componentes são dados por

$$S_1(z) = \begin{cases} 4, & \text{para } z \in [5, 6], \\ 6, & \text{para } z \in [27, 28], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (6.78)$$

$$S_4(z) = \begin{cases} 10, & \text{para } z \in [20, 22], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (6.79)$$

$$S_6(z) = \begin{cases} 7, & \text{para } z \in [13, 14], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (6.80)$$

e $S_g(z) = 0$, para $z \in [0, 30]$, com $g \in \{2, 3, 5\}$. Como condições de contorno, é assumido vácuo, isto é,

$$\boldsymbol{\psi}(0, \mu) = \mathbf{0}, \quad (6.81)$$

e

$$\boldsymbol{\psi}(30, -\mu) = \mathbf{0}, \quad (6.82)$$

para $\mu \in [0, 1]$.

Além disso, é assumida a existência de um detector de partículas no interior do domínio do problema, com seção de choque de absorção σ_d dada por

$$\sigma_d(z, \mu) = \begin{cases} 0,1 \begin{pmatrix} 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \\ 1 \end{pmatrix}, & \text{para } z \in [6, 7], \\ \mathbf{0}, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (6.83)$$

Como no Problema Teste IV, foram calculadas as taxas de absorção por meio da Equação (6.5), denotada por R ; através da formulação adjunta, a Equação (6.8), indicada por R^\dagger ; e por meio do método DD para a equação de transporte, considerando 100 nós por cm e tolerância de 10^{-6} para o processo iterativo, representada por R_{DD} . A Tabela 6.11 resume os resultados obtidos, considerando $N \in \{2,4,8,16,32,64,128\}$.

Tabela 6.11: Problema Teste V: taxas de absorção ($cm^{-1}s^{-1}$) do problema fonte-detector, obtidas a partir do método DD (R_{DD}), a partir do método ADO para a equação do transporte (R) e a partir do método ADO para a adjunta da equação do transporte (R^\dagger).

N	R_{DD}	R	R^\dagger
2	4,065700436	2,52312207	2,52312207
4	2,527924009	2,53097512	2,53097512
8	2,535723997	2,53093453	2,53093453
16	2,535689053	2,53093475	2,53093475
32	2,535691821	2,53093475	2,53093475
64	2,535692007	2,53093476	2,53093476
128	2,535692008	2,53093477	2,53093462

Conforme a Tabela 6.11 aponta, para todos os valores de N , os resultados obtidos pelas formulações ADO apresentaram taxas de absorção concordando

em até sete dígitos. Diferente do caso anterior, os erros ao comparar as taxas de absorção foram maiores, entre $O(10^{-12})$ e $O(10^{-8})$, apresentando crescimento com o aumento do número de direções. De forma semelhante ao teste anterior, os testes foram executados em menos de um segundo. Além disso, ao comparar os resultados calculados por meio do método ADO com aqueles obtidos via DD, houve concordância de três dígitos.

Assim, para os problemas em geometria cartesiana unidimensional, o método ADO obtido para a adjunta da equação de transporte foi capaz de, através da formulação fonte-detector, reproduzir com excelente precisão as taxas de absorção obtidas através da formulação para a equação de transporte [100]. Além disso, quando comparado com os resultados obtidos através do método DD, houve concordância de dois à cinco dígitos. Ainda, as taxas de absorção calculadas através da formulação ADO adjunta foram obtidas em menos de um segundo em todos os testes, em contraste com a utilização do método DD no Problema Teste V, o qual necessitou de 10 horas para a obtenção de convergência no caso com $N = 64$.

Por fim, é reforçado que a formulação adjunta permite que, desde que o detector de partículas se mantenha o mesmo, o cálculo da taxa de absorção de partículas oriundas de diferentes fontes de partículas necessita de apenas uma simples avaliação da Equação (6.8), sem que para isso seja resolvida novamente a adjunta da equação de transporte. No próximo capítulo, tal propriedade se mostrará fundamental para resolver um problema inverso de estimativa de fontes de partículas.

7 O PROBLEMA DA ESTIMATIVA DE FONTES DE PARTÍCULAS

De acordo com Beck e Arnold [29], o problema da estimativa de parâmetros pode ser identificado com o estudo dos problemas inversos. Em inúmeras situações não são conhecidos alguns, e por vezes, nenhum dos parâmetros que descrevem o modelo matemático; ainda assim, medições discretas relacionadas com as variáveis dependentes são conhecidas. Essas medições podem, então, ser utilizadas na tentativa de estimar tais valores desconhecidos.

Neste capítulo, o objetivo é estimar uma fonte isotrópica de partículas definida no interior do domínio do problema, a partir de uma série de leituras provenientes de detectores também internos ao domínio do problema. Para isso, é suposto que todas as propriedades físicas da região de interesse são conhecidas, bem como as condições de contorno do problema.

Na próxima seção, é obtido um modelo linear que relaciona as taxas de absorção de partículas de diversos detectores interiores ao domínio do problema à fonte que se deseja estimar.

7.1 Cálculo das Taxa de Absorção de Partículas

Inicialmente são considerados problemas em geometria cartesiana bidimensional, onde o fluxo angular de partículas em um domínio $D = [0, X] \times [0, Y]$ é modelado através da equação de transporte definida na Equação (3.1), isto é,

$$\mathcal{L}\psi = S, \tag{7.1}$$

sujeita às condições de contorno dadas por

$$\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}_{in}) = \psi_b(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}_{in}) + \rho(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}_{out}), \tag{7.2}$$

onde Ω_{in} indica as direções de fluxo incidente na fronteira ∂D do domínio, Ω_{out} as direções de fluxo emergente, ψ_b o fluxo incidente em ∂D e ρ é o coeficiente de reflexão especular.

Para a obtenção de um modelo que relacione as taxas de absorção de partículas à fonte que se deseja estimar, uma série de hipóteses são necessárias. Assim, é suposto que

- (i) um conjunto de n_d detectores de partículas é posicionado no interior do domínio do problema, cada um deles fornecendo uma leitura R_i , com $i \in \{1, \dots, n_d\}$;
- (ii) cada um dos detectores é caracterizado por uma seção de choque de absorção $\sigma_{d,i}$, com $i \in \{1, \dots, n_d\}$;
- (iii) para cada $i \in \{1, \dots, n_d\}$, o fluxo angular adjunto ψ_i que resolve a Equação (3.26) com $S^\dagger = \sigma_{d,i}$ no seu lado direito é conhecido, considerando, como condições de contorno, a Equação (3.27);
- (iv) a fonte S é bem aproximada por \tilde{S} , obtida através da combinação linear de funções base definidas no domínio do problema, isto é, \tilde{S} é tal que

$$\tilde{S}(x,y) = \sum_{j=1}^{n_b} \alpha_j s_j(x,y), \quad (7.3)$$

onde, para $(x,y) \in D$ e $j \in \{1, \dots, n_b\}$, s_j é uma função bases conhecida e α_j representa o coeficiente da expansão de \tilde{S} na base formada pelas funções s_j .

Com isso, é possível substituir a Equação (7.3) na Equação (6.8) para escrever

$$\begin{aligned} R_i &= \langle \tilde{S}, \psi_i^\dagger \rangle - P[\psi_b, \psi_i^\dagger] \\ &= \left\langle \sum_{j=1}^{n_b} \alpha_j s_j, \psi_i^\dagger \right\rangle - P[\psi_b, \psi_i^\dagger] \\ &= \sum_{j=1}^{n_b} \alpha_j \langle s_j, \psi_i^\dagger \rangle - P[\psi_b, \psi_i^\dagger], \end{aligned} \quad (7.4)$$

para cada $i \in \{1, \dots, n_d\}$.

A Equação (7.4) pode ser reescrita de maneira vetorial como

$$R_i = \left[\langle s_1, \psi_i^\dagger \rangle \quad \langle s_2, \psi_i^\dagger \rangle \quad \cdots \quad \langle s_{n_b}, \psi_i^\dagger \rangle \right] \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_{n_b} \end{bmatrix} - P[\psi_b, \psi_i^\dagger], \quad (7.5)$$

de onde decorre que, ao variar $i \in \{1, \dots, n_d\}$, é obtida a equação matricial

$$\begin{bmatrix} R_1 \\ R_2 \\ \vdots \\ R_{n_d} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \langle s_1, \psi_1^\dagger \rangle & \langle s_2, \psi_1^\dagger \rangle & \cdots & \langle s_{n_b}, \psi_1^\dagger \rangle \\ \langle s_1, \psi_2^\dagger \rangle & \langle s_2, \psi_2^\dagger \rangle & \cdots & \langle s_{n_b}, \psi_2^\dagger \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle s_1, \psi_{n_d}^\dagger \rangle & \langle s_2, \psi_{n_d}^\dagger \rangle & \cdots & \langle s_{n_b}, \psi_{n_d}^\dagger \rangle \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \alpha_1 \\ \alpha_2 \\ \vdots \\ \alpha_{n_b} \end{bmatrix} - \begin{bmatrix} P[\psi_b, \psi_1^\dagger] \\ P[\psi_b, \psi_2^\dagger] \\ \vdots \\ P[\psi_b, \psi_{n_d}^\dagger] \end{bmatrix}. \quad (7.6)$$

Por fim, ao introduzir os vetores de n_d componentes

$$\mathbf{r} = [R_1 \ R_2 \ \cdots \ R_{n_d}]^T, \quad (7.7)$$

e

$$\mathbf{p} = - \left[P[\psi_b, \psi_1^\dagger] \ P[\psi_b, \psi_2^\dagger] \ \cdots \ P[\psi_b, \psi_{n_d}^\dagger] \right]^T, \quad (7.8)$$

o vetor de n_b componentes

$$\boldsymbol{\alpha} = [\alpha_1 \ \alpha_2 \ \cdots \ \alpha_{n_b}]^T, \quad (7.9)$$

e a matriz $n_d \times n_b$

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} \langle s_1, \psi_1^\dagger \rangle & \langle s_2, \psi_1^\dagger \rangle & \cdots & \langle s_{n_b}, \psi_1^\dagger \rangle \\ \langle s_1, \psi_2^\dagger \rangle & \langle s_2, \psi_2^\dagger \rangle & \cdots & \langle s_{n_b}, \psi_2^\dagger \rangle \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \langle s_1, \psi_{n_d}^\dagger \rangle & \langle s_2, \psi_{n_d}^\dagger \rangle & \cdots & \langle s_{n_b}, \psi_{n_d}^\dagger \rangle \end{bmatrix}, \quad (7.10)$$

é possível, com isso, reescrever a Equação (7.6) como

$$\mathbf{r} = \mathbf{A}\boldsymbol{\alpha} + \mathbf{p}. \quad (7.11)$$

A Equação (7.11) modela as taxas de absorção dos detectores em função dos coeficientes da aproximação da fonte na base escolhida. Neste trabalho, dadas as partições $\{0 = x_1 < x_2 < \dots < x_{n_x} < x_{n_x+1} = X\}$ e $\{Y = y_1 > y_2 > \dots > y_{n_y} > y_{n_y+1} = 0\}$ dos intervalos $[0, X]$ e $[0, Y]$, são definidas as funções base

$$s_j(x,y) = \begin{cases} 1, & \text{para } (x,y) \in D_{p,q}, \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.12)$$

para $p \in \{1, \dots, n_y\}$ e $q \in \{1, \dots, n_x\}$ fixos, onde $j = p + (q - 1)n_y$ e $D_{p,q} = [(q-1)h_{x,p,q}, qh_{x,p,q}] \times [(p-1)h_{y,p,q}, ph_{y,p,q}]$, com $h_{x,p,q} = x_{q+1} - x_q$ e $h_{y,p,q} = y_p - y_{p+1}$, conforme a Figura 4.1.

É preciso destacar que por meio do uso das funções bases definidas na Equação (7.12), é possível utilizar as expressões analíticas obtidas no Capítulo 6, mais especificadamente, as Equações (6.26) e (6.27), para escrever fórmulas explícitas para as Equações (7.8) e (7.10), o que fornece maior velocidade e acurácia nos cálculos. Entretanto, o emprego de um conjunto distinto de funções bases requer a dedução de novas fórmulas explícitas [103].

Para o problema em geometria cartesiana unidimensional dependente da energia, o fluxo angular de partículas em um domínio $D = [0, Z]$ é modelado através da equação de transporte definida na Equação (2.37), isto é,

$$\mathcal{L}\psi = \mathbf{S}, \quad (7.13)$$

onde ψ é o fluxo angular de partículas, descrito através de um vetor de G componentes dado por

$$\psi = [\psi_1, \dots, \psi_G]^T, \quad (7.14)$$

e sujeita às condições de contorno dadas por

$$\psi(0, \mu) = \mathbf{f}_1(\mu) + \rho_1 \psi(0, -\mu), \quad (7.15)$$

$$\psi(Z, -\mu) = \mathbf{f}_2(\mu) + \rho_2 \psi(Z, \mu), \quad (7.16)$$

para $\mu \in (0, 1]$, onde \mathbf{f}_1 indica o fluxo incidente na fronteira esquerda do domínio, \mathbf{f}_2 o fluxo incidente na fronteira direita, e ρ_1 e ρ_2 são, respectivamente, os coeficientes de reflexão especular da direita e da esquerda do domínio.

Assim como no caso bidimensional, para a obtenção de um modelo que relacione as taxas de absorção de partículas à fonte que se deseja estimar, uma série de hipóteses são necessárias. Dessa forma, é assumido que

- (i) um conjunto de n_d detectores de partículas é posicionado no interior do domínio do problema, cada um deles fornecendo uma leitura R_i para cada grupo de energia, totalizando $n_d G$ leituras;
- (ii) cada uma das leituras é associada com uma seção de choque de absorção $\sigma_{d,i}$ definida por

$$\sigma_{d,i} = \left[\begin{array}{cc} \overbrace{0 \cdots 0}^{1 \text{ até } g-1} & \overbrace{0 \cdots 0}^{g+1 \text{ até } G} \\ \sigma_{d,i,g} & \end{array} \right], \quad (7.17)$$

com $i \in \{1, \dots, n_d G\}$ e $g \in \{1, \dots, G\}$;

- (iii) para cada $i \in \{1, \dots, n_d G\}$, o fluxo angular adjunto

$$\boldsymbol{\psi}_i^\dagger = [\psi_{i,1} \cdots \psi_{i,G}]^T \quad (7.18)$$

que resolve a Equação (3.55) com $\mathbf{S}^\dagger = \sigma_{d,i}$ no seu lado direito é conhecido, considerando, como condições de contorno, as Equações (3.34) e (3.35);

- (iv) a fonte \mathbf{S} é bem aproximada por $\tilde{\mathbf{S}} = [\tilde{S}_1 \cdots \tilde{S}_G]^T$, onde cada componente \tilde{S}_g de \mathbf{S} é definida em algum espaço linear de funções sobre o domínio do problema, isto é, \tilde{S}_g é tal que

$$\tilde{S}_g(z) = \sum_{j=1}^{n_{b,g}} \alpha_{j,g} s_{j,g}(z), \quad (7.19)$$

onde, para $g \in \{1, \dots, G\}$ e $z \in D$, $s_{j,g}$ é uma função base conhecida e $\alpha_{j,g}$ representa o coeficiente da expansão de \tilde{S}_g na base formada pelas funções $s_{j,g}$.

Com isso, é possível substituir a Equação (7.19) na Equação (6.8) para escrever a expressão

$$\mathbf{r} = \sum_{g=1}^G \mathbf{A}_g \boldsymbol{\alpha}_g + \mathbf{p}, \quad (7.20)$$

onde, para cada $g \in \{1, \dots, G\}$, são definidos os vetores de $n_d G$ componentes

$$\mathbf{r} = \left[\overbrace{R_1 \dots R_G}^{\text{detector 1}} \overbrace{R_{G+1} \dots R_{2G}}^{\text{detector 2}} \dots \overbrace{R_{(n_d-1)G+1} \dots R_{n_d G}}^{\text{detector } n_d} \right]^T, \quad (7.21)$$

e

$$\mathbf{p} = \left[\overbrace{P_1 \dots P_G}^{\text{detector 1}} \overbrace{P_{G+1} \dots P_{2G}}^{\text{detector 2}} \dots \overbrace{P_{(n_d-1)G+1} \dots P_{n_d G}}^{\text{detector } n_d} \right]^T, \quad (7.22)$$

com $P_i = -P[\mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2, \psi_i^\dagger]$, para $i \in \{1, \dots, n_d G\}$, o vetor de $n_{b,g}$ componentes

$$\boldsymbol{\alpha}_g = [\alpha_{1,g} \ \alpha_{2,g} \ \dots \ \alpha_{n_{b,g},g}]^T, \quad (7.23)$$

e, por fim, a matriz de dimensão $n_d G \times n_{b,g}$ dada por

$$\mathbf{A}_g = \begin{bmatrix} A_{g,1,1} & A_{g,1,2} & \dots & A_{g,1,n_{b,g}} \\ A_{g,2,1} & A_{g,2,2} & \dots & A_{g,2,n_{b,g}} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{g,n_d G,1} & A_{g,n_d G,2} & \dots & A_{g,n_d G,n_{b,g}} \end{bmatrix}, \quad (7.24)$$

onde, para cada $i \in \{1, \dots, n_d G\}$ e $j \in \{1, \dots, n_{b,g}\}$, $A_{g,i,j}$ é tal que

$$A_{g,i,j} = \int_{-1}^1 \int_0^Z \psi_{i,g}^\dagger(z, \mu) s_{j,g}(z) dz d\mu, \quad (7.25)$$

e $\psi_{i,g}^\dagger$ representa a componente do g -ésimo grupo de energia do fluxo angular adjunto $\boldsymbol{\psi}_i^\dagger$, conforme definida na Equação (7.18).

Para finalizar, é possível reescrever a Equação (7.20) no mesmo formato da Equação (7.11). Para isso, é definido o vetor de $n_{b,1} + n_{b,2} + \dots + n_{b,G}$ componentes

$$\boldsymbol{\alpha} = [\boldsymbol{\alpha}_1^T \ \dots \ \boldsymbol{\alpha}_G^T]^T, \quad (7.26)$$

e a matriz de dimensão $n_d G \times (n_{b,1} + n_{b,2} + \dots + n_{b,G})$

$$\mathbf{A} = [\mathbf{A}_1 \ \dots \ \mathbf{A}_G], \quad (7.27)$$

para reescrever a Equação (7.20) como

$$\mathbf{r} = \mathbf{A}\boldsymbol{\alpha} + \mathbf{p}. \quad (7.28)$$

Em analogia ao problema bidimensional, para cada $g \in \{1, \dots, G\}$, é considerada a partição $\{0 = z_{1,g} < z_{2,g} < \dots < z_{n_z,g} < z_{n_z+1,g} = Z\}$ do intervalo $[0, Z]$, de maneira a selecionar funções bases

$$\tilde{s}_{j,g}(z) = \begin{cases} 1, & \text{para } z \in [(j-1)h_{j,g}, jh_{j,g}], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.29)$$

para $j \in \{1, \dots, n_{b,g}\}$, onde $h_{z,g} = z_{j+1,g} - z_{j,g}$.

Como no caso bidimensional, as funções bases definidas na Equação (7.29) permitem, também, o uso das expressões analíticas obtidas no Capítulo 6, as Equações (6.35), (6.36), (6.37) e (6.38), para escrever fórmulas explícitas para as Equações (7.22) e (7.27).

Na próxima seção é apresentado o problema inverso de estimativa de fontes de partículas, bem como uma série de hipóteses consideradas para a resolução de tal problema.

7.2 Estimativa de Fontes de Partículas

Na seção anterior, tanto no contexto unidimensional quanto no bidimensional, foi obtida a relação

$$\mathbf{r}(\boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{A}\boldsymbol{\alpha} + \mathbf{p}, \quad (7.30)$$

entre as leituras de uma série de detectores de partículas interiores ao domínio do problema e a expansão da fonte (ou aproximação da mesma) em um dado espaço de funções. A fim de simplificar a notação, é suposto que \mathbf{r} e \mathbf{p} são vetores de dimensão n_R , $\boldsymbol{\alpha}$ é um vetor de dimensão n_B e \mathbf{A} é uma matriz $n_R \times n_B$.

Adicionalmente, é suposto que $\tilde{\mathbf{r}}$ é um vetor de dimensão n_R , representando medições físicas de uma série de detectores interiores ao domínio do problema, como na seção anterior. Além disso, é tomada como hipótese a aditividade dos erros entre $\tilde{\mathbf{r}}$ e \mathbf{r} , isto é, $\tilde{\mathbf{r}}$ e \mathbf{r} são tais que

$$\tilde{\mathbf{r}} = \mathbf{r}(\boldsymbol{\alpha}) + \boldsymbol{\epsilon} \quad (7.31)$$

onde $\boldsymbol{\epsilon}$ é um vetor aleatório independente de $\boldsymbol{\alpha}$, normalmente distribuído, com média zero e matriz de covariância \mathbf{W} conhecida, constante e positiva definida. Com isso, a função de densidade de probabilidade para a distribuição dos erros é dada por [29, 71]

$$\pi(\boldsymbol{\epsilon}) = (2\pi)^{-n_R/2} |\mathbf{W}|^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \boldsymbol{\epsilon}^T \mathbf{W}^{-1} \boldsymbol{\epsilon} \right\}. \quad (7.32)$$

Dessa forma, ao substituir a Equação (7.31) na Equação (7.32) é obtida a distribuição das medidas $\tilde{\mathbf{r}}$ condicionadas aos parâmetros $\boldsymbol{\alpha}$, isto é,

$$\pi(\tilde{\mathbf{r}}|\boldsymbol{\alpha}) = (2\pi)^{-n_R/2} |\mathbf{W}|^{-1/2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} [\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}(\boldsymbol{\alpha})]^T \mathbf{W}^{-1} [\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}(\boldsymbol{\alpha})] \right\}, \quad (7.33)$$

também chamada de função de verossimilhança [71], a qual mede, para cada $\boldsymbol{\alpha}$ fixo, a probabilidade de obtenção de $\tilde{\mathbf{r}}$.

Como a Equação (7.32) é, por hipótese, centrada em $\mathbf{0}$, para minimizar $\boldsymbol{\epsilon}$ é desejada a maximização de $\pi(\boldsymbol{\epsilon})$, ou $\pi(\tilde{\mathbf{r}}|\boldsymbol{\alpha})$. Como a matriz \mathbf{W} é positiva definida, a Equação (7.33) é maximizada quando o argumento de sua exponencial é minimizado.

