

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

**SOLUÇÃO LTS_N DA EQUAÇÃO ADJUNTA DE TRANSPORTE DE
NÊUTRONS COM FONTE ARBITRÁRIA PARA ELEVADA ORDEM DE
QUADRATURA NUMA PLACA HOMOGÊNEA**

por

Glênio Aguiar Gonçalves

Dissertação para obtenção do Título de
Mestre em Engenharia

Porto Alegre, Fevereiro de 1999

**SOLUÇÃO LTS_N DA EQUAÇÃO ADJUNTA DE TRANSPORTE DE
NÊUTRONS COM FONTE ARBITRÁRIA PARA ELEVADA ORDEM DE
QUADRATURA NUMA PLACA HOMOGÊNEA**

por

Glênio Aguiar Gonçalves

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

Mestre em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte - Bioengenharia

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

Co-Orientador: Prof. Dr. Gervásio Annes Degrazzia

Aprovada por:

Prof. PhD. Cláudio de Oliveira Graça

Prof. Dr. Horácio Dotori

Prof. Dr. Volnei Borges

Prof. Dr. Sergio Viçosa Möller
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 08 de Fevereiro de 1999

AGRADECIMENTOS

Agradeço ao amigo e professor orientador Marco Tullio M. B. de Vilhena pela oportunidade de realização deste trabalho e pela forma tranqüila e segura de sua orientação.

Aos colegas Sérgio Wortmann, José Vanderlei P. de Oliveira, Gilberto Orengo de Oliveira e sua esposa Virgínia Cielo Rech cujas amizades enriqueceram-me tanto na formação pessoal quanto acadêmica e aos demais colegas que de forma direta ou indireta contribuíram na execução deste trabalho.

À CAPES pelo suporte financeiro e ao PROMEC representado em seu corpo de funcionários e docentes.

Especialmente à generosidade da minha família cuja distância física não a impediu de estar sempre comigo.

RESUMO

SOLUÇÃO LTS_N DA EQUAÇÃO ADJUNTA DE TRANSPORTE DE NÊUTRONS COM FONTE ARBITRÁRIA PARA ELEVADA ORDEM DE QUADRATURA NUMA PLACA HOMOGÊNEA

O objetivo deste trabalho consiste em estender o método LTS_N à solução do problema adjunto de transporte de nêutrons. A solução adjunta é interpretada fisicamente como uma função importância que designa a capacidade de contribuição de cada cela do espaço de fase para um funcional resposta. A derivação desta interpretação, através do princípio variacional, está sucintamente apresentada. Surgida da necessidade de generalização da fonte adjunta, também propõe-se uma nova formulação LTS_N capaz de resolver problemas de transporte, tanto direto quanto adjunto, com fonte arbitrária, para elevada ordem de quadratura em geometria de placa. Esta nova formulação inspira-se na propriedade de invariância de projeção dos meios isotrópicos mas também é válida para os meios anisotrópicos. Todos os resultados apresentados pelas simulações numéricas de problemas adjuntos são calculados pela nova formulação LTS_N e são comparados ou com a definição de função importância ou pelas relações de reciprocidade ou pelo código ANISN.

Autor: Glênio Aguiar Gonçalves

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

Co-Orientador: Prof. Dr. Gervásio Annes Degrazzia

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Dissertação de Mestrado em Engenharia

Porto Alegre, Fevereiro de 1999.

ABSTRACT

LTS_N SOLUTION OF THE ADJOINT NEUTRON TRANSPORT EQUATION WITH ARBITRARY SOURCE FOR HIGH ORDER OF QUADRATURE IN A HOMOGENEOUS SLAB

The aim of this work consists in extending the LTS_N method to the solution of the adjoint neutron transport problem. The adjoint solution is interpreted physically as an importance function that designates the capacity of contribution of each of the phase space's cell for a response function. The derivation of this interpretation, through variational approach, is briefly presented. Arisen from the necessity of handling with generalized adjoint source, we also propose a new LTS_N formulation which is able to solve the transport problem, both for forward and adjoint, with arbitrary source to high quadrature order in a slab geometry. This new formulation is inspired in the invariance projection property from the isotropic medium, but it is also valid to anisotropic medium. All present results by the numerical simulations of adjoint problem are calculated for the new LTS_N formulation and are compared either with the definition of importance function or by reciprocity relationships or by ANISN code.

Author: Glênio Aguiar Gonçalves

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

Co-Orientador: Prof. Dr. Gervásio Annes Degrazzia

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL

PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM ENGENHARIA MECÂNICA

Dissertação de Mestrado em Engenharia

Porto Alegre, Fevereiro de 1999.

ÍNDICE

1	INTRODUÇÃO	1
2	FORMULAÇÃO LTS_N PARA A SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE	3
2.1	Equação de Transporte de Boltzmann	3
2.2	Método de Ordenadas Discretas - S_N	6
2.3	Equação de Multigrupo S_N	8
2.4	Solução LTS_N	9
3	PROPOSTA DE UMA NOVA FORMULAÇÃO LTS_N	13
3.1	Proposta de uma Nova Formulação LTS_N	13
3.2	Resultados Numéricos	15
3.2.1	