Com isso, é definida a função objetivo de máxima verossimilhança

$$S_{ML}(\boldsymbol{\alpha}) = [\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}(\boldsymbol{\alpha})]^T \mathbf{W}^{-1} [\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}(\boldsymbol{\alpha})], \quad (7.34)$$

na qual foram ignoradas as constantes multiplicativas no argumento da exponencial da Equação (7.33).

Adicionalmente, neste trabalho, é assumido que os erros nas medições são não correlacionados e com variância constante σ^2 [29]. Dessa forma, a matriz

de covariância assume a forma

$$\mathbf{W} = \sigma^2 \mathbf{I}, \quad (7.35)$$

onde \mathbf{I} é a matriz identidade de ordem n_R .

Assim, ao substituir a Equação (7.35) na Equação (7.34), é obtida a função objetivo

$$S_{ML}(\boldsymbol{\alpha}) = [\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}(\boldsymbol{\alpha})]^T [\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}(\boldsymbol{\alpha})], \quad (7.36)$$

da qual é desejada a obtenção de $\tilde{\boldsymbol{\alpha}}$ tal que

$$\tilde{\boldsymbol{\alpha}} = \arg \min_{\boldsymbol{\alpha}} S_{ML}(\boldsymbol{\alpha}). \quad (7.37)$$

Ao substituir a Equação (7.30) na Equação (7.36) é obtida, após algumas manipulações algébricas, a expressão

$$S_{ML}(\boldsymbol{\alpha}) = \|\mathbf{A}\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{b}\|^2, \quad (7.38)$$

onde $\|\cdot\|$ é a norma-2 vetorial e \mathbf{b} é um vetor de n_R componentes dado por

$$\mathbf{b} = \tilde{\mathbf{r}} + \mathbf{p}. \quad (7.39)$$

O método dos mínimos quadrados pode ser empregado para estimar o mínimo da Equação (7.38). Contudo, conforme leituras ruidosas são consideradas, os resultados obtidos dessa forma apresentam grande instabilidade numérica, em decorrência do caráter mal posto do problema, fazendo com que sejam buscadas outras técnicas para a obtenção de soluções para a Equação (7.37).

7.3 Técnicas de Regularização

As técnicas de regularização são importantes ferramentas utilizadas na resolução de problemas mal-postos, como é o caso típico de diversos problemas inversos [6, 62, 71, 96]. Uma técnica de regularização clássica é a chamada regularização

de Tikhonov, a qual é essencialmente uma versão penalizada da Equação (7.38) [6, 62, 71]. Com isso, é escrita a expressão

$$S_\lambda(\boldsymbol{\alpha}) = \|\mathbf{A}\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{b}\|^2 + \lambda \|\mathbf{L}(\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}_0)\|^2, \quad (7.40)$$

onde $\lambda > 0$ é o chamado parâmetro de regularização de Tikhonov, \mathbf{L} é a matriz de regularização de Tikhonov, de dimensão $n_L \times n_B$, para algum n_L natural, e $\boldsymbol{\alpha}_0$ representa alguma aproximação do vetor $\boldsymbol{\alpha}$ que minimiza a Equação (7.38) quando na ausência de erros nas medições. A constante de regularização λ visa controlar a sensibilidade da Equação (7.40) ao erro ϵ . A matriz \mathbf{L} , por sua vez, tem como objetivo selecionar alguma característica da solução do problema [6, 62].

Assim, são buscadas soluções que minimizem a Equação (7.40), isto é,

$$\hat{\boldsymbol{\alpha}}_\lambda = \arg \min_{\boldsymbol{\alpha}} S_\lambda(\boldsymbol{\alpha}), \quad (7.41)$$

onde o parâmetro de regularização λ deve ser cuidadosamente escolhido para tentar mitigar os efeitos dos ruídos presentes nas medições sobre a solução do problema, bem como evitar que o problema regularizado possua solução muito distante da solução do problema de minimização original da Equação (7.38) quando consideradas medições não ruidosas.

Vale destacar que soluções que minimizam a Equação (7.40) podem ser obtidas a partir de algoritmos clássicos de mínimos quadrados, uma vez que é possível reescrever a mesma na forma

$$S_\lambda(\boldsymbol{\alpha}) = \left\| \begin{bmatrix} \mathbf{A} \\ \sqrt{\lambda}\mathbf{L} \end{bmatrix} \boldsymbol{\alpha} - \begin{bmatrix} \mathbf{b} \\ \sqrt{\lambda}\mathbf{L}\boldsymbol{\alpha}_0 \end{bmatrix} \right\|^2. \quad (7.42)$$

Neste trabalho, contudo, não é considerado o método clássico de Tikhonov, mas a sua versão iterada [34, 53]. Para isso, é, inicialmente, realizada uma mudança de variáveis na Equação (7.40). Assim, se definido o vetor resíduo

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{b} - \mathbf{A}\boldsymbol{\alpha}_0, \quad (7.43)$$

e o vetor

$$\mathbf{h} = \boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}_0, \quad (7.44)$$

a Equação (7.40) pode ser reescrita como [34]

$$\begin{aligned} S_\lambda(\mathbf{h}) &= \|\mathbf{A}\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{b}\|^2 + \lambda \|\mathbf{L}(\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}_0)\|^2 \\ &= \|\mathbf{A}\boldsymbol{\alpha} - \mathbf{A}\boldsymbol{\alpha}_0 + \mathbf{A}\boldsymbol{\alpha}_0 - \mathbf{b}\|^2 + \lambda \|\mathbf{L}\mathbf{h}\|^2 \\ &= \|\mathbf{A}(\boldsymbol{\alpha} - \boldsymbol{\alpha}_0) - (\mathbf{b} - \mathbf{A}\boldsymbol{\alpha}_0)\|^2 + \lambda \|\mathbf{L}\mathbf{h}\|^2 \\ &= \|\mathbf{A}\mathbf{h} - \mathbf{r}_0\|^2 + \lambda \|\mathbf{L}\mathbf{h}\|^2. \end{aligned} \quad (7.45)$$

O vetor \mathbf{h} que minimiza a Equação (7.45) visa aproximar o erro entre a solução do problema original, Equação (7.38), na ausência de erros e a aproximação $\boldsymbol{\alpha}_0$. Com isso, uma sequência de aproximações refinadas $\{\boldsymbol{\alpha}_k\}_k$, para $k \in \mathbb{N}$, pode ser obtida ao definir [34]

$$\boldsymbol{\alpha}_{k+1} = \boldsymbol{\alpha}_k + \mathbf{h}_k, \quad (7.46)$$

onde cada vetor \mathbf{h}_k é tal que

$$\mathbf{h}_{k+1} = \arg \min_{\mathbf{h}} \{ \|\mathbf{A}\mathbf{h} - \mathbf{r}_k\|^2 + \lambda \|\mathbf{L}\mathbf{h}\|^2 \}, \quad (7.47)$$

onde \mathbf{r}_k é o k -ésimo resíduo, definido por

$$\mathbf{r}_k = \mathbf{b} - \mathbf{A}\boldsymbol{\alpha}_k. \quad (7.48)$$

Uma questão que surge com a introdução do método de Tikhonov iterado é a determinação de um critério de parada para o método. Neste trabalho, é considerado o princípio da discrepância, o qual assume que a solução aproximada não deve possuir resíduo inferior aos erros presentes nas medições. Assim, o processo iterativo definido na Equação (7.47) deve prosseguir até que se obtenha um valor de k tal que [34, 71]

$$\|\mathbf{r}_k\| \leq \tau \sqrt{n_R} \sigma, \quad (7.49)$$

onde $\tau \geq 1$ é um parâmetro de ajuste independente de σ , tipicamente escolhido como $\tau = 1,1$ [71].

Ainda em aberto na Equação (7.47) é a adequada escolha do parâmetro de regularização λ . Em conjunção com o método de Tikhonov iterado, é típica uma escolha não estacionária para o parâmetro de regularização [34], na forma de uma sequência geométrica decrescente

$$\lambda_k = \lambda_0 q^k, \quad (7.50)$$

para $k \in \mathbb{N}$, com $\lambda_0 > 0$ e $q \in]0,1[$ fixos. O Pseudocódigo 1 apresenta os passos necessários para a obtenção do problema de minimização regularizado via método de Tikhonov iterado da Equação (7.40).

Pseudocódigo 1 Método de Tikhonov iterado.

- 1: **enquanto** não convergiu **faça**
 - 2: $\mathbf{r}_k \leftarrow \mathbf{b} - \mathbf{A}\boldsymbol{\alpha}_k$
 - 3: **se** $\mathbf{r}_k \leq \tau\sqrt{n_R}\sigma$ **então**
 - 4: **sair**
 - 5: **fim se**
 - 6: $\lambda_k \leftarrow \lambda_0 q^k$
 - 7: $\mathbf{h}_{k+1} \leftarrow \arg \min_{\mathbf{h}} \{ \|\mathbf{A}\mathbf{h} - \mathbf{r}_k\|^2 + \lambda_k \|\mathbf{L}\mathbf{h}\|^2 \}$
 - 8: $\boldsymbol{\alpha}_{k+1} \leftarrow \boldsymbol{\alpha}_k + \mathbf{h}_k$
 - 9: $k \leftarrow k + 1$
 - 10: **fim enquanto**
-

É demonstrado por Buccini *et al.* [34] que, se o parâmetro de regularização for escolhido como na Equação (7.50) e, ainda, se a interseção dos espaços nulos de \mathbf{L} e \mathbf{A} contiver apenas o vetor nulo, então o Pseudocódigo 1 converge para a solução de menor norma da Equação (7.41) quando $k \rightarrow \infty$. Além disso, os autores mostram, também, que o Pseudocódigo 1 atinge o critério da discrepância, Equação (7.49), em um número finito de passos.

7.4 Resultados Numéricos para a Estimativa de Fontes via Método de Tikhonov Iterado em Geometria Cartesiana Unidimensional

A fim de testar a formulação desenvolvida na seção anterior, é considerada uma série de problemas testes em geometria cartesiana unidimensional dependente da energia.

7.4.1 Problema Teste I

É suposto um problema com dois grupos de energia em meio isotrópico homogêneo definido no intervalo $z \in [0, 10]$. As seções de choque de absorção e de transferência entre grupos de energia são definidas na Equação (6.68), e são assumidas condições de contorno de vácuo em $z = 0$ cm e $z = 10$ cm, isto é,

$$\psi(0, \mu) = \mathbf{0}, \quad (7.51)$$

e

$$\psi(10, -\mu) = \mathbf{0}, \quad (7.52)$$

para $\mu \in [0, 1]$. O objetivo é estimar a fonte interna de partículas $\mathbf{S} = [S_1 \ S_2]^T$, cujas componentes são dadas por

$$S_1(z) = -\frac{20}{4000}z^2(z - 10), \quad (7.53)$$

e

$$S_2(z) = \begin{cases} \frac{500}{75031}z^2(z^2 - 14z + 49), & \text{para } z \in [0, 7], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.54)$$

para $z \in [0, 10]$.

Para a obtenção de medições ruidosas, são considerados vinte detectores de partículas uniformemente espaçados no interior do domínio do problema, com

seção de choque de absorção $\sigma_{d,1} = 0,2 \text{ cm}^{-1}$ para o primeiro grupo de energia e $\sigma_{d,2} = 0,15 \text{ cm}^{-1}$ para o segundo grupo de energia. É utilizada uma implementação própria do método DD [82], na qual são consideradas 128 direções discretas, 100 nós por cm e tolerância de 10^{-12} para o processo iterativo. Com isso, é inicialmente calculado um vetor de leituras \mathbf{r}_E , as quais são assumidas como exatas. Na sequência, é introduzida a matriz de covariância $\mathbf{W} = (0,01 \times \max \mathbf{r}_E)^2 \mathbf{I}$, onde \mathbf{I} é a matriz identidade de ordem n_R , com a finalidade de gerar um vetor aleatório $\boldsymbol{\epsilon}$ para a Equação (7.31).

A matriz \mathbf{A} da Equação (7.40) é calculada por meio da Equação (7.27) pela formulação ADO para a equação adjunta de transporte unidimensional dependente da energia, com $N = 4$, o que equivale a 8 direções discretas. A base para a expansão da aproximação de \mathbf{S} é definida por meio da Equação (7.29), ao considerar uma partição uniforme de dez subintervalos do intervalo $[0,10]$. Inicialmente, é escolhida como matriz de regularização a matriz identidade de ordem n_R , isto é, $\mathbf{L}_0 = \mathbf{I}$. Tal escolha para matriz de regularização visa priorizar as soluções de menor norma para o problema de minimização regularizado. Ainda, para a obtenção dos resultados, é considerado um espaço amostral de mil realizações do vetor aleatório $\boldsymbol{\epsilon}$.

A Tabela 7.1 apresenta os valores de mínimo, média, máximo e desvio padrão para os erros absolutos das estimativas, na norma $L^2([0,10])$, onde \hat{S}_1 e \hat{S}_2 representam, respectivamente, as projeções de S_1 e S_2 na base escolhida para as estimativas. Na Figura 7.1, as linhas sólidas em vermelho representam os gráficos das aproximações \tilde{S}_1 e \tilde{S}_2 das componentes de \mathbf{S} , os asteriscos representam as médias das mil estimativas para cada uma das componentes, e as linhas verticais em torno dos asteriscos representam os intervalos de 95% de confiança. Por fim, na Figura 7.2 é apresentado o histograma dos erros absolutos.

Conforme pode ser verificado na Tabela 7.1, os erros absolutos no segundo grupo de energia foram aproximadamente o dobro daqueles encontrados no

Tabela 7.1: Problema Teste I com matriz de Tikhonov \mathbf{L}_0 : erros absolutos – mínimo, média, máximo e desvio padrão.

Erros	Mínimo	Média	Máximo	Desvio Padrão
$\ \tilde{S}_1 - \hat{S}_1\ $	0,0804	0,1339	0,2300	0,0226
$\ \tilde{S}_2 - \hat{S}_2\ $	0,1353	0,2765	0,4121	0,0453

primeiro grupo de energia. Na mesma tabela, o desvio padrão seguiu o mesmo comportamento dos erros absolutos, isto é, o desvio padrão do segundo grupo de energia é o dobro daquele do primeiro grupo.

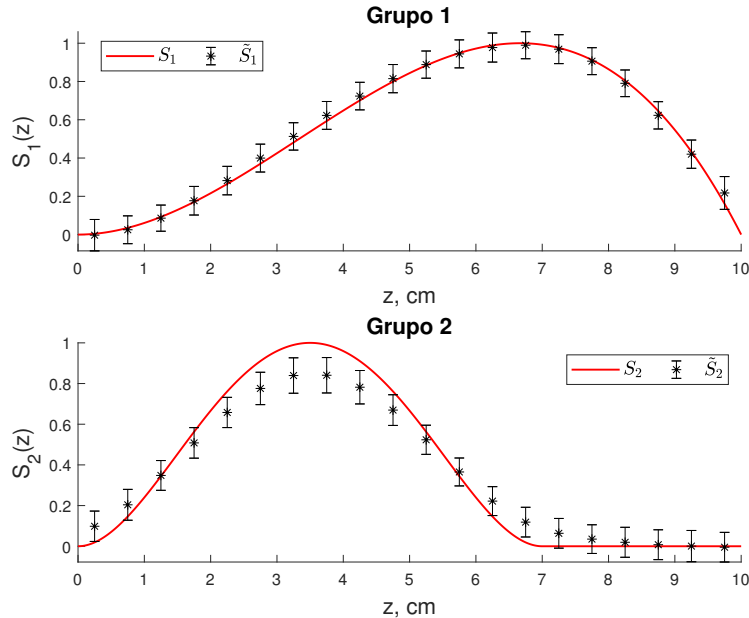


Figura 7.1: Problema Teste I com matriz de Tikhonov \mathbf{L}_0 : gráficos das componentes exatas de \mathbf{S} (linhas sólidas em vermelho), das componentes médias das aproximações de $\tilde{\mathbf{S}}$ (asteriscos) e respectivos intervalos de 95% de confiança (linhas verticais).

A Figura 7.1 corrobora os resultados apresentados na Tabela 7.1, mostrando um erro maior para as estimativas no segundo grupo de energia, bem como intervalos de confiança maiores. Ainda, é possível notar que no intervalo $[2, 5]$, para o segundo grupo de energia, há um distanciamento da média das estimativas com relação ao valor exato da fonte, sendo estas subestimadas no intervalo.

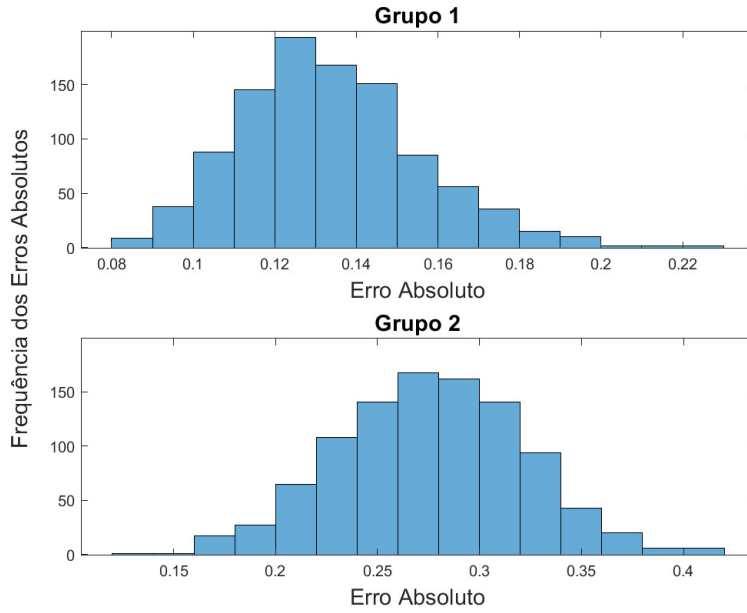


Figura 7.2: Problema Teste I com matriz de Tikhonov \mathbf{L}_0 : histograma dos erros absolutos.

A Figura 7.2, por sua vez, apresenta a distribuição dos erros absolutos para os dois grupos de energia. É possível traduzir as informações apresentadas na Tabela 7.1 na Figura 7.2, a qual mostra que o erro absoluto do primeiro grupo de energia está centralizado próximo de 0,13; por sua vez, o segundo grupo de energia, possui erros médios em torno de 0,28. Em ambos os histogramas, é sugerido que os erros relativos estão aproximadamente distribuídos de maneira gaussiana.

Uma segunda matriz de regularização comum na literatura [6, 34] é obtida por meio da discretização em diferenças finitas de pontos equidistantes sobre o domínio do problema. Assim, a matriz de regularização \mathbf{L}_1 de dimensões $(M-1) \times M$ é dada por

$$\mathbf{L}_1 = \begin{pmatrix} 1 & -1 & & & \\ & \ddots & \ddots & & \\ & & & 1 & -1 \end{pmatrix}, \quad (7.55)$$

a menos de uma constante multiplicativa.

A Tabela 7.2 apresenta os valores de mínimo, média, máximo e desvio padrão para os erros absolutos das estimativas, considerando as mesmas medidas padrão para os erros absolutos das estimativas, considerando as mesmas medidas ruidosas utilizadas no teste anterior com a matriz de regularização \mathbf{L}_0 .

Tabela 7.2: Problema Teste I com matriz de Tikhonov \mathbf{L}_1 : erros absolutos – mínimo, média, máximo e desvio padrão.

Erros	Mínimo	Média	Máximo	Desvio Padrão
$\ \tilde{S}_1 - \hat{S}_1\ $	0,0732	0,1447	0,2529	0,0240
$\ \tilde{S}_2 - \hat{S}_2\ $	0,0822	0,2942	0,4831	0,0632

Ao comparar a Tabela 7.2 com a Tabela 7.1, é possível verificar que os erros, em geral, tendem a ser maiores quando comparados aos erros das estimativas geradas com a matriz \mathbf{L}_0 , fato corroborado pela Figura (7.3).

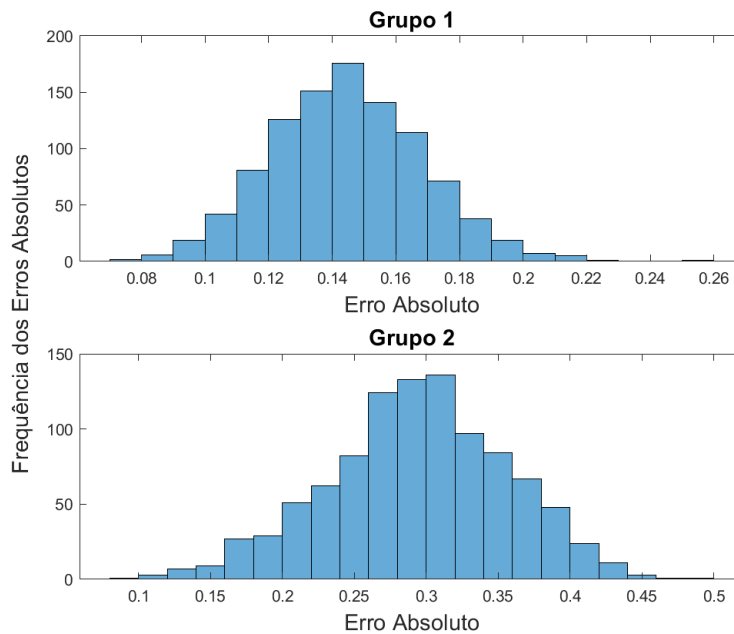


Figura 7.3: Problema Teste I com matriz de Tikhonov \mathbf{L}_1 : histograma dos erros absolutos.

A Figura 7.4 apresenta os gráficos das componentes exatas bem como as suas aproximações.

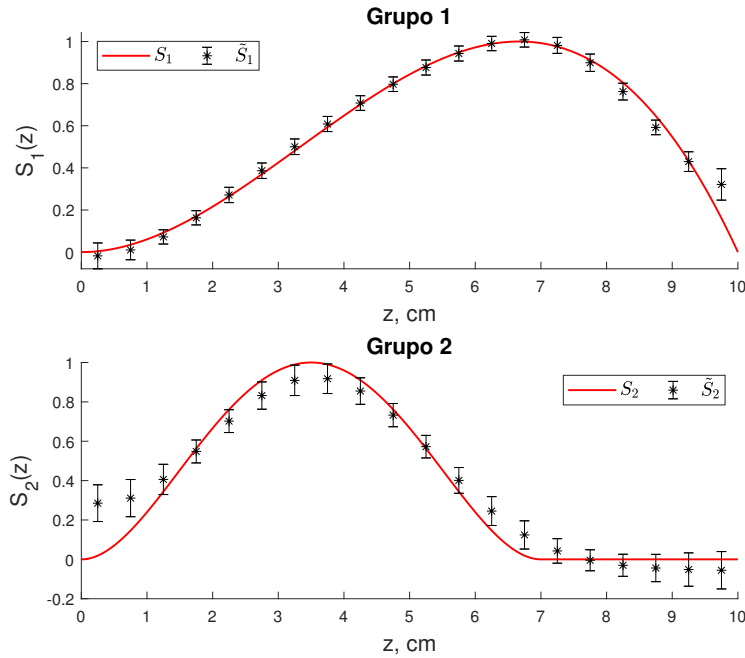


Figura 7.4: Problema Teste I com matriz de Tikhonov \mathbf{L}_1 : gráficos das componentes exatas de \mathbf{S} (linhas sólidas em vermelho), das componentes médias das aproximações de $\tilde{\mathbf{S}}$ (asteriscos) e respectivos intervalos de 95% de confiança (linhas verticais).

Conforme pode ser verificado na Figura 7.4, ao comparar com os resultados expostos na Figura 7.1, os intervalos de confiança de 95% foram, em geral, menores. Contudo, nas proximidades dos extremos do domínio do problema, o intervalo $[0, 10]$, foi apresentada uma maior discordância entre as componentes exatas de \mathbf{S} e suas estimativas $\tilde{\mathbf{S}}$, fato que pode explicar os maiores valores para os erros encontrados na Tabela 7.2.

Por fim, um fato a ser destacado foi a obtenção, em todos os testes, de melhores aproximações para o termo fonte presente no primeiro grupo de energia. Tal fato permaneceu inalterado ao intercalar a fonte original do primeiro grupo com a do segundo e, também, ao alterar as equações do sistema da aproximação multigrupos de energia.

7.4.2 Problema Teste II

Para este problema teste, são mantidas as mesmas configurações físicas do Problema Teste I, contudo, é utilizada uma fonte de partículas distinta daquela proposta no teste anterior. Assim, o objetivo passa a ser estimar a fonte interna de partículas $\mathbf{S} = [S_1 \ S_2]^T$, cujas componentes são dadas por

$$S_1(z) = \begin{cases} 0,6, & \text{para } z \in [0, 2], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.56)$$

e

$$S_2(z) = \begin{cases} 0,3, & \text{para } z \in [5, 7], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.57)$$

para $z \in [0, 10]$.

Além disso, são consideradas as mesmas configurações de detectores e funções bases do Problema Teste I. Para a obtenção das medições consideradas como exatas, \mathbf{r}_E , é utilizado, como anteriormente, o método DD [82], com 128 direções discretas, 100 nós por cm e tolerância de 10^{-12} para o processo iterativo. Por fim, é introduzida a matriz de covariância $\mathbf{W}_1 = (0,01 \times \max \mathbf{r}_E)^2 \mathbf{I}$, com a finalidade de gerar um vetor aleatório $\boldsymbol{\epsilon}$ para a Equação (7.31).

Como nem a distribuição dos detectores no interior do domínio do problema, nem as propriedades físicas do meio foram alteradas, a matriz \mathbf{A} da Equação (7.40) é a mesma do Problema Teste I. Para o processo de estimativa da fonte, é, inicialmente, escolhida como matriz de regularização a matriz identidade de ordem M , isto é, $\mathbf{L}_0 = \mathbf{I}$. Como anteriormente, para a obtenção dos resultados, é considerado um espaço amostral de mil realizações do vetor aleatório $\boldsymbol{\epsilon}$.

Na Tabela 7.3 são apresentados os valores de mínimo, média, máximo e desvio padrão para os erros absolutos das estimativas, onde \hat{S}_1 e \hat{S}_2 representam, respectivamente, as projeções de S_1 e S_2 na base escolhida para as estimativas.

Tabela 7.3: Problema Teste II com matriz de covariância \mathbf{W}_1 : erros absolutos – mínimo, média, máximo e desvio padrão.

Erros	Mínimo	Média	Máximo	Desvio Padrão
$\ \tilde{S}_1 - \hat{S}_1\ $	0,0970	0,1526	0,1932	0,0145
$\ \tilde{S}_2 - \hat{S}_2\ $	0,0942	0,1472	0,1903	0,0149

Diferentemente dos resultados apresentados na Tabela 7.1 sobre a estimativa da fonte com componentes polinomiais do Problema Teste I, os erros obtidos para as estimativas das fontes degrau foram semelhantes entre ambos os grupos de energia, conforme a Tabela 7.3. Na Figura 7.5, as linhas sólidas em vermelho representam os gráficos das aproximações \tilde{S}_1 e \tilde{S}_2 das componentes de \mathbf{S} , os asteriscos representam as médias das mil estimativas para cada uma das componentes, e as linhas verticais em torno dos asteriscos representam os intervalos de 95% de confiança. Por fim, na Figura 7.6 é apresentado o histograma dos erros absolutos.

Conforme a Figura 7.5 aponta, os intervalos de confiança para o primeiro grupo de energia apresentaram pequena amplitude, tendo o método sido capaz de estimar a componente S_1 . Para o segundo grupo de energia, os intervalos de confiança foram maiores que os do primeiro grupo, indicando uma variância maior em torno da média. Além disso, o método foi capaz de localizar a posição da fonte de partículas, contudo a aproximação da magnitude de S_2 não foi tão boa quanto no primeiro grupo de energia.

Por fim, na Figura 7.6, é apresentada a distribuição dos erros absolutos para os dois grupos de energia, corroborando a informação apresentada na Tabela 7.3, na qual tanto os erros quanto os desvios padrões apresentam valores similares entre os grupos de energia. Além disso, como anteriormente, no Problema Teste I, em ambos os histogramas, é sugerido que os erros relativos estão aproximadamente distribuídos de maneira gaussiana.

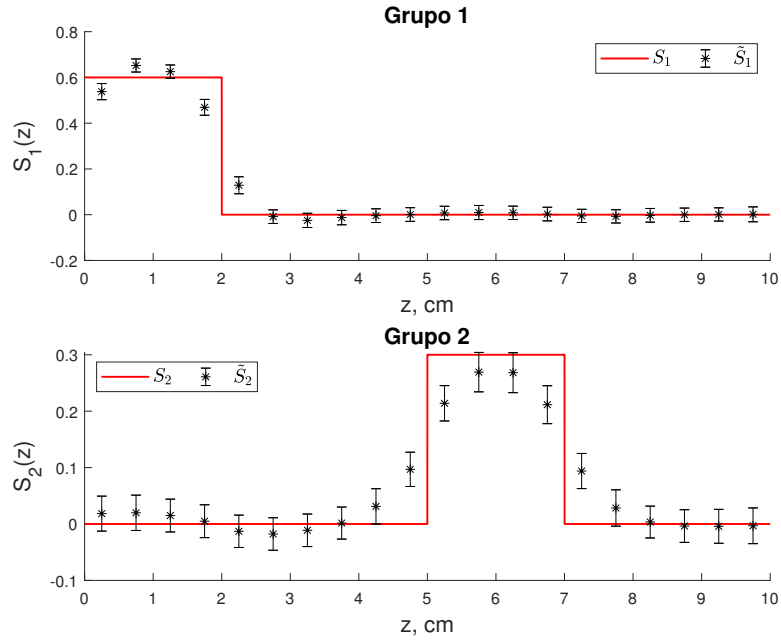


Figura 7.5: Problema Teste II com matriz de covariância \mathbf{W}_1 : gráficos das componentes exatas de \mathbf{S} (linhas sólidas em vermelho), das componentes médias das aproximações de $\tilde{\mathbf{S}}$ (asteriscos) e respectivos intervalos de 95% de confiança (linhas verticais).

Na sequência, é introduzida uma nova matriz de covariância, $\mathbf{W}_2 = (0,05 \times \max \mathbf{r}_E)^2 \mathbf{I}$, com a finalidade de gerar um novo vetor aleatório ϵ para a Equação (7.31).

A Figura 7.7 apresenta os gráficos das componentes exatas da fonte \mathbf{S} , bem como as suas respectivas médias das estimativas para mil realizações do vetor aleatório ϵ , junto dos intervalos de 95% de confiança.

Conforme pode ser visto na Figura 7.7, o método foi capaz de fornecer uma boa estimativa para a componente do primeiro grupo de energia. Contudo, para o segundo grupo de energia, os intervalos de confiança encontrados são grandes quando comparados com a amplitude da componente exata, e as médias distam dos valores exatos. A Figura 7.8 apresenta os histogramas dos erros absolutos para cada uma das componentes estimadas.

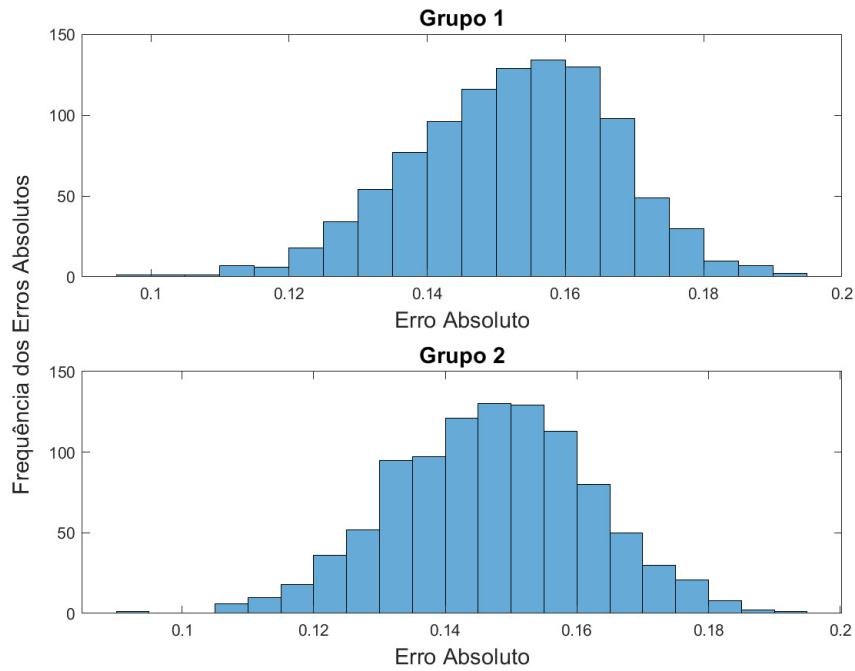


Figura 7.6: Problema Teste II com matriz de covariância \mathbf{W}_1 : histograma dos erros absolutos.

Neste problema teste, conforme a Figura 7.8 aponta, a média dos erros absolutos no segundo grupo de energia está em torno de 0,3, a mesma amplitude do termo fonte do segundo grupo de energia.

A Tabela 7.4 reforça a análise feita com base nas Figuras 7.7 e 7.8, apresentando média variando entre 0,16 e 0,38 para o segundo grupo de energia, valores muito próximos da amplitude do termo fonte.

Tabela 7.4: Problema Teste II com matriz de covariância \mathbf{W}_2 : erros absolutos – mínimo, média, máximo e desvio padrão.

Erros	Mínimo	Média	Máximo	Desvio Padrão
$\ \tilde{S}_1 - \hat{S}_1\ $	0,1697	0,2660	0,3493	0,0312
$\ \tilde{S}_2 - \hat{S}_2\ $	0,1639	0,2892	0,3879	0,0355

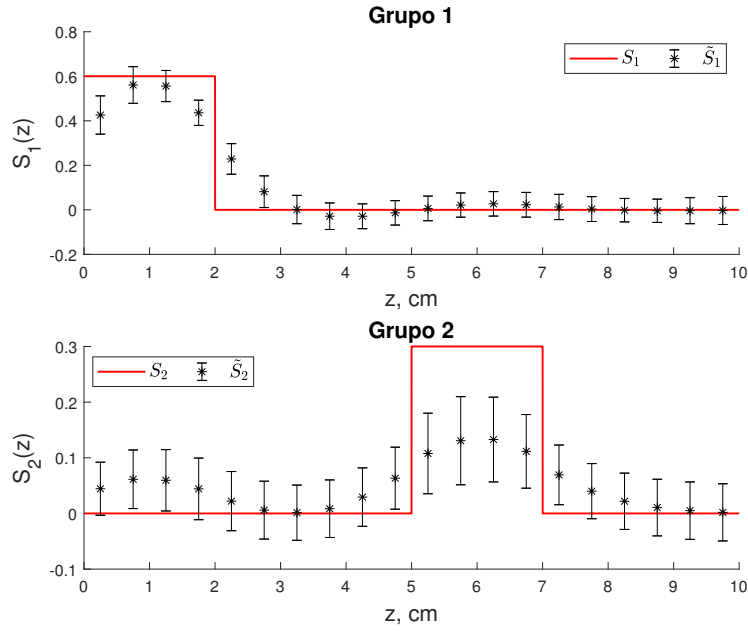


Figura 7.7: Problema Teste II com matriz de covariância \mathbf{W}_2 : gráficos das componentes exatas de \mathbf{S} (linhas sólidas em vermelho), das componentes médias das aproximações de $\tilde{\mathbf{S}}$ (asteriscos) e respectivos intervalos de 95% de confiança (linhas verticais).

É preciso destacar que ambas as componentes S_1 e S_2 de \mathbf{S} são não diferenciáveis, sugerindo, com isso, a utilização da matriz de regularização $\mathbf{L}_0 = \mathbf{I}$ apenas.

7.4.3 Problema Teste III

É considerado um problema com seis grupos de energia em meio homogêneo com grau 3 de anisotropia definido no intervalo $z \in [0, 30]$. As seções de choque de absorção e de transferência entre grupos de energia são definidas nas Equações (6.73), (6.74), (6.75), (6.76) e (6.77), e são assumidas condições de contorno de vácuo nos extremos $z = 0$ cm e $z = 30$ cm do domínio, isto é,

$$\psi(0, \mu) = \mathbf{0}, \quad (7.58)$$

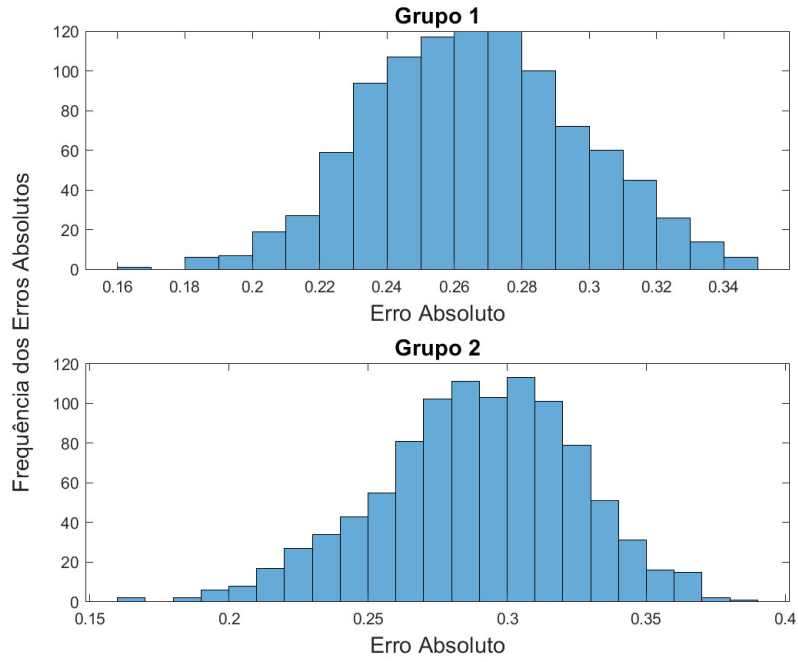


Figura 7.8: Problema Teste II com matriz de covariância \mathbf{W}_2 : histograma dos erros absolutos.

e

$$\psi(30, -\mu) = \mathbf{0}, \quad (7.59)$$

para $\mu \in [0, 1]$.

O objetivo é estimar a fonte interna de partículas $\mathbf{S} = [S_1 \ S_2 \ S_3 \ S_4 \ S_5 \ S_6]^T$, cujas componentes são dadas por

$$S_1(z) = \begin{cases} 4, & \text{para } z \in [5, 6], \\ 6, & \text{para } z \in [27, 28], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.60)$$

$$S_2(z) = \begin{cases} 3, & \text{para } z \in [1, 3], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.61)$$

$$S_3(z) = \begin{cases} 6, & \text{para } z \in [15, 18], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.62)$$

$$S_4(z) = \begin{cases} 10, & \text{para } z \in [20, 22], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.63)$$

$$S_5(z) = \begin{cases} 1, & \text{para } z \in [29, 30], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.64)$$

e

$$S_6(z) = \begin{cases} 7, & \text{para } z \in [13, 14], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.65)$$

para $z \in [0, 30]$.

A obtenção de medições \mathbf{r}_E , consideradas exatas, é feita ao considerar trinta detectores de partículas uniformemente espaçados no interior do domínio do problema, com seção de choque de absorção $\sigma_{d,g} = 0,1 \text{ cm}^{-1}$, para $g \in \{1, \dots, 6\}$. Para a simulação das medidas \mathbf{r}_E , é, como nos testes anteriores, utilizada uma implementação própria do método DD [82], na qual são consideradas 128 direções discretas, 100 nós por cm e tolerância de 10^{-12} para o processo iterativo. Na sequência, é introduzida a matriz de covariância $\mathbf{W}_1 = (0,01 \times \max \mathbf{r}_E)^2 \mathbf{I}$, onde \mathbf{I} é a matriz identidade de ordem M , com a finalidade de gerar um vetor aleatório $\boldsymbol{\epsilon}$ para a Equação (7.31).

Assim como nos testes anteriores, a matriz \mathbf{A} da Equação (7.40) é calculada por meio da Equação (7.27) pela formulação ADO para a equação adjunta de transporte unidimensional dependente da energia, com $N = 4$, o que equivale a 8 direções discretas. A base para a expansão da aproximação de \mathbf{S} é definida por meio da Equação (7.29), ao considerar uma partição uniforme de trinta subintervalos do intervalo $[0,30]$. Para a obtenção dos resultados, é considerado um espaço amostral de cinco mil realizações do vetor aleatório $\boldsymbol{\epsilon}$.

A Tabela 7.5 apresenta os valores de mínimo, média, máximo e desvio padrão para os erros absolutos, onde, para $g \in \{1,2,3,4,5,6\}$, \hat{S}_g representa a projeções de S_g na base escolhida para as estimativas.

Tabela 7.5: Problema Teste III com matriz de covariância \mathbf{W}_1 : erros absolutos: mínimo, média, máximo e desvio padrão.

Erros	Mínimo	Média	Máximo	Desvio Padrão
$\ \tilde{S}_1 - \hat{S}_1\ $	0,0044	0,0538	0,1902	0,0276
$\ \tilde{S}_2 - \hat{S}_2\ $	0,1693	0,4720	1,0764	0,1165
$\ \tilde{S}_3 - \hat{S}_3\ $	0,5432	1,7162	3,6957	0,4534
$\ \tilde{S}_4 - \hat{S}_4\ $	0,1786	0,9582	2,2905	0,2820
$\ \tilde{S}_5 - \hat{S}_5\ $	0,0149	0,0992	0,2636	0,0325
$\ \tilde{S}_6 - \hat{S}_6\ $	0,0013	0,0412	0,2151	0,0308

Na Figura 7.9, as linhas sólidas em vermelho representam os gráficos das aproximações \tilde{S}_g das componentes de \mathbf{S} , os asteriscos representam as médias das cinco mil estimativas para cada uma das componentes, e as linhas verticais em torno dos asteriscos representam os intervalos de 95% de confiança.

Conforme pode ser visto na Figura 7.9, os intervalos de confiança foram pequenos, e os valores médios das estimativas foram próximos daqueles presentes nos gráficos das componentes exatas. Vale destacar, contudo, que os intervalos de confiança no segundo, terceiro e quarto grupos de energia foram muito maiores que aqueles obtidos nos demais grupos de energia, fato que certamente contribuiu para a expressividade dos erros absolutos apresentados na Tabela 7.5 para estes grupos.

A Figura 7.10, por sua vez, apresenta o histograma dos erros absolutos, apresentando valores médios que concordam com a Tabela 7.5 e a análise da Figura 7.9.

A fim de testar o método considerando medidas mais ruidosas, é introduzida a matriz de covariância $\mathbf{W}_2 = (0,05 \times \max \mathbf{r}_E)^2 \mathbf{I}$, com a finalidade de gerar um novo vetor aleatório ϵ para a Equação (7.31).

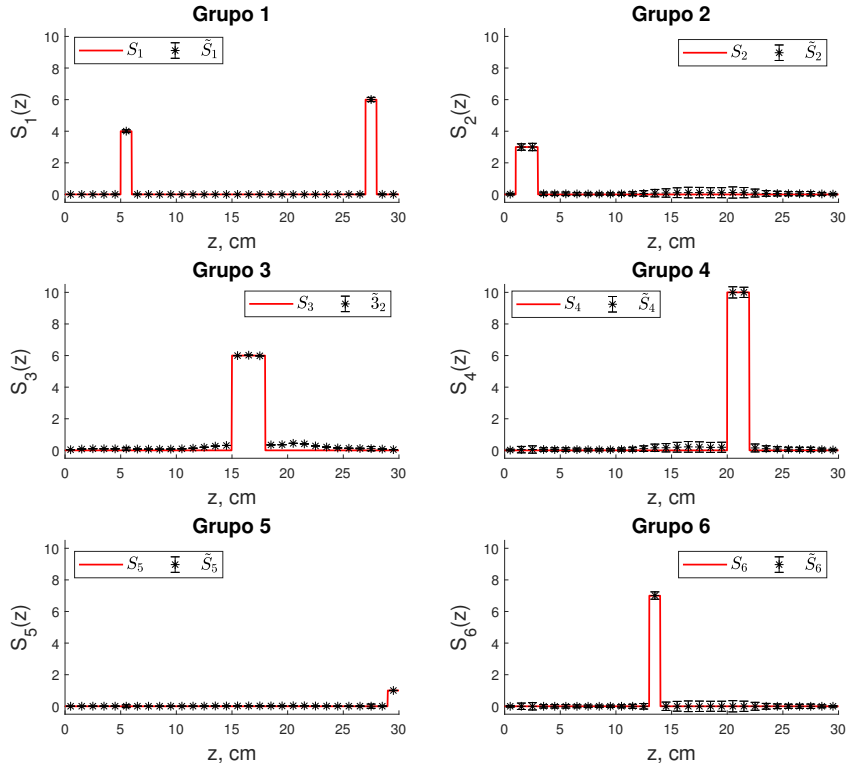


Figura 7.9: Problema Teste III com matriz de covariância \mathbf{W}_1 : gráficos das componentes exatas de \mathbf{S} (linhas sólidas em vermelho), das componentes médias das aproximações de $\tilde{\mathbf{S}}$ (asteriscos) e respectivos intervalos de 95% de confiança (linhas verticais).

A Figura 7.11 apresenta os gráficos das componentes exatas da fonte \mathbf{S} , bem como as respectivas médias das estimativas para cinco mil realizações do vetor aleatório ϵ , junto dos intervalos de 95% de confiança.

Conforme pode ser visto na Figura 7.11, o método foi capaz de fornecer boas estimativas apenas para o primeiro e o sexto grupos de energia, isto é, as médias dos valores obtidos estão mais próximas do valor real da componente, bem como a apresentação de intervalos de confiança pequenos. Nos demais grupos de energia, é possível dizer que o método foi capaz de localizar a região do domínio na qual a componente da fonte é positiva, contudo o método apresentou grandes intervalos de

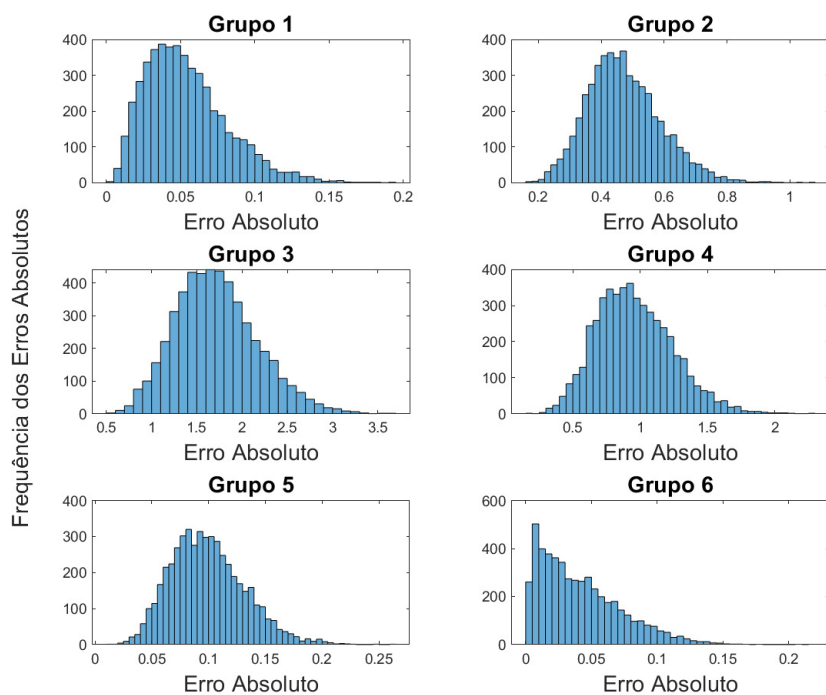


Figura 7.10: Problema Teste III com matriz de covariância \mathbf{W}_1 : histograma dos erros absolutos.

confiança ao longo do domínio. A Figura 7.12 apresenta os histogramas dos erros absolutos para cada uma das componentes estimadas.

A Figura 7.12 corrobora a análise feita com base na Figura 7.11, indicando erros maiores no segundo, terceiro e quarto grupos de energia.

Por fim, a Tabela 7.6 apresenta os valores de mínimo, média, máximo e desvio padrão para as cinco mil estimativas consideradas.

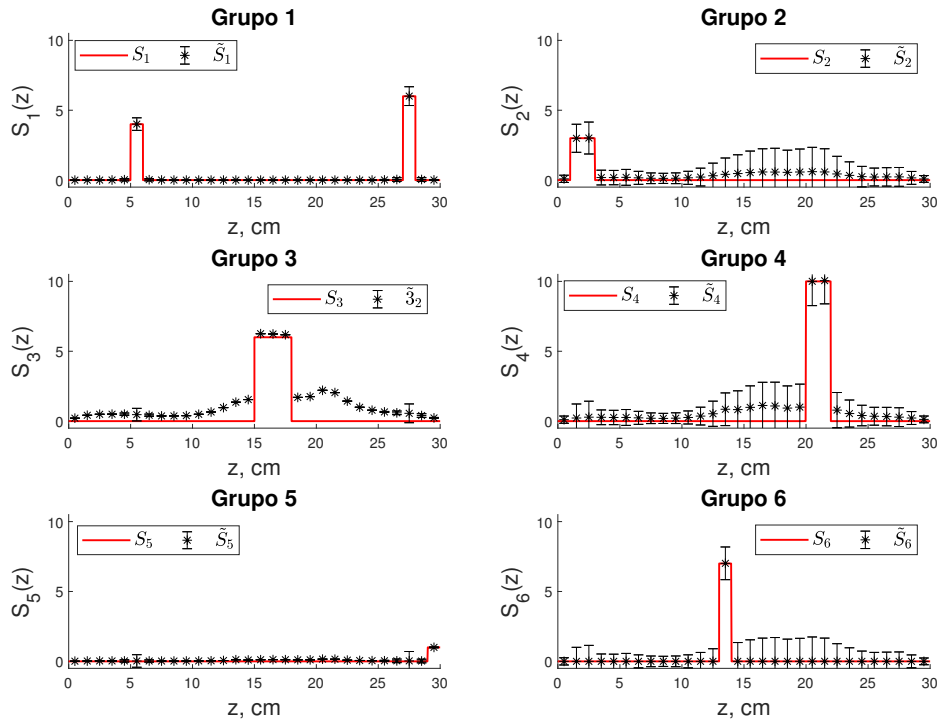


Figura 7.11: Problema Teste III com matriz de covariância \mathbf{W}_2 : Gráficos das componentes exatas de \mathbf{S} (linhas sólidas em vermelho), das componentes médias das aproximações de $\tilde{\mathbf{S}}$ (asteriscos) e respectivos intervalos de 95% de confiança (linhas verticais).

Tabela 7.6: Problema Teste III com matriz de covariância \mathbf{W}_2 : erros absolutos – mínimo, média, máximo e desvio padrão.

Erros	Mínimo	Média	Máximo	Desvio Padrão
$\ \tilde{S}_1 - \hat{S}_1\ $	0,0165	0,2743	1,1446	0,1399
$\ \tilde{S}_2 - \hat{S}_2\ $	0,8432	2,3767	5,3755	0,5927
$\ \tilde{S}_3 - \hat{S}_3\ $	2,6497	8,2451	16,6745	2,0725
$\ \tilde{S}_4 - \hat{S}_4\ $	1,0469	4,7898	10,5718	1,3504
$\ \tilde{S}_5 - \hat{S}_5\ $	0,0996	0,4932	1,1783	0,1593
$\ \tilde{S}_6 - \hat{S}_6\ $	0,0072	0,2044	0,9507	0,1521

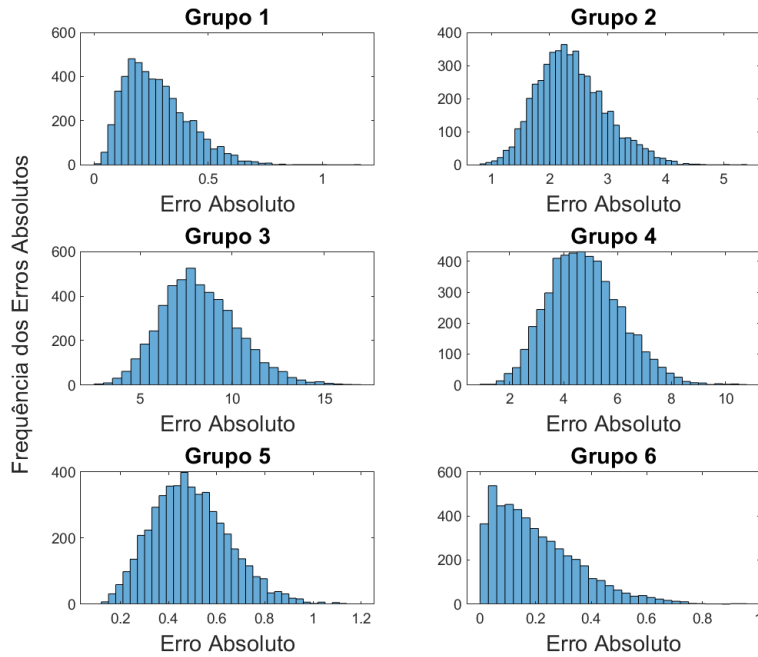


Figura 7.12: Problema Teste III com matriz de covariância \mathbf{W}_2 : histograma dos erros absolutos.

7.5 Resultados Numéricos para a Estimativa de Fontes via Método de Tikhonov Iterado em Geometria Cartesiana Bidimensional

Nesta seção, a formulação desenvolvida para a estimativa de fontes de partículas é testada em problema de transporte em geometria cartesiana bidimensional.

7.5.1 Problema Teste IV

É considerado o problema teste proposto por Curbelo e Barros [45], definido em geometria cartesiana bidimensional, meio heterogêneo e espalhamento isotrópico, definido no retângulo $(x,y) \in [0, 10] \times [0, 10]$, conforme a Figura 7.13.

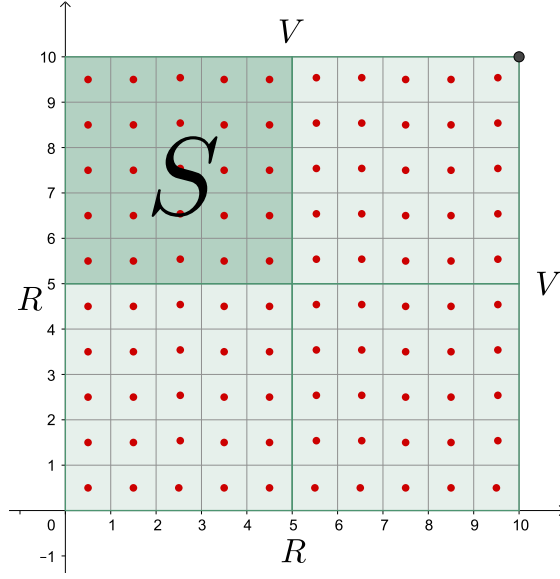


Figura 7.13: Problema Teste IV: configuração do meio.

São definidos no retângulo exibido na Figura 7.13 quatro regiões, a saber $D_1 = [0, 5] \times [0, 5]$, $D_2 = [5, 10] \times [0, 5]$, $D_3 = [0, 5] \times [5, 10]$ e $D_4 = [5, 10] \times [5, 10]$. São supostas seções de choque macroscópicas total $\sigma_{t,1} = 1 \text{ cm}^{-1}$, $\sigma_{t,2} = 2 \text{ cm}^{-1}$, $\sigma_{t,3} = 2 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_{t,4} = 2 \text{ cm}^{-1}$, e seções de choque de espalhamento $\sigma_{s,1} = 0,5 \text{ cm}^{-1}$, $\sigma_{s,2} = 0,1 \text{ cm}^{-1}$, $\sigma_{s,3} = 0,1 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_{s,4} = 0,1 \text{ cm}^{-1}$, para as regiões D_1 , D_2 , D_3 e D_4 , respectivamente. Além disso, são assumidas condições de contorno de vácuo em $x = 10 \text{ cm}$ e $y = 10 \text{ cm}$, isto é,

$$\psi(10, y, \mathbf{\Omega}_{in}) = 0, \quad (7.66)$$

e

$$\psi(x, 10, \mathbf{\Omega}_{in}) = 0, \quad (7.67)$$

bem como condições de contorno reflexivas em $x = 0 \text{ cm}$ e $y = 0 \text{ cm}$, ou seja,

$$\psi(0, y, \mathbf{\Omega}_{in}) = \psi(0, y, \mathbf{\Omega}_{out}), \quad (7.68)$$

e

$$\psi(x, 0, \mathbf{\Omega}_{in}) = \psi(x, 0, \mathbf{\Omega}_{out}), \quad (7.69)$$

para $x \in [0, 10]$ e $y \in [0, 10]$, onde $\mathbf{\Omega}_{in}$ representa as direções de fluxo incidente sobre a fronteira do domínio e $\mathbf{\Omega}_{out}$ as direções de fluxo emergente. O objetivo é estimar

a fonte interna de partículas

$$S(x,y) = \begin{cases} 1, & \text{para } (x,y) \in D_3, \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.70)$$

conforme a Figura 7.14.

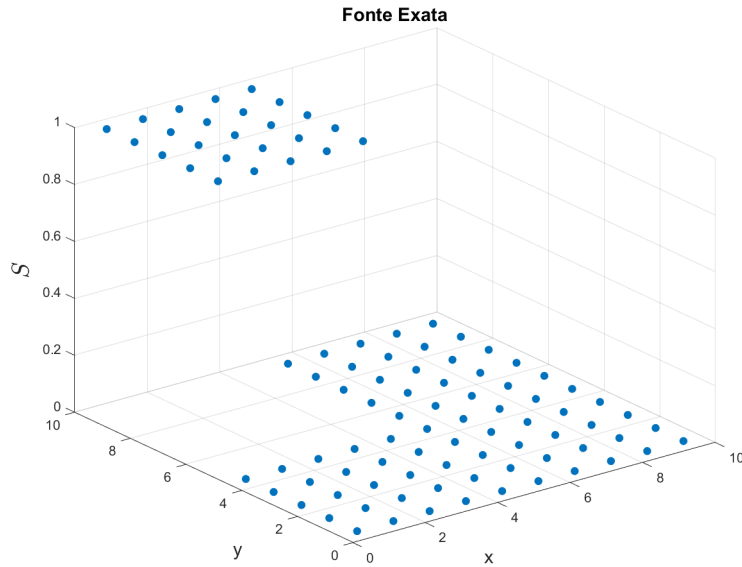


Figura 7.14: Problema Teste IV: fonte exata.

Para a obtenção de medições ruidosas, é assumida a presença de cem detectores de partículas, uniformemente espaçados no interior do domínio do problema, representados pelos pontos em vermelho na Figura 7.13. As seções de choque de absorção de cada detector valem $\sigma_d = 0,5 \text{ cm}^{-1}$. Medições consideradas exatas, \mathbf{r}_E , são obtidas por meio de uma implementação própria do método DD [82] no contexto bidimensional, considerando a quadratura LQ_N com $N = 16$, o que equivale a 144 direções discretas, 100 nós por cm e tolerância de 10^{-6} para o processo iterativo. Como nos problemas testes anteriores, é introduzida uma matriz de covariância com a finalidade de gerar um vetor aleatório $\boldsymbol{\epsilon}$ para a Equação (7.31). Neste problema teste, é considerada a matriz $\mathbf{W}_1 = (0,01 \times \max \mathbf{r}_E)^2 \mathbf{I}$, onde \mathbf{I} é a matriz identidade de ordem 100.

A matriz \mathbf{A} da Equação (7.40) é calculada por meio da Equação (7.27) pela formulação ADO-Nodal para a equação adjunta de transporte bidimensional, com $N = 4$, o que equivale a 12 direções discretas. A base para a expansão da aproximação de \mathbf{S} é definida por meio da Equação (7.12), ao considerar partições uniformes de dez subintervalos do intervalo $[0, 10]$ para as variáveis x e y . A matriz de regularização utilizada é $\mathbf{L}_0 = \mathbf{I}$. Além disso, para a obtenção dos resultados, é considerado um espaço amostral de cinco mil realizações do vetor aleatório ϵ .

A Tabela 7.7 apresenta os valores de mínimo, média, máximo e desvio padrão para os erros absolutos das cinco mil estimativas, na norma $L^2([0, 10] \times [0, 10])$, onde \hat{S} representa a projeção de S sobre o espaço gerado pela base escolhida para as estimativas.

Tabela 7.7: Problema Teste IV com matriz de covariância \mathbf{W}_1 : erros absolutos – mínimo, média, máximo e desvio padrão.

Erros	Mínimo	Média	Máximo	Desvio Padrão
$\ \tilde{S} - \hat{S}\ $	0,3623	0,4486	0,5308	0,0229

Conforme a Tabela 7.7 aponta, o valor da média dos erros absolutos está próximo dos valores de mínimo e máximo para os erros absolutos, com um desvio padrão de uma ordem de magnitude menor que tais valores.

Na Figura 7.15, os pontos vazados em vermelho representam a média das aproximações \tilde{S} de S , representada pelos pontos sólidos azuis. Além disso, as linhas verticais em torno dos pontos vermelhos representam os intervalos de 95% de confiança.

Como pode ser visto na Figura 7.15, o método foi capaz de fornecer uma boa identificação para a posição da fonte de partículas, bem com obter uma boa aproximação para a sua magnitude, corroborando os dados apresentados na Tabela 7.7.

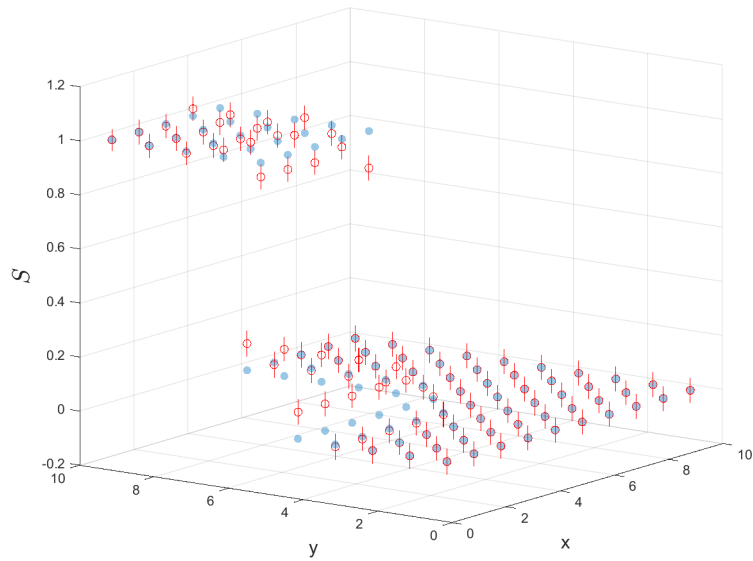


Figura 7.15: Problema Teste IV com matriz de covariância \mathbf{W}_1 : gráfico da fonte exata de S (pontos sólidos em azul), das médias das aproximações de \hat{S} (pontos vazados em vermelho) e respectivos intervalos de 95% de confiança (linhas verticais).

A Figura 7.16, por sua vez, apresenta o histograma dos erros absolutos entre a fonte de partículas exata e as suas estimativas.

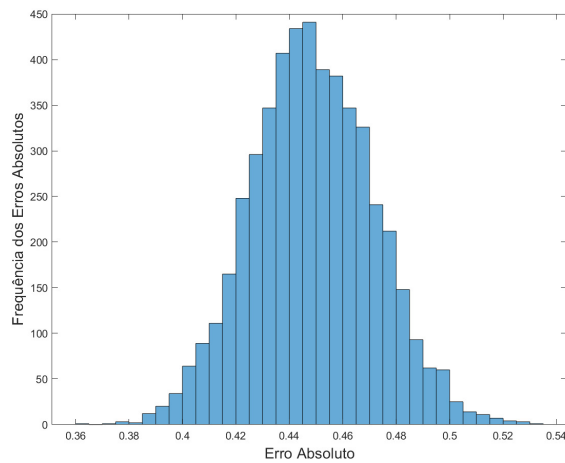


Figura 7.16: Problema Teste IV com matriz de covariância \mathbf{W}_1 : histograma dos erros absolutos.

A Figura 7.16 aponta que a média dos erros absolutos está localizada em torno de 0,45, com frequências concentradas em torno da média, conforme sugerido pelo desvio padrão apresentado na Tabela 7.7.

Para a adição de níveis maiores de ruídos nas medições exatas \mathbf{r}_E , é considerada a matriz de covariância $\mathbf{W}_2 = (0,05 \times \max \mathbf{r}_E)^2 \mathbf{I}$ na Equação (7.31). A Figura 7.17 apresenta a aproximação na qual os pontos vazados em vermelho representam a média das aproximações \tilde{S} de S , representada pelos pontos sólidos azuis. Além disso, as linhas verticais em torno dos pontos vermelhos representam os intervalos de 95% de confiança.

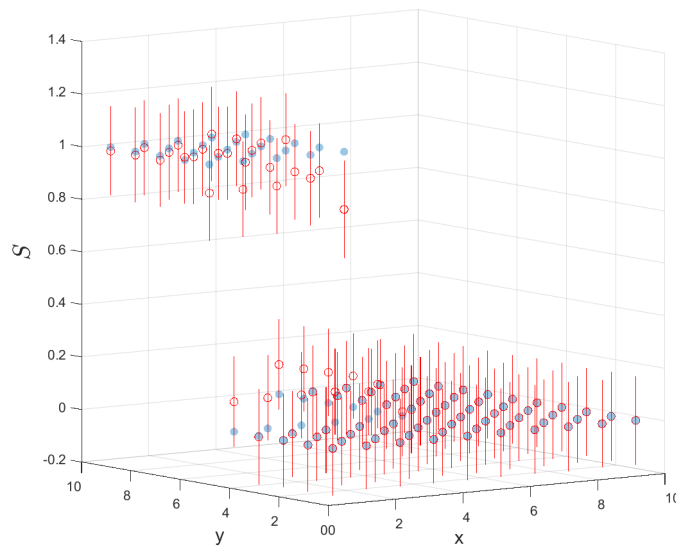


Figura 7.17: Problema Teste IV com matriz de covariância \mathbf{W}_2 : gráfico da fonte exata de \mathbf{S} (pontos sólidos em azul), das médias das aproximações de $\tilde{\mathbf{S}}$ (pontos vazados em vermelho) e respectivos intervalos de 95% de confiança (linhas verticais).

Ao comparar o gráfico presente na Figura 7.17 com o da Figura 7.15, é possível notar que, mesmo com o novo nível de ruído, o método foi capaz de identificar a localização da fonte. Porém, os intervalos de confiança neste teste foram muito maiores que os apresentados no teste anterior, conforme a Figura 7.15, prejudicando a estimativa da magnitude da fonte S . A Figura 7.18 apresenta o

histograma dos erros absolutos entre a fonte de partículas exata e as suas estimativas.

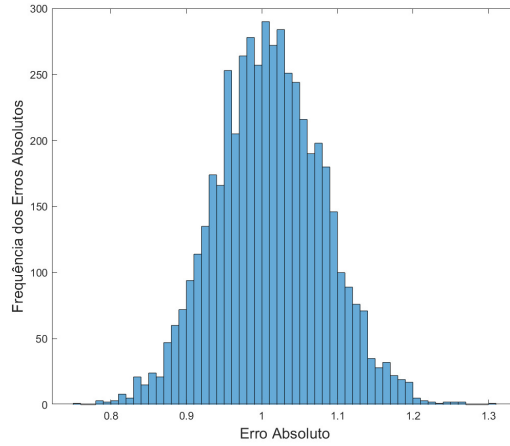


Figura 7.18: Problema Teste IV com matriz de covariância \mathbf{W}_2 : histograma dos erros absolutos.

Conforme a Figura 7.18 indica, o erro absoluto médio está situado em torno de 1,0, com caudas entre 0,7 e 1,3. Vale destacar que tais valores são compatíveis com a magnitude da fonte na região D_3 , corroborando com a grande variabilidade dos resultados obtidos. A Tabela 7.8 concorda com a análise feita com base nas Figuras 7.17 e 7.18.

Tabela 7.8: Problema Teste IV com matriz de covariância \mathbf{W}_2 : erros absolutos – mínimo, média, máximo e desvio padrão.

Erros	Mínimo	Média	Máximo	Desvio Padrão
$\ \tilde{S} - \hat{S}\ $	0,7597	1,0108	1,3090	0,0711

7.5.2 Problema Teste V

Para este problema teste, são mantidas as mesmas configurações físicas do Problema Teste IV, considerando, contudo, uma fonte de partículas distinta

daquela proposta no teste anterior. Assim, o objetivo passa a ser estimar a fonte interna de partículas

$$S(z) = \begin{cases} 1,0, & \text{para } (x,y) \in [2, 4] \times [2, 4], \\ 1,5, & \text{para } (x,y) \in [6, 8] \times [6, 8], \\ 0,0 & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.71)$$

para $(x,y) \in [0, 10] \times [0, 10]$, conforme a Figuras 7.19 e 7.20.

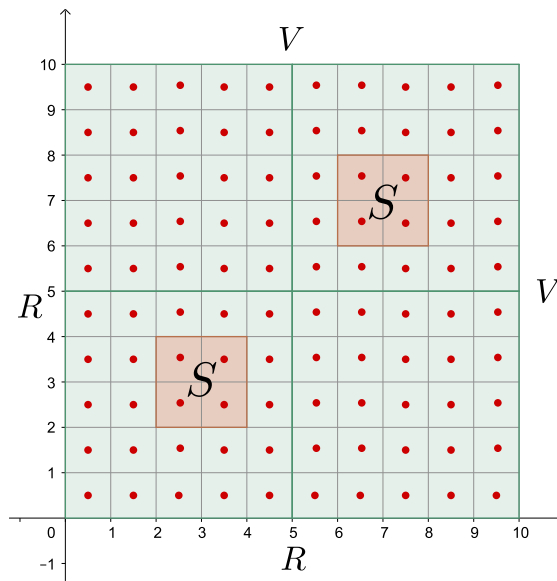


Figura 7.19: Problema Teste V: configuração do meio.

Além disso, são consideradas as mesmas configurações de detectores e funções base do Problema Teste IV. Para a obtenção das medições assumidas como exatas, \mathbf{r}_E , é utilizado, como anteriormente, o método DD [82], com 144 direções discretas, 100 nós por cm e tolerância de 10^{-6} para o processo iterativo. Por fim, é introduzida a matriz de covariância $\mathbf{W} = (0,01 \times \max \mathbf{r}_E)^2 \mathbf{I}$, com a finalidade de gerar um vetor aleatório $\boldsymbol{\epsilon}$ para a Equação (7.31).

Como nem a distribuição dos detectores no interior do domínio do problema, nem as propriedades físicas do meio foram alteradas, a matriz \mathbf{A} da Equação (7.40) é a mesma do Problema Teste IV. Como anteriormente, para a obtenção

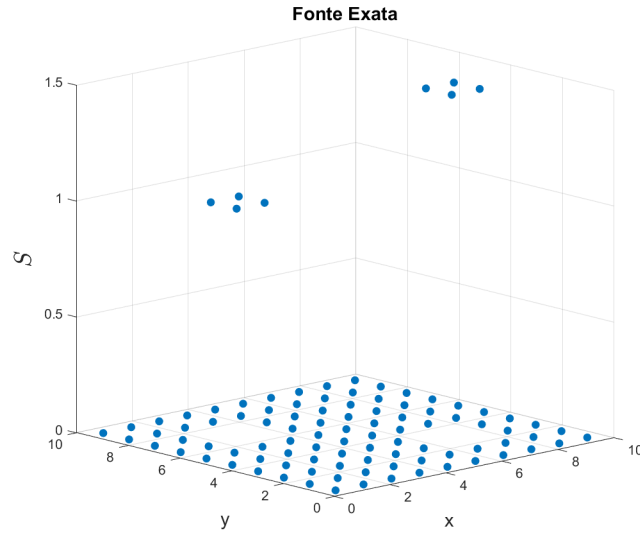


Figura 7.20: Problema Teste V: fonte exata.

dos resultados, é considerado um espaço amostral de cinco mil realizações do vetor aleatório ϵ .

Os valores de mínimo, média, máximo e desvio padrão para os erros absolutos das cinco mil estimativas são apresentados na Tabela 7.9.

Tabela 7.9: Problema Teste V: erros absolutos – mínimo, média, máximo e desvio padrão.

Erros	Mínimo	Média	Máximo	Desvio Padrão
$\ \tilde{S} - \hat{S}\ $	0,3730	0,4495	0,5361	0,0229

Na Figura 7.21, os pontos vazados em vermelho representam a média das aproximações \tilde{S} de S , representada pelos pontos sólidos azuis. Além disso, as linhas verticais em torno dos pontos vermelhos representam os intervalos de 95% de confiança.

Como pode ser visto na Figura 7.21, o método foi capaz de fornecer uma boa identificação para as duas regiões para as quais a fonte de partículas é não nula. De fato, para $(x,y) \in [2,4] \times [2,4]$, a média das cinco mil estimativas

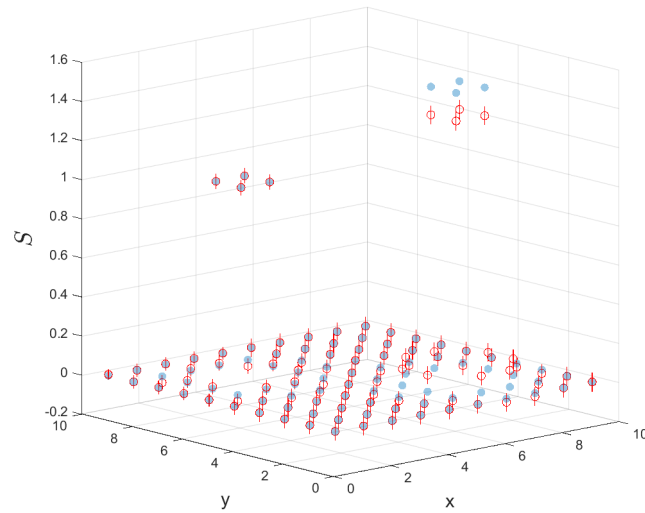


Figura 7.21: Problema Teste V: gráfico da fonte exata de \mathcal{S} (pontos sólidos em azul), das médias das aproximações de $\tilde{\mathcal{S}}$ (pontos vazados em vermelho) e respectivos intervalos de 95% de confiança (linhas verticais).

apresentou praticamente a magnitude exata, com pequenos intervalos de confiança. Porém, para $(x,y) \in [6, 8] \times [6, 8]$, o método não apresentou grande acurácia ao estimar a magnitude.

Finalmente, na Figura 7.22 é apresentado o histograma dos erros absolutos entre a fonte de partículas exata e as suas estimativas.

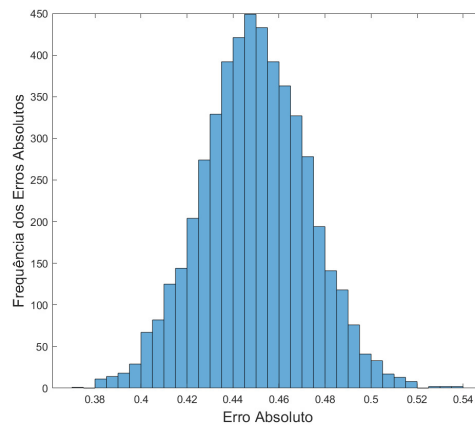


Figura 7.22: Problema Teste V: histograma dos erros absolutos.

Conforme a Figura 7.22 aponta, o comportamento dos erros absolutos foi aproximadamente gaussiano, com média em torno de 0,45.

Por fim, tanto nos problemas em geometria cartesiana unidimensional dependente da energia quanto naqueles em geometria cartesiana bidimensional monoenergéticos, o método foi capaz de estimar a localização das fontes de partículas. Além disso, dependendo da magnitude dos erros presentes nas medições, foi capaz de, na maioria dos casos, aproximar a magnitude das fontes internas de partículas.

Ainda, a função objetivo não regularizada, conforme definida na Equação (7.36), foi derivada a partir de uma série de hipóteses estatísticas a respeito do comportamento dos erros presentes nas medições, e é capaz de fornecer estimativas pontuais para os parâmetros α , as quais, por sua vez, possuem significado estatístico [29, 71, 95]. Contudo, com a inclusão de técnicas de regularização, a análise dos erros não é tão clara, como é o caso da regularização de Tikhonov considerada na Equação (7.40), situação na qual a Equação (7.36) recebe um termo de penalização.

7.6 Técnicas de Inferência Bayesiana

Quando técnicas de inferência Bayesiana são empregadas para a resolução de problemas inversos, existe uma mudança conceitual sobre o que é considerada uma solução para o problema. Ao invés de produzirem estimativas pontuais, como é o caso de uma solução que minimiza a Equação (7.36), as técnicas Bayesianas fornecem como solução do problema inverso uma distribuição de probabilidade, a qual pode ser utilizada para a obtenção de estimativas [71]. Tais técnicas, através do Teorema de Bayes, incorporam as hipóteses com respeito aos erros presentes nas medições, a chamada verossimilhança, com informações previamente conhecidas a respeito dos parâmetros a serem estimados e suas incertezas [38, 71, 95, 109].

Para isso, no contexto da inferência Bayesiana, todas as variáveis incluídas no modelo matemático utilizado são assumidas como variáveis aleatórias [95]. Ainda, para Kaipio e Somersalo, o uso de técnicas Bayesianas para a resolução de um problema inverso se resume em três tarefas [71]:

- (i) Selecionar densidades de probabilidade que reflitam adequadamente todas as informações disponíveis a respeito dos parâmetros desconhecidos que se deseja estimar antes de conhecidas as medições, chamadas estas de informações *a priori*.
- (ii) Determinar uma função de verossimilhança que modele os erros nas medições condicionados aos parâmetros considerados.
- (iii) Explorar a função de densidade posterior, a qual representa, pelo Teorema de Bayes, a distribuição de probabilidade dos parâmetros desconhecidos condicionada às medições.

Assim, a densidade de probabilidade posterior é definida por $\pi_{post}(\boldsymbol{\alpha}) = \pi(\boldsymbol{\alpha}|\tilde{\mathbf{r}})$, de onde, pela definição de probabilidade condicional [38], é possível escrever

$$\pi_{post}(\boldsymbol{\alpha}) = \pi(\boldsymbol{\alpha}|\tilde{\mathbf{r}}) = \frac{\pi(\boldsymbol{\alpha}, \tilde{\mathbf{r}})}{\pi(\tilde{\mathbf{r}})}, \quad (7.72)$$

onde $\pi(\tilde{\mathbf{r}})$ é a densidade marginal das medições $\tilde{\mathbf{r}}$, definida por [38]

$$\pi(\tilde{\mathbf{r}}) = \int \pi(\boldsymbol{\alpha}, \tilde{\mathbf{r}}) d\boldsymbol{\alpha}, \quad (7.73)$$

cuja integral na Equação (7.73) é tomada sobre todo o domínio da variável $\boldsymbol{\alpha}$. Ainda, $\pi(\boldsymbol{\alpha}, \tilde{\mathbf{r}})$, na Equação (7.72) representa a distribuição de probabilidade conjunta, e é tal que [38]

$$\pi(\boldsymbol{\alpha}, \tilde{\mathbf{r}}) = \pi(\tilde{\mathbf{r}}|\boldsymbol{\alpha})\pi(\boldsymbol{\alpha}). \quad (7.74)$$

Assim, ao substituir a Equação (7.74) na Equação (7.72), é obtida a expressão para a fórmula de Bayes [38]

$$\pi_{post}(\boldsymbol{\alpha}) = \frac{\pi(\tilde{\mathbf{r}}|\boldsymbol{\alpha})\pi(\boldsymbol{\alpha})}{\pi(\tilde{\mathbf{r}})}. \quad (7.75)$$

É preciso destacar que a densidade marginal, definida na Equação (7.73), é tipicamente de difícil obtenção e, além disso, não passa de uma constante de normalização. Contudo, tal densidade não precisa ser determinada, em virtude de ser cancelada no método que será empregado para a obtenção de estimativas pontuais da distribuição posterior. Com isso, é possível escrever

$$\pi_{post}(\boldsymbol{\alpha}) = \frac{\pi(\tilde{\mathbf{r}}|\boldsymbol{\alpha})\pi(\boldsymbol{\alpha})}{\pi(\tilde{\mathbf{r}})} \propto \pi(\tilde{\mathbf{r}}|\boldsymbol{\alpha})\pi(\boldsymbol{\alpha}), \quad (7.76)$$

para a densidade posterior.

O termo $\pi(\tilde{\mathbf{r}}|\boldsymbol{\alpha})$ na Equação (7.76) é a distribuição dos erros nas medições condicionada aos parâmetros considerados, ou seja, é a verossimilhança modelada na Equação (7.33). Por sua vez, $\pi(\boldsymbol{\alpha})$, na Equação (7.76), representa as informações *a priori* sobre os parâmetros. Para a estimativa de funções espacialmente distribuídas, como é o caso das fontes presentes neste trabalho, a literatura sugere o uso de redes de Markov [71, 95]. Uma rede de Markov comum é a rede de Markov Gaussiana, dada por [71]

$$\pi(\boldsymbol{\alpha}) = (2\pi)^{-\frac{N}{2}} \lambda^{\frac{N}{2}} |\mathbf{Z}^{-1}|^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \lambda [\boldsymbol{\alpha} - \tilde{\boldsymbol{\alpha}}]^T \mathbf{Z} [\boldsymbol{\alpha} - \tilde{\boldsymbol{\alpha}}] \right\}, \quad (7.77)$$

onde $\tilde{\boldsymbol{\alpha}}$ representa alguma estimativa inicial para $\boldsymbol{\alpha}$, λ é um parâmetro fixo, associado às incertezas da distribuição *a priori* e, por fim, \mathbf{Z} é uma matriz dada por

$$\mathbf{Z} = \mathbf{L}^T \mathbf{L}, \quad (7.78)$$

onde cada linha do vetor $\mathbf{L} [\boldsymbol{\alpha} - \tilde{\boldsymbol{\alpha}}]$ associa uma componente α_j de $\boldsymbol{\alpha}$ com as suas componentes vizinhas. Para a estimativa de funções, por exemplo, matrizes de Tikhonov são, tipicamente, boas escolhas [71].

Assim como no caso da Regularização de Tikhonov, a Equação (7.77) possui um parâmetro, λ , que deve ser adequadamente escolhido. Tal parâmetro é frequentemente fixado de maneira experimental. Contudo, é possível, no âmbito dos métodos que fazem uso da inferência Bayesiana, tratar λ como uma variável aleatória

incorporada no processo de inferência [71]. Uma das possíveis escolhas apresentadas na literatura é supor que λ é distribuída segundo a distribuição Rayleigh centrada em $\lambda_0 > 0$ [71], isto é,

$$\pi(\lambda) = \frac{\lambda}{\lambda_0^2} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \left(\frac{\lambda}{\lambda_0} \right)^2 \right\}. \quad (7.79)$$

Dessa forma, se $\pi(\boldsymbol{\alpha}|\lambda)$ representar a densidade de probabilidade de $\boldsymbol{\alpha}$ condicionado à λ fixo, conforme a Equação (7.77), então a distribuição de probabilidade conjunta $\pi(\lambda, \boldsymbol{\alpha})$ pode ser escrita como

$$\pi(\lambda, \boldsymbol{\alpha}) = \pi(\boldsymbol{\alpha}|\lambda)\pi(\lambda), \quad (7.80)$$

de onde decorre que

$$\pi(\lambda, \boldsymbol{\alpha}) = (2\pi)^{-\frac{N}{2}} \lambda^{\frac{N+2}{2}} |\mathbf{Z}^{-1}|^{-\frac{1}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \lambda [\boldsymbol{\alpha} - \tilde{\boldsymbol{\alpha}}]^T \mathbf{Z} [\boldsymbol{\alpha} - \tilde{\boldsymbol{\alpha}}] - \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda}{\lambda_0} \right)^2 \right\}, \quad (7.81)$$

ou, conforme comentado na obtenção da Equação (7.76),

$$\pi(\lambda, \boldsymbol{\alpha}) \propto \lambda^{\frac{N+2}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} \lambda [\boldsymbol{\alpha} - \tilde{\boldsymbol{\alpha}}]^T \mathbf{Z} [\boldsymbol{\alpha} - \tilde{\boldsymbol{\alpha}}] - \frac{1}{2} \left(\frac{\lambda}{\lambda_0} \right)^2 \right\}, \quad (7.82)$$

ao ignorar as constantes multiplicativas.

Finalmente, é possível, por meio da fórmula de Bayes [38, 71], escrever a distribuição posterior

$$\pi_{post}(\boldsymbol{\alpha}, \lambda) = \pi(\boldsymbol{\alpha}, \lambda | \tilde{\mathbf{r}}) \propto \pi(\tilde{\mathbf{r}} | \boldsymbol{\alpha}, \lambda) \pi(\lambda, \boldsymbol{\alpha}), \quad (7.83)$$

de onde decorre que

$$\begin{aligned} \pi_{post}(\boldsymbol{\alpha}, \lambda) \propto \lambda^{\frac{N+2}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} [\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}(\boldsymbol{\alpha})]^T \mathbf{W}^{-1} [\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}(\boldsymbol{\alpha})] \right. \\ \left. -\frac{1}{2} \lambda [\boldsymbol{\alpha} - \tilde{\boldsymbol{\alpha}}]^T \mathbf{Z} [\boldsymbol{\alpha} - \tilde{\boldsymbol{\alpha}}] \right. \\ \left. -\frac{1}{2} \left(\frac{\lambda}{\lambda_0} \right)^2 \right\}. \end{aligned} \quad (7.84)$$

É preciso destacar que para os problemas considerados neste trabalho, a Equação (7.84) só é adequada no contexto monoenergético, uma vez que, neste caso, apenas uma função está sendo estimada. No contexto dependente da energia, onde foi assumida a aproximação multigrupos de energia, é feita a estimativa de uma função para cada grupo de energia. Nesse sentido, a Equação (7.84) é modificada para englobar a dependência energética, expressa como

$$\begin{aligned} \pi_{post}(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\lambda}) \propto \prod_{g=1}^G \lambda_g^{\frac{N_g+2}{2}} \exp \left\{ -\frac{1}{2} [\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}(\boldsymbol{\alpha})]^T \mathbf{W}^{-1} [\tilde{\mathbf{r}} - \mathbf{r}(\boldsymbol{\alpha})] \right. \\ \left. -\frac{1}{2} \sum_{g=1}^G \lambda_g [\boldsymbol{\alpha}_g - \tilde{\boldsymbol{\alpha}}_g]^T \mathbf{Z} [\boldsymbol{\alpha}_g - \tilde{\boldsymbol{\alpha}}_g] \right. \\ \left. -\frac{1}{2} \sum_{g=1}^G \left(\frac{\lambda_g}{\lambda_{g,0}} \right)^2 \right\}, \end{aligned} \quad (7.85)$$

onde $\boldsymbol{\alpha} = [\boldsymbol{\alpha}_1^T \cdots \boldsymbol{\alpha}_G^T]^T$, conforme estabelecido na Equação (7.26), e $\boldsymbol{\lambda} = [\lambda_1 \cdots \lambda_G]^T$. Além disso, para $g \in \{1, \dots, G\}$, λ_g representa o parâmetro das incertezas da rede de Markov Gaussiana associada ao g -ésimo grupo de energia e $\lambda_{g,0}$ é a média da distribuição de Rayleigh do g -ésimo grupo de energia.

A Equação (7.85) condensa as duas primeiras tarefas necessárias para o uso de técnicas Bayesianas na resolução de problemas inversos. Contudo, ainda é preciso a capacidade de explorar a densidade posterior dada pela Equação (7.85). Uma solução pontual para o problema inverso pode ser tipicamente expressa ao buscar $\hat{\boldsymbol{\alpha}}$ e $\hat{\boldsymbol{\lambda}}$ tais que

$$[\hat{\boldsymbol{\alpha}}, \hat{\boldsymbol{\lambda}}] = \arg \max_{\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\lambda}} \pi_{post}(\boldsymbol{\alpha}, \boldsymbol{\lambda}), \quad (7.86)$$

o que não possui tratamento analítico como no caso da Equação (7.37). Além disso, diversas das estatísticas de interesse podem necessitar a integração de grandezas derivadas da Equação (7.85), tarefa que pode ser bastante desafiadora [95].

O método de Monte Carlo via cadeias de Markov (sigla MCMC – do inglês *Markov chain Monte Carlo*) oferece uma alternativa na qual o cálculo de estatísticas com base na distribuição posterior se traduz no cálculo de estatísticas sobre

certas amostras da distribuição posterior determinadas ao utilizar uma simulação de Monte Carlo para percorrer uma cadeia de Markov [71, 95, 109].

Um processo estocástico discreto é uma sequência de variáveis aleatórias $\{\mathbf{X}^{(t)}\}_{t \in \mathbb{N}}$, onde cada $\mathbf{X}^{(t)} \in \mathbb{R}^N$ é um estado no processo estocástico [28, 71, 109]. Uma cadeia de Markov é um processo estocástico que goza da chamada propriedade de Markov [28, 71, 109], a saber, é um processo estocástico para o qual existe uma probabilidade de transição q entre estados tal que

$$\begin{aligned} q(\mathbf{X}^{(t+1)} = \mathbf{y} | \mathbf{X}^{(t)} = \mathbf{x}, \mathbf{X}^{(t-1)} = \mathbf{x}^{t-1}, \dots, \mathbf{X}^{(0)} = \mathbf{x}^0) \\ = q(\mathbf{X}^{(t+1)} = \mathbf{y} | \mathbf{X}^{(t)} = \mathbf{x}), \end{aligned} \quad (7.87)$$

para quaisquer $\mathbf{y}, \mathbf{x}, \mathbf{x}^{(t-1)}, \dots, \mathbf{x}^{(0)}$ em \mathbb{R}^N . Em outras palavras, uma cadeia de Markov é um processo estocástico para o qual a probabilidade de transição q do estado $X^{(t+1)}$ depende apenas do estado anterior, $X^{(t)}$, e não dos estados que o precedem.

O algoritmo de Metropolis-Hastings gera candidatos a estados em uma cadeia de Markov através da amostragem de uma distribuição de probabilidade auxiliar. No caso no qual os candidatos são gerados por meio de um passeio aleatório, se Ψ é um vetor aleatório normalmente distribuído com média $\mathbf{0}$ e desvio padrão Σ , então um candidato $\mathbf{X}^{(*)}$ pode ser definido por meio da expressão [71, 95]

$$\mathbf{X}^{(*)} = \mathbf{X}^{(t)} + \Psi, \quad (7.88)$$

para algum $t \in \mathbb{N}$.

Por meio de uma condição de aceitação-rejeição, o candidato $\mathbf{X}^{(*)}$ pode ser incorporado ou não à cadeia de Markov. Para isso, é necessário, antes, definir a razão de Metropolis, dada pela expressão [71, 95]

$$\rho(\mathbf{X}^{(*)} | \mathbf{X}^{(t)}) = \min \left\{ 1, \frac{\pi_{post}(\mathbf{X}^{(*)})}{\pi_{post}(\mathbf{X}^{(t)})} \right\}, \quad (7.89)$$

para um estado $\mathbf{X}^{(t)}$ fixo da cadeia de Markov. Para o processo de aceitação-rejeição, é gerado um número aleatório u , uniformemente distribuído no intervalo

$[0, 1]$. O estado $\mathbf{X}^{(*)}$ é aceito se $u \leq \rho(\mathbf{X}^{(*)}|\mathbf{X}^{(t)})$, e, caso contrário, rejeitado. Assim, é definido o estado $\mathbf{X}^{(t+1)}$ por meio de [38, 71, 95]

$$\mathbf{X}^{(t+1)} = \begin{cases} \mathbf{X}^{(*)}, & \text{se } u \leq \rho(\mathbf{X}^{(*)}|\mathbf{X}^{(t)}), \\ \mathbf{X}^{(t)}, & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (7.90)$$

Vale destacar que, pela Equação (7.89), $\mathbf{X}^{(t+1)} = \mathbf{X}^{(*)}$, na Equação (7.90), sempre que a probabilidade posterior de $\mathbf{X}^{(*)}$ for maior que a de $\mathbf{X}^{(t)}$, uma vez que $u \leq \rho(\mathbf{X}^{(*)}|\mathbf{X}^{(t)}) = 1$. Por outro lado, se a probabilidade posterior de $\mathbf{X}^{(*)}$ for menor que a de $\mathbf{X}^{(t)}$, a aceitação ou rejeição do candidato dependerá do valor de u .

O Pseudocódigo 2 apresenta os passos necessários para a obtenção da cadeia de Markov gerada por meio do algoritmo de Metropolis-Hastings.

Pseudocódigo 2 Algoritmo de Metropolis-Hastings para MCMC.

```

1:  $t \leftarrow 0$ 
2:  $\mathbf{X}^{(0)} \leftarrow \tilde{\mathbf{X}}$  ▷ Estado inicial da cadeia de Markov.
3: enquanto  $t \leq t_{max}$  faça
4:    $\Psi \leftarrow \mathcal{N}(\mathbf{0}, \Sigma)$  ▷ Determina passo no passeio aleatório.
5:    $\mathbf{X}^{(*)} \leftarrow \mathbf{X}^{(t)} + \Psi$  ▷ Determina candidato para próximo estado.
6:    $\rho \leftarrow \rho(\mathbf{X}^{(*)}|\mathbf{X}^{(t)})$  ▷ Calcula a razão de Metropolis-Hastings.
7:    $u \leftarrow \mathcal{U}(0,1)$  ▷ Obtém um número aleatório.
8:   se  $u \leq \rho$  então ▷ Executa o teste de Metropolis-Hastings.
9:      $\mathbf{X}^{(t+1)} \leftarrow \mathbf{X}^{(*)}$ 
10:  senão
11:     $\mathbf{X}^{(t+1)} \leftarrow \mathbf{X}^{(t)}$ 
12:  fim se
13:   $t \leftarrow t + 1$ 
14: fim enquanto

```

7.7 Resultados Numéricos para a Estimativa de Fontes via Método de Metropolis-Hastings em Geometria Cartesiana Unidimensional

A fim de testar a formulação desenvolvida na seção anterior, são considerados, em geometria cartesiana unidimensional dependente da energia, os mesmos problemas testes anteriormente resolvidos a partir do método de Tikhonov iterado.

7.7.1 Problema Teste VI

Para este problema teste são consideradas as mesmas configurações de meio físico e detectores apresentadas no Problema Teste I. Dessa forma, o objetivo é a obtenção de estimativas para a fonte interna de partículas $\mathbf{S} = [S_1 \ S_2]^T$, cujas componentes são funções polinomiais dadas por

$$S_1(z) = -\frac{20}{4000}z^2(z - 10), \quad (7.91)$$

e

$$S_2(z) = \begin{cases} \frac{500}{75031}z^2(z^2 - 14z + 49), & \text{para } z \in [0, 7], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.92)$$

para $z \in [0, 10]$.

Para a obtenção de medições ruidosas é utilizada a matriz de covariância $\mathbf{W} = (0,01 \times \max \mathbf{r}_E)^2 \mathbf{I}$, onde \mathbf{I} é a matriz identidade de ordem M , com a finalidade de gerar um vetor aleatório ϵ para a Equação (7.31). Além disso, na Equação (7.78), é considerada como matriz de regularização $\mathbf{L} = \mathbf{L}_1$, conforme definida na Equação (7.55). Por fim, para a aplicação do algoritmo de Metropolis-Hastings, são considerados cinco milhões de estados, sendo os quinhentos mil primeiros estados descartados.

A Tabela 7.10 apresenta os valores de mínimo, média, máximo e desvio padrão para os erros absolutos de todos os estados considerados, na norma

$L^2([0, 10])$, onde \hat{S}_1 e \hat{S}_2 representam, respectivamente, as projeções de S_1 e S_2 na base escolhida para as estimativas.

Tabela 7.10: Problema Teste VI: erros absolutos – mínimo, média, máximo e desvio padrão.

Erros	Mínimo	Média	Máximo	Desvio Padrão
$\ \tilde{S}_1 - \hat{S}_1\ $	0,3423	0,7334	1,1651	0,1107
$\ \tilde{S}_2 - \hat{S}_2\ $	0,1213	0,3323	0,7744	0,0854

Conforme pode ser verificado na Tabela 7.10, os erros absolutos no segundo grupo de energia foram menores que os encontrados no primeiro grupo de energia. Além disso, foram obtidos erros superiores aos encontrados a partir do uso do método de Tikhonov iterado, conforme pode ser visto na Tabela 7.2. Na Figura 7.23, as linhas sólidas em vermelho representam os gráficos das aproximações \tilde{S}_1 e \tilde{S}_2 das componentes de \mathbf{S} , os asteriscos representam a média dos estados considerados para cada uma das componentes, e as linhas verticais em torno dos asteriscos representam os intervalos de 95% de credibilidade.

Conforme a Figura 7.23 aponta, o método foi capaz de estimar as fontes de partículas presentes nos dois grupos de energia. Além disso, as magnitudes dos valores médios das estimativas (asteriscos) obtidas ficaram bastante próximas aos valores reais da fonte, embora os intervalos de 95% de credibilidade tenham se mostrado maiores que os apresentados na Figura 7.4 do Problema Teste I. A Figura 7.24, por sua vez, apresenta as cadeias de Markov dos erros absolutos para cada um dos grupos de energia.

Os gráficos presentes na Figura 7.24 apontam que as respectivas cadeias de Markov alcançaram estados estacionários. Ainda, vale destacar que dos cinco milhões de estados considerados, cerca de 56,1% foram aceitos.

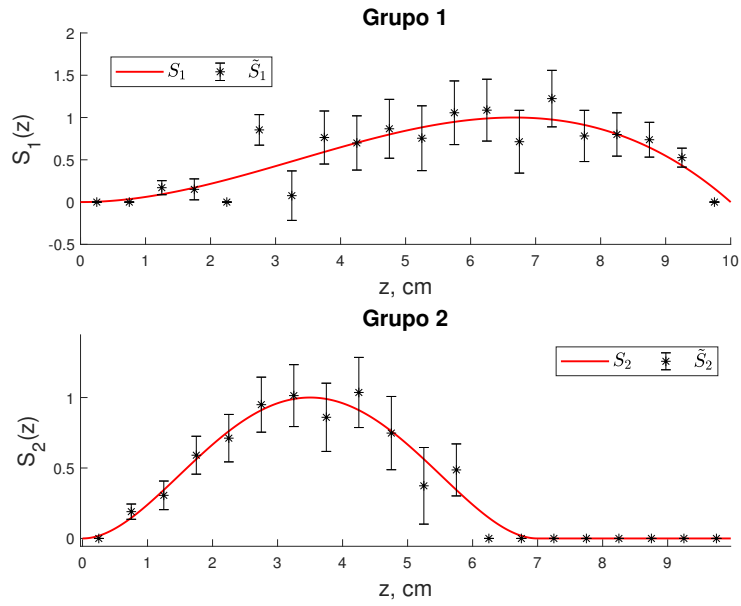


Figura 7.23: Problema Teste VI: gráficos das componentes exatas de \mathbf{S} (linhas sólidas em vermelho), das componentes médias das aproximações de $\tilde{\mathbf{S}}$ (asteriscos) e respectivos intervalos de 95% de credibilidade (linhas verticais).

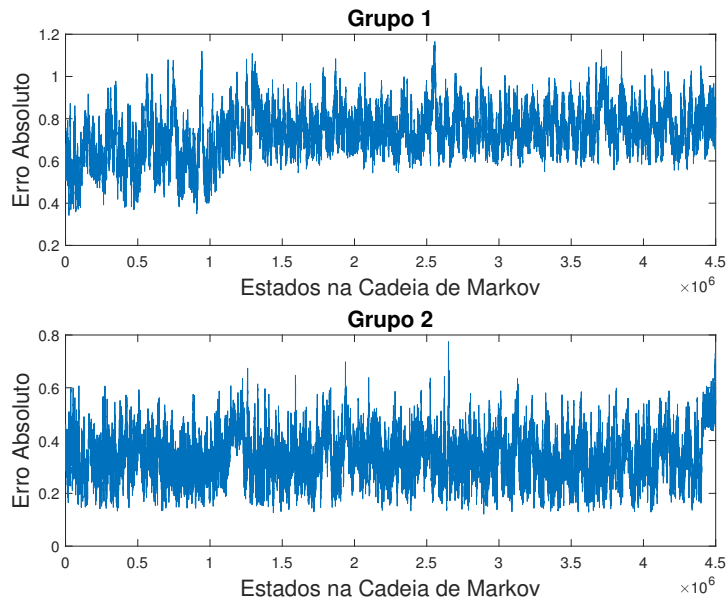


Figura 7.24: Problema Teste VI: cadeias de Markov dos erros absolutos para cada um dos grupos de energia.

Com isso, ao comparar os resultados obtidos neste problema teste com aqueles apresentados no Problema Teste I, é possível verificar que as estimativas fornecidas pelo método de Tikhonov iterado foram mais acuradas que as obtidas com o uso do algoritmo de Metropolis-Hastings, como pode ser verificado nos dados presentes nas Tabelas 7.2 e 7.10.

7.7.2 Problema Teste VII

Para este problema teste, são consideradas as mesmas configurações de meio físico e detectores apresentadas no Problema Teste II. Como anteriormente, o objetivo é estimar a fonte interna de partículas $\mathbf{S} = [S_1 \ S_2]^T$, cujas componentes são dadas por

$$S_1(z) = \begin{cases} 0,6, & \text{para } z \in [0, 2], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.93)$$

e

$$S_2(z) = \begin{cases} 0,3, & \text{para } z \in [5, 7], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.94)$$

para $z \in [0, 10]$.

Para a obtenção de medições ruidosas é utilizada a matriz de covariância $\mathbf{W} = (0,01 \times \max \mathbf{r}_E)^2 \mathbf{I}$, onde \mathbf{I} é a matriz identidade de ordem M , com a finalidade de gerar um vetor aleatório $\boldsymbol{\epsilon}$ para a Equação (7.31). Além disso, na Equação (7.78), é considerada a matriz $\mathbf{L} = \mathbf{I}$. Por fim, como no problema teste anterior, na aplicação do algoritmo de Metropolis-Hastings são considerados cinco milhões de estados, sendo os quinhentos mil primeiros estados descartados.

A Tabela 7.11 apresenta os valores de mínimo, média, máximo e desvio padrão para os erros absolutos de todos os estados considerados, na norma $L^2([0, 10])$, onde \hat{S}_1 e \hat{S}_2 representam, respectivamente, as projeções de S_1 e S_2 na base escolhida para as estimativas.

Tabela 7.11: Problema Teste VII: erros absolutos – mínimo, média, máximo e desvio padrão.

Erros	Mínimo	Média	Máximo	Desvio Padrão
$\ \tilde{S}_1 - \hat{S}_1\ $	0,0292	0,1124	0,2167	0,0323
$\ \tilde{S}_2 - \hat{S}_2\ $	0,0230	0,0612	0,1171	0,0132

Conforme pode ser verificado na Tabela 7.11, os erros absolutos no segundo grupo de energia foram menores que os encontrados no primeiro grupo de energia, em contraste com os resultados apresentados na Tabela 7.3. Na Figura 7.25, as linhas sólidas em vermelho representam os gráficos das aproximações \tilde{S}_1 e \tilde{S}_2 das componentes de \mathbf{S} , os asteriscos representam a média dos estados considerados para cada uma das componentes, e as linhas verticais em torno dos asteriscos representam os intervalos de 95% de credibilidade.

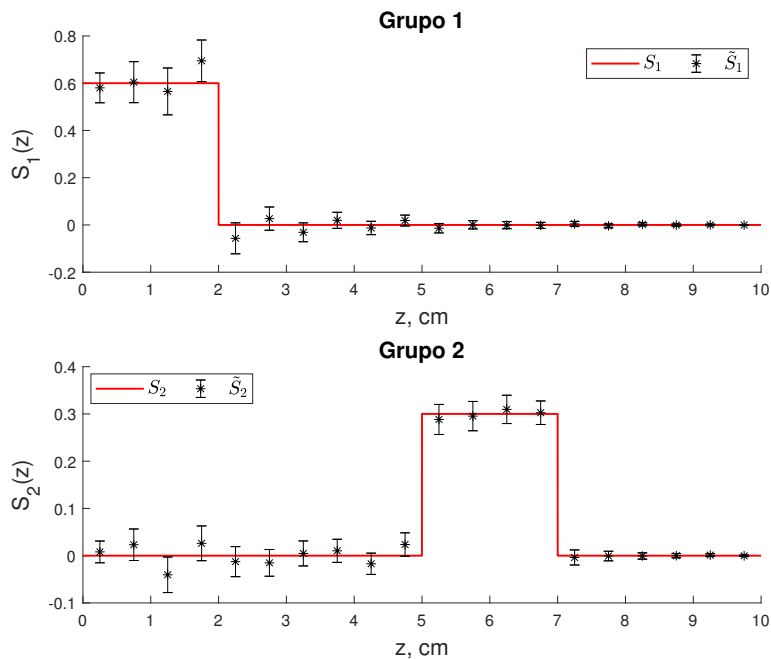


Figura 7.25: Problema Teste VII: gráficos das componentes exatas de \mathbf{S} (linhas sólidas em vermelho), das componentes médias das aproximações de $\tilde{\mathbf{S}}$ (asteriscos) e respectivos intervalos de 95% de credibilidade (linhas verticais).

Conforme a Figura 7.25 aponta, o método foi capaz de localizar as fontes de partículas presentes nos dois grupos de energia. Além disso, a magnitude da fonte foi bem aproximada em ambos os grupos de energia. A Figura 7.26, por sua vez, apresenta as cadeias de Markov dos erros absolutos para cada um dos grupos de energia.

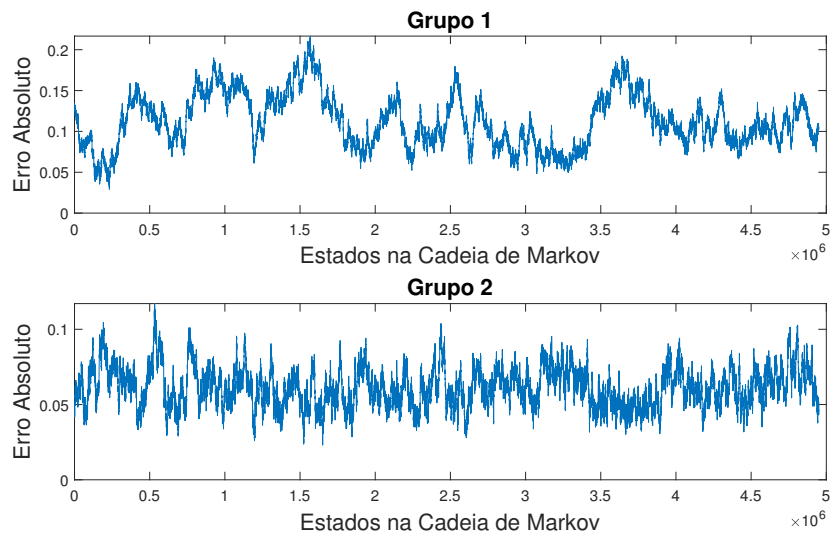


Figura 7.26: Problema Teste VII: cadeias de Markov dos erros absolutos para cada um dos grupos de energia.

Os gráficos presentes na Figura 7.26 apontam que as respectivas cadeias de Markov alcançaram estados estacionários. Ainda, vale destacar que dos cinco milhões de estados considerados, apenas cerca de 12,3% foram aceitos.

Por fim, as fontes originais de partículas de cada um dos grupos de energia foram melhor aproximadas no Problema Teste VII quando comparadas com as aproximações obtidas a partir do método de Tikhonov iterado apresentadas no Problema Teste II, conforme as Figuras 7.5 e 7.25 apontam e as Tabelas 7.3 e 7.11 corroboram.

7.7.3 Problema Teste VIII

Para este problema teste, são consideradas as mesmas configurações de meio físico e detectores apresentadas no Problema Teste III. Assim, o objetivo é a obtenção de estimativas para a fonte interna de partículas $\mathbf{S} = [S_1 \ S_2 \ S_3 \ S_4 \ S_5 \ S_6]^T$, cujas componentes são dadas por

$$S_1(z) = \begin{cases} 4, & \text{para } z \in [5, 6], \\ 6, & \text{para } z \in [27, 28], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.95)$$

$$S_2(z) = \begin{cases} 3, & \text{para } z \in [1, 3], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.96)$$

$$S_3(z) = \begin{cases} 6, & \text{para } z \in [15, 18], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.97)$$

$$S_4(z) = \begin{cases} 10, & \text{para } z \in [20, 22], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.98)$$

$$S_5(z) = \begin{cases} 1, & \text{para } z \in [29, 30], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.99)$$

e

$$S_6(z) = \begin{cases} 7, & \text{para } z \in [13, 14], \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.100)$$

para $z \in [0, 30]$.

Para este problema teste, o vetor aleatório ϵ de erros aditivos normalmente distribuídos para a Equação (7.31) utiliza como matriz de covariância $\mathbf{W} = (0,01 \times \max \mathbf{r}_E)^2 \mathbf{I}$, onde \mathbf{I} é a matriz identidade de ordem M . Além disso, para a verossimilhança, Equação (7.78), é considerada a matriz de regularização $\mathbf{L} = \mathbf{L}_1$ definida na Equação (7.55). Por fim, para a aplicação do algoritmo de Metropolis-Hastings, são considerados cinco milhões de estados, sendo os quinhentos mil primeiros estados descartados.

A Tabela 7.12 apresenta os valores de mínimo, média, máximo e desvio padrão para os erros absolutos de todos os estados considerados, na norma $L^2([0, 10])$, onde, para $g \in \{1, 2, 3, 4, 5, 6\}$, \hat{S}_g representa a projeção de S_g na base escolhida para as estimativas.

Tabela 7.12: Problema Teste VIII: erros absolutos – mínimo, média, máximo e desvio padrão.

Erros	Mínimo	Média	Máximo	Desvio Padrão
$\ \tilde{S}_1 - \hat{S}_1\ $	0,0012	0,0902	0,3340	0,0556
$\ \tilde{S}_2 - \hat{S}_2\ $	0,0130	0,1406	0,4377	0,0780
$\ \tilde{S}_3 - \hat{S}_3\ $	0,1281	0,8151	2,7756	0,4520
$\ \tilde{S}_4 - \hat{S}_4\ $	0,0962	0,5433	1,3204	0,2386
$\ \tilde{S}_5 - \hat{S}_5\ $	0,0346	0,1046	0,2595	0,0444
$\ \tilde{S}_6 - \hat{S}_6\ $	0,0013	0,0344	0,2206	0,0259

Na Figura 7.27, as linhas sólidas em vermelho representam as componentes da fonte exata \mathbf{S} , os asteriscos representam a média dos estados considerados para cada uma das componentes, e as linhas verticais em torno dos asteriscos representam os intervalos de 95% de credibilidade.

Conforme pode ser verificado na Figura 7.27, o método não apenas foi capaz de localizar as fontes de partículas presentes em todos os grupos de energia, como, também, aproximou adequadamente a magnitude das fonte. Tal fato é confirmado pelos erros apresentados na Tabela 7.12. A Figura 7.28, por sua vez, apresenta as cadeias de Markov dos erros absolutos para cada um dos grupos de energia.

Os gráficos presentes na Figura 7.28 apontam que as cadeias de Markov de cada grupo de energia alcançaram estados estacionários. Ainda, vale destacar que dos cinco milhões de estados considerados, apenas cerca de 7,36% foram aceitos.

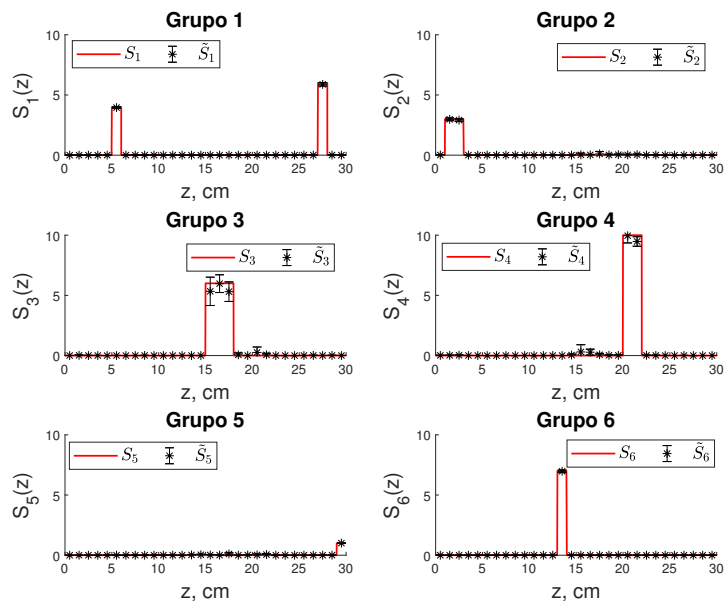


Figura 7.27: Problema Teste VIII: gráficos das componentes exatas de \mathbf{S} (linhas sólidas em vermelho), das componentes médias das aproximações de $\tilde{\mathbf{S}}$ (asteriscos) e respectivos intervalos de 95% de credibilidade (linhas verticais).

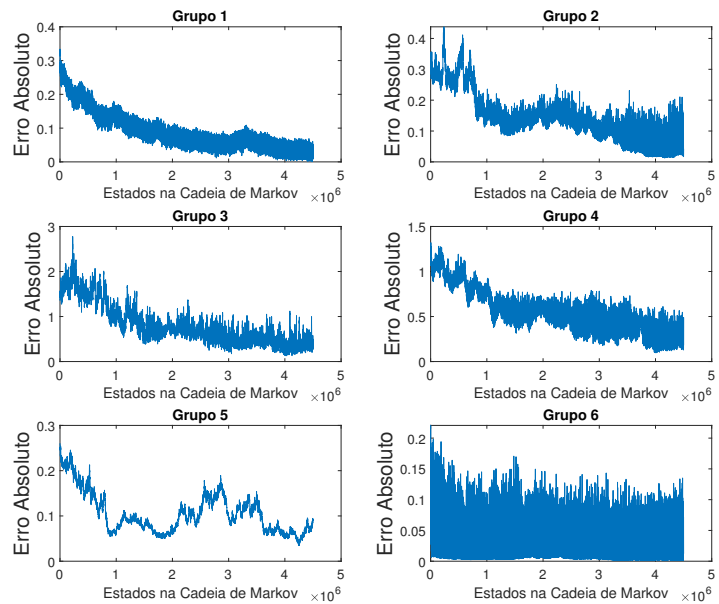


Figura 7.28: Problema Teste VIII: cadeias de Markov dos erros absolutos para cada um dos grupos de energia.

Por fim, ao comparar os dados obtidos neste problema teste com os resultados apresentados no Problema Teste III, onde as estimativas foram feitas a partir do método de Tikhonov iterado, é possível verificar que os erros absolutos foram, na maioria dos grupos de energia, cerca de uma ordem de magnitude inferiores, como sugerem as Tabelas 7.5 e 7.12.

7.8 Resultados Numéricos para a Estimativa de Fontes via Método de Metropolis-Hastings em Geometria Cartesiana Bidimensional

Nesta seção, a formulação desenvolvida é testada na estimativa de fontes de partículas em geometria cartesiana bidimensional.

7.8.1 Problema Teste IX

Para este problema teste são consideradas as mesmas configurações de meio físico e detectores apresentadas no Problema Teste IV [45]. O objetivo é, como nos demais problemas, estimar a fonte interna de partículas

$$S(x,y) = \begin{cases} 1, & \text{para } (x,y) \in D_3, \\ 0, & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (7.101)$$

conforme a Figura 7.14.

Para a obtenção de medições ruidosas é utilizada a matriz de covariância $\mathbf{W} = (0,01 \times \max \mathbf{r}_E)^2 \mathbf{I}$, onde \mathbf{I} é a matriz identidade de ordem M , com a finalidade de gerar um vetor aleatório $\boldsymbol{\epsilon}$ para a Equação (7.31). Além disso, na Equação (7.78), é considerada a matriz $\mathbf{L} = \mathbf{I}$. Ainda, para a aplicação do algoritmo de Metropolis-Hastings, são considerados vinte milhões de estados, dos quais são descartados os dois milhões primeiros.

Na Figura 7.29, os pontos vazados em vermelho representam a média das aproximações \tilde{S} de S , representada pelos pontos sólidos azuis. Além disso, as linhas verticais em torno dos pontos vermelhos representam os intervalos de 95% de credibilidade.

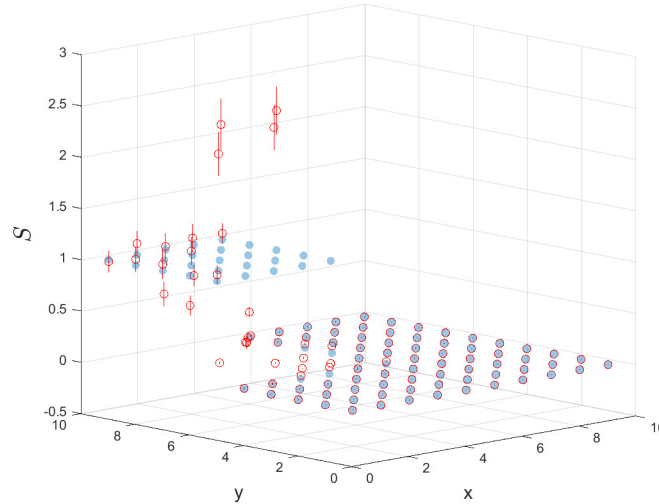


Figura 7.29: Problema Teste IX: gráfico da fonte exata de S (pontos sólidos em azul), das médias das aproximações de \tilde{S} (pontos vazados em vermelho) e respectivos intervalos de 95% de credibilidade (linhas verticais).

A Figura 7.29 aponta que o método foi capaz de determinar a posição da fonte de partículas, na região D_3 do domínio. Além disso, na maior parte da região D_3 do domínio, a magnitude da fonte foi corretamente estimada. A Figura 7.30 apresenta o gráfico da cadeia de Markov dos erros absolutos para os vinte milhões de estados.

Conforme pode ser visto na Figura 7.30, houve convergência da cadeia de Markov dos erros absolutos para uma distribuição estacionária. Ainda, a taxa de aceitação de novos estados para a cadeia foi baixa, cerca de 17,6%, mesmo com exaustivos testes dos parâmetros das distribuições *a priori*.

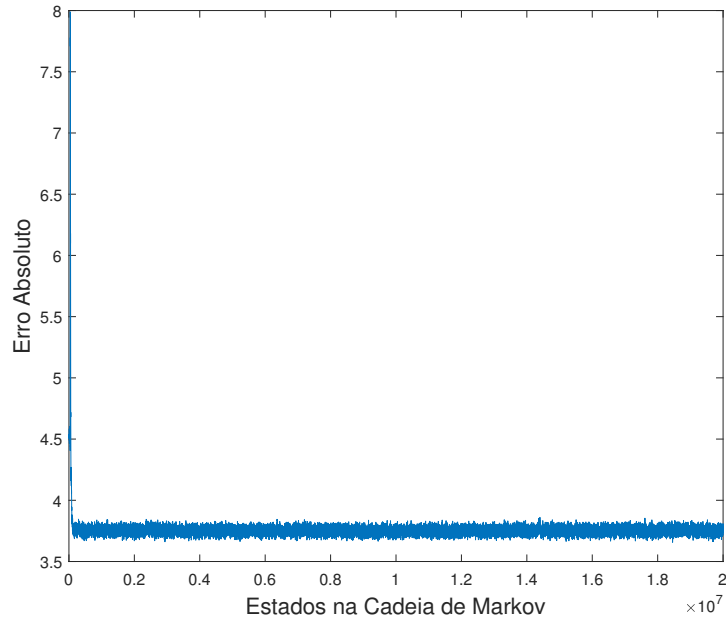


Figura 7.30: Problema Teste IX: cadeia de Markov dos erros absolutos.

Através da formulação fonte-detector [82, 105], apresentada no Capítulo 6, foi possível caracterizar o problema inverso da estimativa de fontes isotrópicas de partículas por meio da expressão

$$\mathbf{r}(\boldsymbol{\alpha}) = \mathbf{A}\boldsymbol{\alpha} + \mathbf{p}, \quad (7.102)$$

a qual relaciona os coeficientes, $\boldsymbol{\alpha}$, da expansão da fonte a ser estimada em uma dada base com as leituras fornecidas por uma série de detectores internos, \mathbf{r} , conforme as Equações (7.11) e (7.28). Com isso, através da aplicação da regularização de Tikhonov, foi possível deduzir a função objetivo apresentada na Equação (7.40), que representa uma versão penalizada da formulação de mínimos quadrados. Assim, estimativas para as fontes internas de partículas foram obtidas através do método de Tikhonov iterado [34]. Em geral, as estimativas foram capazes de localizar as fontes internas de partículas e, na maioria dos casos, aproximar razoavelmente bem a magnitude das fontes consideradas. Posteriormente, ao buscar uma descrição estatística do problema inverso, através da aplicação de técnicas de inferência Bayesiana [38, 71], foi possível descrever a solução do problema inverso de estimativa de fon-

tes através da distribuição posterior de probabilidade dada pela Equação (7.84), no contexto monoenergético, e pela Equação (7.85), para a aproximação multigrupos de energia. Com isso, estimativas para as fontes de partículas foram obtidas com a aplicação do algoritmo de Metropolis-Hastings à distribuição posterior de probabilidade. Nos problemas testes apresentados, foi possível obter a localização das fontes de partículas tanto no contexto unidimensional, quanto no bidimensional, bem como estimar, na maioria dos casos, a magnitude das fontes de partículas.

Ainda, ao comparar os resultados obtidos no Problema Teste I com os presentes no Problema Teste VI, situação na qual se deseja estimar a mesma fonte de partículas polinomial, foi possível verificar que o método de Tikhonov iterado (Problema Teste I) demonstrou ser capaz de obter melhores aproximações, no sentido de menor erro absoluto, para as fontes de partículas que aquelas obtidas por meio do algoritmo de Metropolis-Hastings (Problema Teste VI). Em contraste, na estimativa de fontes degraus, o algoritmo de Metropolis-Hastings forneceu estimativas mais acuradas nos problemas testes VII e VIII quando comparados com os resultados apresentados pelo método de Tikhonov iterado nos problemas testes II e III.

No caso do Problema Teste IX, em domínio bidimensional, o algoritmo de Metropolis-Hastings conseguiu determinar a localização da fonte de partículas, e, na maior parte do domínio, estimar a magnitude da fonte. Contudo, de acordo com a Figura 7.30, o erro absoluto médio das estimativas esteve em torno de 3,7, valor muito superior ao apresentado no Problema Teste IV, no qual o método de Tikhonov iterado obteve uma média de erros absolutos em torno de 0,4.

Por fim, é válido destacar a grande quantidade de variáveis aleatórias a serem estimadas nos problemas testes apresentados, fato que certamente contribuiu na dificuldade de obtenção de estimativas para as fontes. Além disso, os estudos do uso de técnicas de inferência Bayesiana na estimativa de fontes de partículas não está encerrado, podendo, ainda, ser consideradas outras distribuições *a priori* para

os parâmetros, como é o caso da rede de Markov de variação total, ou mesmo outras formas de percorrer as cadeias de Markov [71].

8 CONCLUSÕES

Neste trabalho, o método das ordenadas discretas analítico (ADO) foi aplicado com sucesso para a obtenção de soluções analíticas com respeito à variável espacial para o modelo em ordenadas discretas da equação adjunta de transporte em geometria cartesiana unidimensional. Foram considerados problemas em meios heterogêneos, com grau de espalhamento arbitrariamente alto e dependência energética descrita por meio da aproximação multigrupos de energia [100]. Para estes casos, o método ADO se mostrou capaz de resolver a equação adjunta em tempo computacional bastante reduzido (menos de um segundo em todos os casos considerados). Além disso, o caráter analítico do método foi utilizado para a dedução de fórmulas fechadas para as taxas de absorção de partículas, as quais foram capazes de fornecer significativos ganhos em tempo computacional quando comparadas com alternativas numéricas baseadas em regras de quadratura. De fato, o uso de abordagens numéricas para o cálculo das taxas de absorção se mostrou duas ordens de magnitude mais lenta em comparação com o uso das expressões analíticas, além de gerar resultados numéricos menos precisos. Em particular, a respeito da formulação fonte-detector, no Problema Teste V do Capítulo 6, onde foi considerado um problema com seis grupos de energia, o método ADO foi capaz de resolver a adjunta da equação de transporte em menos de um segundo com $N = 128$, em contraste com o método DD que necessitou de cerca de 10 horas para a obtenção de precisão de mesma ordem, além de requerer o armazenamento de passos intermediários na memória do computador. Tais características são relevantes na solução de problemas inversos, como os estudados neste trabalho, onde processos iterativos requerem a avaliação do fluxo adjunto repetidas vezes.

No contexto da equação adjunta de transporte em geometria cartesiana bidimensional, ao combinar o uso de abordagens nodais com escolhas adequadas de ordenamentos para as regras de quadratura empregadas na discretização da va-

riável angular, foi possível utilizar o formalismo unidimensional do método ADO para desenvolver o método ADO-Nodal para a adjunta da equação de transporte [22]. Nesse contexto, foram obtidas soluções analíticas com respeito às variáveis espaciais para os fluxos angulares adjuntos médios em domínios retangulares compostos por materiais heterogêneos e meios isotrópicos. Ademais, assim como no caso unidimensional, as soluções analíticas foram, também, utilizadas para a dedução de expressões fechadas para as taxas de absorção, fato que permitiu expressiva redução no tempo computacional necessário para a obtenção das leituras de detectores internos de partículas, em contraste com o uso de abordagens baseadas em regras de quadraturas para as variáveis espaciais. É preciso destacar que o método ADO-Nodal para a adjunta da equação de transporte requer a resolução de um sistema linear cuja ordem pode rapidamente ficar bastante elevada, dependendo do número de regiões e de direções consideradas. Por outro lado, análises recentes sobre a convergência espacial do método ADO-Nodal clássico apontam a capacidade do método de atingir resultados similares aos de outros métodos disponíveis na literatura, utilizando, contudo, malhas espaciais mais grossas [20], fato este que balanceia a exigência de resolução de grandes sistemas lineares com o refinamento das malhas espaciais. Adicionalmente, o emprego de técnicas iterativa e/ou paralelas [46] pode permitir a utilização de malhas mais refinadas para a discretização espacial, embora não tenham sido aqui utilizadas. É preciso destacar que a formulação ADO-Nodal é livre de processos iterativos e não faz uso de varreduras espaciais, características que frequentemente demandam elevado tempo computacional, além da necessidade de armazenamento de passos intermediários na memória, como é o caso dos métodos *Diamond Difference* e SGF. Por fim, fora do contexto deste trabalho, a formulação ADO-Nodal sugere possíveis extensões para a equação de transporte em geometria cartesiana bidimensional dependente da energia, bem como, em estudos recentes, foi aplicada em meios com espalhamento anisotrópico, fato que pode permitir uma possível extensão anisotrópica para o método aqui desenvolvido [22].

A abordagem fonte-detector, apresentada no Capítulo 6, permitiu a direta comparação das taxas de absorção calculadas por meio da utilização da adjunta da equação de transporte com as taxas obtidas através da própria equação de transporte. Isso tornou possível que o método ADO clássico para a equação de transporte [115] fosse utilizado para verificar a acurácia do método ADO desenvolvido para a adjunta da equação de transporte dependente da energia em geometria cartesiana unidimensional. A mesma estratégia também permitiu o uso do método ADO-Nodal [19] para verificar a formulação aqui desenvolvida para o problema bidimensional. De maneira geral, o método se mostrou bastante preciso, apresentando discrepâncias da ordem de 10^{-16} para o caso unidimensional e 10^{-12} para o caso bidimensional. De resto, o tratamento para os termos de fronteira não homogêneos presentes nas condições de contorno da equação de transporte não é comum na literatura, permitindo a simulação de modelos que contam com fluxos incidentes prescritos nas fronteiras do domínio.

No Capítulo 7, foi apresentada a aplicação dos métodos ADO e ADO-Nodal para a adjunta da equação de transporte na estimativa de fontes internas de partículas. Para isso, foi necessária a definição da matriz \mathbf{A} , que relaciona os coeficientes da expansão da fonte de partículas em uma dada base com as leituras de uma série de detectores de partículas internos ao domínio. Tal matriz requer, para a sua obtenção, não apenas que a adjunta da equação de transporte seja resolvida diversas vezes, mas também exige várias avaliações das taxas de absorção, Equação (6.8). Com isso, em especial no contexto dos problema em geometria cartesiana bidimensional, o cálculo da matriz \mathbf{A} necessita de grande tempo computacional, e é tratado como uma etapa de pré-processamento, uma vez que a matriz \mathbf{A} não é alterada enquanto o meio físico e os detectores permanecerem inalterados. Dessa forma, para a realização dos testes, foram considerados problemas unidimensionais com dois ou seis grupos de energia, com fontes polinomiais ou degraus, bem como problemas bidimensionais monoenergéticos com fontes degraus. Por sua vez, para a resolução do problema de estimativa de fontes, foram consideradas duas abordagens,

a regularização de Tikhonov, implementada de maneira iterada, e o uso de inferência Bayesiana, através do algoritmo de Metropolis-Hastings. Ambas as abordagens se mostraram capazes de determinar a localização das fontes de partículas no interior dos domínios dos problemas considerados, uma característica de grande importância para as aplicações em segurança nuclear [85, 88, 120]. Além disso, na maioria dos testes, as abordagens consideradas foram capazes de fornecer boas estimativas para a magnitude das fontes. Porém, os resultados foram mistos no sentido da escolha do método mais adequado, uma vez que o método de Tikhonov iterado se mostrou superior ao algoritmo de Metropolis-Hastings nos problemas com fontes polinomiais e nos problemas bidimensionais, comportamento este que foi oposto nos demais problemas teste, em particular no problema unidimensional com seis grupos de energia. Por fim, o uso de inferência Bayesiana na resolução de problemas inversos de estimativas de fontes de partículas carece de estudos adicionais, como funções base diferentes das definidas nas Equações (7.3) e (7.19), a fim de trazer mais informações sobre a fonte que se deseja estimar, bem como o uso de distintas matrizes de regularização, assim como novas distribuições para as priores.

Referências Bibliográficas

- [1] Addoum, A., Farges, O., e Asllanaj, F. Optical properties reconstruction using the adjoint method based on the radiative transfer equation. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 204:179–189, 2018.
- [2] Anderson, E., Bai, Z., Bischof, C., Blackford, S., Dongarra, J., Du Croz, J., Greenbaum, A., Hammarling, S., McKenney, A., e Sorensen, D. *LAPACK Users' guide*, volume 9. Siam, 1999.
- [3] Anikonov, D. S., Kovtanyuk, A. E., e Prokhorov, I. V. *Transport Equation and Tomography*. VSP, AH Zeist, The Netherlands, 2002.
- [4] Arridge, S. R. Optical tomography in medical imaging. *Inverse Problems*, 15: R41–R93, 1998.
- [5] Asllanaj, F., Addoum, A., e Roche, J. R. Fluorescence molecular imaging based on the adjoint radiative transport equation. *IOPScience Inverse Problems*, 34(7):1–28, 2018.
- [6] Aster, R. C., Borchers, B., e Thurber, C. H. *Parameter Estimation and Inverse Problems*. Elsevier, 2013.
- [7] Azmy, Y. Y. The weighted diamond-difference form of nodal transport methods. *Nuclear Science and Engineering*, 98(1):29–40, 1988.
- [8] Azmy, Y. Y. Arbitrarily high order characteristic methods for solving the neutron transport equation. *Annals of Nuclear Energy*, 19(10–12):593–606, 1992.
- [9] Azmy, Y. Y. e Sartori, E. *Nuclear Computational Science: A Century in Review*. Springer, 2010.
- [10] Badruzzaman, A. An efficient algorithm for nodal-transport solutions in multidimensional geometry. *Nuclear Science and Engineering*, 89:281–290, 1985.

- [11] Badruzzaman, A. Nodal methods in transport theory. *Advances in Nuclear Science and Technology*, 21:293–331, 1990.
- [12] Badruzzaman, A. Computational methods in nuclear geophysics. *Progress in Nuclear Energy*, 25(2–3):265–290, 1991.
- [13] Barichello, L. B. Explicit formulations for radiative transfer problems. In Orlande, R. B. H., Fudym, O., Maillet, D., e Cotta, R. M., editors, *Thermal Measurements and Inverse Techniques*, pages 541–562, Boca Raton (FL), 2011. CRC Press.
- [14] Barichello, L. B. e Siewert, C. A discrete-ordinates solution for a non-grey model with complete frequency redistribution. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 62(6):665–675, 1999.
- [15] Barichello, L. B. e Siewert, C. A discrete-ordinates solution for a polarization model with complete frequency redistribution. *The Astrophysical Journal*, 513(1):370–382, 1999.
- [16] Barichello, L. B. e Siewert, C. E. The searchlight problem for radiative transfer in a finite slab. *Journal of Computational Physics*, 157(2):707–726, 2000.
- [17] Barichello, L. B. e Vilhena, M. T. A general analytical approach to the one group, one-dimensional transport equation. *Kerntecnik*, 58(3):182–184, 1993.
- [18] Barichello, L. B., Camargo, M., Rodrigues, P., e Siewert, C. E. Unified solutions to classical flow problems based on the bgk model. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik ZAMP*, 52(3):517–534, 2001.
- [19] Barichello, L. B., Cabrera, L. C., e Prolo Filho, J. F. An analytical approach for a nodal scheme of two-dimensional neutron transport problems. *Annals of Nuclear Energy*, 38(6):1310–1317, 2011.

- [20] Barichello, L. B., Tres, A., Picoloto, C. B., e Azmy, Y. Y. Recent studies of the asymptotic convergence of the spatial discretization for two-dimensional discrete ordinates solutions. *Journal of Computational and Theoretical Transport*, 45(4):299–313, 2016.
- [21] Barichello, L. B., Picoloto, C. B., e da Cunha, R. D. The ado-nodal method for solving two-dimensional discrete ordinates transport problems. *Annals of Nuclear Energy*, 108:376–385, 2017.
- [22] Barichello, L. B., Pazinato, C. B., e Rui, K. An analytical discrete ordinates nodal solution to the two-dimensional adjoint transport problem. *Annals of Nuclear Energy*, 135:106959, 2020.
- [23] Barros, R. C. e Larsen, E. W. A numerical method for one-group slab-geometry discrete ordinates problems with no spatial truncation error. *Nuclear Science and Engineering*, 104(3):199–208, 1990.
- [24] Barros, R. C. e Larsen, E. W. A numerical method for multigroup slab-geometry discrete ordinates problems with no spatial truncation error. *Transport Theory and Statistical Physics*, 20(5):441–462, 1991.
- [25] Barros, R. C. e Larsen, E. W. A spectral nodal method for one-group x, y-geometry discrete ordinates problems. *Nuclear Science and Engineering*, 111(1):34–45, 1992.
- [26] Barros, R. C. e Silva, O. P. Private communication. 2017.
- [27] Basdevant, J. L., Rich, J., e Spiro, M. *Fundamentals In Nuclear Physics: From Nuclear Structure to Cosmology*. Springer, New York (NY), 2004.
- [28] Basu, A. K. *Introduction to stochastic processes*. Alpha Science Int'l Ltd., 2003.
- [29] Beck, J. V. e Arnold, K. J. *Parameter Estimation in Engineering and Science*. John Wiley & Sons, New York (NY), 1977.

- [30] Bell, G. I. e Glasstone, S. *Nuclear Reactor Theory*. Van Nostrand Reinhold Company, New York, New York (NY), 1970.
- [31] Bledsoe, K. C. e Favorite, J. A. Using the levenberg-marquardt method for the solution of inverse transport problems with scattering. *American Nuclear Society, Proceedings of the Joint International Topical Meeting on Mathematics & Computations and Supercomputing in Nuclear Applications (M & C + SNA), April 15–19, Monterey, California, USA* pages 1898–1912, 2007.
- [32] Bledsoe, K. C., Favorite, J. A., e Aldemir, T. Using the levenberg-marquardt method for solutions of inverse transport problems in one- and two-dimensional geometries. *Nuclear Technology*, 176(1):106–126, 2011.
- [33] Boltzmann, L. Weitere studien über das wärmeleichgewicht unter gas molekülen. *Sitzungsberichte Akademie der Wissenschaften*, 60:275376, 1872.
- [34] Buccini, A., Donatelli, M., e Reichel, L. Iterated tikhonov regularization with a general penalty term. *Numerical Linear Algebra with Applications*, 24(4): e2089, 2017.
- [35] Burden, R. L. e Faires, J. D. *Numerical Analysis*. CENGAGE, 2010.
- [36] Camminady, T., Frank, M., Küpper, K., e Kusch, J. Ray effect mitigation for the discrete ordinates method through quadrature rotation. *Journal of Computational Physics*, 382:105–123, 2019.
- [37] Case, K. M. e Zweifel, P. F. *Linear Transport Theory*. Addison-Wesley Publishing Company, 1967.
- [38] Casella, G. e Berger, R. L. *Statistical inference*, volume 2. Duxbury Pacific Grove, CA, 2002.
- [39] Cercignani, C. *The Boltzmann Equation and Its Applications*. Springer-Verlag, New York (NY), 1988.

- [40] Chandrasekhar, S. On the radiative equilibrium of a stellar atmosphere. ii. *Astrophysical Journal*, 100:76–86, 1944.
- [41] Chandrasekhar, S. *Radiative Transfer*. Dover Publications, New York (NY), 1960.
- [42] Courant, R. e Hilbert, D. *Methods of Mathematical Physics: Partial Differential Equations*. John Wiley & Sons, 2008.
- [43] Courant, R. e McShane, J. E. Differential and integral calculus, vol. ii. 1992.
- [44] Cromianski, S. R., Rui, K., e Barichello, L. B. A study on boundary fluxes approximation in explicit nodal formulations for the solution of the two-dimensional neutron transport equation. *Progress in Nuclear Energy*, 110: 354–363, 2019.
- [45] Curbelo, J. P., da Silva, O. P., e Barros, R. C. Application of an adjoint technique to one-speed x,y-geometry source-detector transport problems in the discrete ordinates formulation using a spectral nodal method. *Progress in Nuclear Energy*, 108:445–453, 2018.
- [46] da Cunha, R. D., Tres, A., e Barichello, L. B. A study on the parallel, iterative solution of systems of linear equations appearing on analytical nodal schemes for two-dimensional cartesian geometry discrete ordinates problems. In *Joint International Conference on Mathematics and Computation (M&C), Nashville, Tennessee, pages CD-ROM*, volume 56, pages 80–89, 2015.
- [47] Densmore, J. D. e Larsen, E. W. Variational variance reduction for particle transport eigenvalue calculations using monte carlo adjoint simulation. *Journal of Computational Physics*, 192:387–405, 2003.
- [48] Dorn, O. Scattering and absorption transport sensitivity functions for optical tomography. *Optics Express*, 7(13):492–506, 2000.

- [49] Duderstadt, J. J. e Hamilton, L. J. *Nuclear Reactor Analysis*. Wiley, 1976.
- [50] Duderstadt, J. J. e Martin, W. R. *Transport Theory*. Wiley, New York (NY), 1979.
- [51] Eddington, A. *The internal constitution of the stars*. Dover, 1926.
- [52] Edgar, C. A. An runge-kutta-fehlberg method for time-dependent discrete ordinate transport. *Georgia Institute of Technology (Tese de Doutorado)*, 2015.
- [53] Engl, H. W., Hanke, M., e Neubauer, A. *Regularization of inverse problems*, volume 375. Springer Science & Business Media, 1996.
- [54] Favorite, J. A. e Sanchez, R. An inverse method for radiation transport. *Radiation Protection Dosimetry*, 116:482–485, 2005.
- [55] Gao, H. e Zhao, H. Multilevel bioluminescence tomography based on radiative transfer equation part 1: l1 regularization. *Optics Express*, 18(3):1854–1871, 2010.
- [56] Garcia, R. D. M., Siewert, C. E., e Thomas Jr., J. R. A computationally viable version of the pn method for spheres. *Nuclear Science and Engineering*, 186(2):103–119, 2017.
- [57] Gentile, N. A. e Yee, B. C. Iterative implicit monte carlo. *Journal of Computational and Theoretical Transport*, 45(1–2):71–98, 2015.
- [58] Hadamard, J. *Lectures on Cauchy’s problem in linear partial differential equations*. Courier Corporation, 2014.
- [59] Haghghat, A. *Computed Radiation Imaging*. CRC Press, 2014.
- [60] Haghghat, A. *Monte Carlo Methods for Particle Transport*. Crc Press, 2015.
- [61] Haltmeier, M., Neumann, L., e Rabanser, S. Single-stage reconstruction algorithm for quantitative photoacoustic tomography. *Inverse Problems*, 31(6): 1–24, 2015.

- [62] Hansen, P. C. *Rank-deficient and discrete ill-posed problems: numerical aspects of linear inversion*, volume 4. Siam, 2005.
- [63] Hauser, E. B., Pazos, R. P., Villhena, M. T., e Barros, R. C. Solution and study of nodal neutron transport equation applying the LTS N-DiagExp method. 2002.
- [64] Hébert, A. High order diamond differencing schemes. *Annals of Nuclear Energy*, 33(17–18):1479–1488, 2006.
- [65] Hoffman, A. J. e Lee, J. C. A time-dependent neutron transport method of characteristics formulation with time derivative propagation. *Journal of Computational Physics*, 307:696–714, 2016.
- [66] Huang, Z., Zhou, H., e Hsu, P. Improved discrete ordinates method for ray effects mitigation. *Journal of Heat Transfer*, 133, 2011.
- [67] Hussein, E. M. A. *Computed Radiation Imaging*. Elsevier, 2011.
- [68] Hykes, J. M. e Azmy, Y. Y. Radiation source reconstruction with known geometry and materials using the adjoint. *Proceedings of the International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C), May 8–12, Rio de Janeiro, Brazil* pages 1–15, 2011.
- [69] Hykes, J. M. e Azmy, Y. Y. Radiation source mapping with bayesian inverse methods. *Nuclear Science and Engineering*, pages 364–380, 2015.
- [70] Jeffers, R. S., Kophazi, J., Eaton, M. D., Fevotte, F., Hulsemann, F., e Ragusa, J. Goal-based h-adaptivity of the 1-d diamond difference discrete ordinate method. *Journal of Computational Physics*, 335(1):179–200, 2017.
- [71] Kaipio, J. e Somersalo, E. *Statistical and Computational Inverse Problems*. Springer, New York (NY), 2005.

- [72] Kauati, A. T., Silva Neto, A. J., e Roberty, N. C. A source-detector methodology for the construction and solution of the one-dimensional inverse transport equation. *Inverse Problems in Engineering*, 9(1):45–66, 2001.
- [73] Kim, T. K. e Lee, H. Effect of anisotropic scattering on radiative heat transfer in two-dimensional rectangular enclosures. *International Journal of Heat and Mass Transfer*, 31(8):1711–1721, 1988.
- [74] Kirsch, A. *An introduction to the mathematical theory of inverse problems*, volume 120. Springer Science & Business Media, 2011.
- [75] Klose, A. D. e Heilscher, A. H. Optical tomography using the time- independent equation of radiative transfer - part 2: inverse model. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 72:715–732, 2002.
- [76] Klose, A. D. e Heilscher, A. H. Optical tomography with the equation of radiative transfer. *International Journal of Numerical Methods for Heat & Fluid Flow*, 18:443–464, 2007.
- [77] Klose, A. D., Netz, U., Beuthan, J., e Heilscher, A. H. Optical tomography using the time- independent equation of radiative transfer - part 1: forward model. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 72:691–713, 2002.
- [78] Knackfuss, R. F. e Barichello, L. B. On the temperature-jump problem in rarefied gas dynamics: the effect of the cercignani–lampis boundary condition. *SIAM Journal on Applied Mathematics*, 66(6):2149–2186, 2006.
- [79] Konzen, P. H. A., Guidi, L. F., e Richter, T. Quasi-random discrete ordinates method for neutron transport problems. *Annals of Nuclear Energy*, 133:275–282, 2019.
- [80] Kremer, G. M. *An Introduction to the Boltzmann Equation and Transport Processes in Gases*. Springer-Verlag, New York (NY), 2010.

- [81] Lamarsh, J. R. e Baratta, A. J. *Introduction to Nuclear Engineering*. Prentice Hall, 3rd edition, 2001.
- [82] Lewis, E. E. e Miller, W. F. *Computational Methods of Neutron Transport*. John Wiley & Sons, New York (NY), 1984.
- [83] Mansur, R. S., Silva, O. P., Moura, C. A., e Barros, R. C. A response matrix method for one-speed slab-geometry discrete ordinates adjoint calculations in source-detector problems. *Journal of Computational and Theoretical Transport*, 45(6):500–507, 2016.
- [84] Martin, W. R. e Duderstadt, J. J. Finite element solutions of the neutron transport equation with applications to strong heterogeneities. *Nuclear Science and Engineering*, 62(3):371–390, 1977.
- [85] McLaughlin, T. D., Sjoden, G. E., e Manalo, K. L. Detector placement optimization for cargo containers using deterministic adjoint transport examination for snm detection. *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering (M&C 2011)*, 5: 8–12, 2011.
- [86] Mika, J. R. Neutron transport with anisotropic scattering. *Nuclear Science and Engineering*, 11:415–427, 1961.
- [87] Militão, D. S., Alves Filho, H., e Barros, R. C. A numerical method for monoenergetic slab-geometry fixed-source adjoint transport problems in the discrete ordinates formulation with no spatial truncation error. *Int. J. Nuclear Energy Science and Technology*, 7:151–165, 2012.
- [88] Miller, K. A. e Charlton, W. S. An inverse transport approach to radiation source location for border security. *Proceedings of the 29th Annual Meeting of the European Safeguards Research and Development Association, May 22–24, Aix-en-Provence, France 2007*.

- [89] Modest, M. F. *Radiative Heat Transfer*. Academic Press, 2013.
- [90] Mohamad, A. A. *Lattice Boltzmann Method*. Springer-Verlag, 2011.
- [91] Morel, J. E., Wareing, T. A., Lowrie, R. B., e Parsons, D. K. Analysis of ray-effect mitigation techniques. *Nuclear Science and Engineering*, 144(1):1–22, 2003.
- [92] Moura Neto, F. D. e Silva Neto, A. J. *An Introduction to Inverse Problems with Applications*. Springer, 2013.
- [93] Norton, S. J. A general nonlinear inverse transport algorithm using forward and adjoint flux computations. *IEEE Transactions on Nuclear Science*, 44(2): 153–162, 1997.
- [94] O’Malley, B., Kópházi, J., Eaton, M. D., Badalassi, V., Warner, P., e Copes-take, A. Discontinuous galerkin spatial discretisation of the neutron transport equation with pyramid finite elements and a discrete ordinate (S_N) angular approximation. *Annals of Nuclear Energy*, 113:526–535, 2018.
- [95] Orlande, H. R. B. The use of techniques within the bayesian framework of sta-tistics for the solution of inverse problems. *Metti 6 Advanced School: Thermal Measurements and Inverse Techniques*, 2015.
- [96] Özisik, M. N. e Orlande, H. R. B. *Inverse Heat Transfer*. Taylor & Francis, 2000.
- [97] Pazinato, C. B. Formulação ADO para o problema adjunto de transporte unidimensional e aplicação em um problema inverso de reconstrução de fonte. *Dissertação de Mestrado. Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre (RS)*, 2015.
- [98] Pazinato, C. B. e Barichello, L. B. On the use of analytical techniques for source reconstruction problems. *International Conference on Mathematics &*

Computational Methods Applied to Nuclear Science & Engineering, April 16–20, Jeju, Korea 2017.

- [99] Pazinato, C. B. e Barichello, L. B. An analytical discrete ordinates solution for multigroup adjoint transport problems. *25th International Conference on Transport Theory, Monterey, California, USA, 2017*.
- [100] Pazinato, C. B. e Barichello, L. B. Energy dependent source reconstructions via explicit formulations of the adjoint particles flux. *Journal of Computational and Theoretical Transport*, 47(1-3):58–83, 2018.
- [101] Pazinato, C. B. e Barichello, L. B. On the use of the adjoint operator for source reconstruction in particle transport problems. *Inverse Problems in Science and Engineering*, 27(4):513–539, 2019.
- [102] Pazinato, C. B., Cromianski, S. R., Barros, R. C., e Barichello, L. B. An analytical discrete ordinates solution for one-speed slab geometry adjoint transport problems with isotropic scattering. *ANS MC2015 - Joint International Conference on Mathematics and Computation (M&C), Supercomputing in Nuclear Applications (SNA) and the Monte Carlo (MC) Method*, 2015.
- [103] Pazinato, C. B., Barros, R. C., e Barichello, L. B. Analytical adjoint discrete ordinates formulation for monoenergetic slab-geometry source-detector calculations. *International Journal of Nuclear Energy Science and Technology*, 10(2):107–19, 2016.
- [104] Picoloto, C. B., Tres, A., Cunha, R. D., e Barichello, L. B. Closed-form solutions for nodal formulations of two dimensional transport problems in heterogeneous media. *Annals of Nuclear Energy*, 86:65–71, 2015.
- [105] Prinja, A. K. e Larsen, E. W. *General Principles of Neutron Transport, Chapter 5 in Handbook of Nuclear Engineering, Vol. 1: Nuclear Engineering Fundamentals*. Springer, New York (NY), 2010.

- [106] Prolo Filho, J. F. e Barichello, L. B. General expressions for auxiliary equations of a nodal formulation for two-dimensional transport calculations. *Journal of Computational and Theoretical Transport*, 43(1-7):352–373, 2014.
- [107] Ramey, K. M. e Petrovic, B. Monte carlo modeling and simulations of ahtr fuel assembly to support v&v of fhr core physics methods. *Annals of Nuclear Energy*, 118:272–282, 2018.
- [108] Reeves, R. *A force of nature: The frontier genius of Ernest Rutherford*. WW Norton & Company, 2008.
- [109] Robert, C. e Casella, G. *Monte Carlo statistical methods*. Springer Science & Business Media, 2013.
- [110] Scheben, F. Iterative methods for criticality computations in neutron transport theory. *University of Bath (Tese de Doutorado)*, 2011.
- [111] Scherer, C. S., Prolo Filho, J. F., e Barichello, L. B. An analytical approach to the unified solution of kinetic equations in rarefied gas dynamics.i. flow problems. *Zeitschrift für Angewandte Mathematik und Physik*, 60(1):70–115, 2009.
- [112] Scherer, C. e Barichello, L. An analytical approach to the unified solution of kinetic equations in rarefied gas dynamics. iii. evaporation and condensation problems. *Zeitschrift für angewandte Mathematik und Physik*, 61(1):95–117, 2010.
- [113] Seeger, K. *Semiconductor Physics*. Springer, New York (NY), 2004.
- [114] Siewert, C. E. A spherical-harmonics method for multi-group or non-gray radiation transport. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 49(2):95–106, 1993.

- [115] Siewert, C. E. A discrete-ordinates solution for multigroup transport theory with upscattering. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 64:255–273, 2000.
- [116] Siewert, C. E. A discrete-ordinates solution for radiative-transfer models that include polarization effects. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 64:227–254, 2000.
- [117] Somasundaram, E. e Palmer, T. Application of variational variance reduction for source-detector problems in nuclear non-proliferation. *Journal of Computational and Theoretical Transport*, 45(7):554–577, 2016.
- [118] Strobl, M., Manke, I., Kardjilov, N., Hilger, A., Dawson, M., e Banhart, J. Advances in neutron radiography and tomography. *J. Phys. D: Appl. Phys.*, 42, 2009.
- [119] Sugaya, S., Endo, T., e Yamamoto, A. Inverse estimation of unknown radioactive source using detection probability and adjoint calculation. *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering*, 2017.
- [120] Sugaya, S., Endo, T., e Yamamoto, A. Inverse estimation methods of unknown radioactive source for fuel debris search. *Annals of Nuclear Energy*, 124:49–57, 2019.
- [121] Tarantola, A. *Inverse Problem Theory and Methods for Model Parameter Estimation*. Other Titles in Applied Mathematics. Society for Industrial and Applied Mathematics, 2005. ISBN 9780898717921.
- [122] Tres, A., Picoloto, C. B., Prolo Filho, J. F., da Cunha, R. D., e Barichello, L. B. Explicit formulation of a nodal transport method for discrete ordinates calculations in two-dimensional fixed-source problems. *Kerntechnik*, 79(2): 155–162, 2014.

- [123] Vidal, A. Development of a finite element method for neutron transport equation approximations. *Universitat Poliècnica De València (Tese de Doutorado)*, 2018.
- [124] Vilhena, M. T. e Barichello, L. B. A new analytical approach to solve the neutron transport equation. *Kernntechnik (1987)*, 56(5):334–336, 1991.
- [125] Vilhena, M. T. e Barichello, L. B. An analytical solution for the multigroup slab geometry discrete ordinates problem. *Journal of Transport Theory and Statistical Physics*, 24(9):1337–1352, 1994.
- [126] Vitali, V., Dulla, S., e Ravetto, P. Comparison of monte carlo methods for adjoint neutron transport. *Eur. Phys. J. Plus*, 133:1–19, 2018.
- [127] Vogel, C. R. *Computational Methods for Inverse Problems*. SIAM, 2002.
- [128] Volegov, P., Danly, C. R., Fittinghoff, D. N., Grim, G. P., Guler, N., Izumi, N., Ma, T., Merrill, F. E., Warrick, A. L., Wilde, C. H., e Wilson, D. C. Neutron source reconstruction from pinhole imaging at national ignition facility. *Review of Scientific Instruments*, 85(1):023508–1–023508–12, 2014.
- [129] Wang, Y. e Ragusa, J. C. A high-order discontinuous galerkin method for the S_N transport equations on 2D unstructured triangular meshes. *Annals of Nuclear Energy*, 36(7):931–939, 2009.
- [130] Warsa, J. S. e Prinja, A. K. Bilinear-discontinuous numerical solution of the time dependent transport equation in slab geometry. *Annals of Nuclear Energy*, 26(3):195–215, 1999.
- [131] Wick, G. C. Über ebene difusionsprobleme. *Zs. f. Phys.*, 221(11–12):702–718, 1943.
- [132] Wollaber, A. B. Four decades of implicit monte carlo. *Journal of Computational and Theoretical Transport*, 45(1–2):1–70, 2016.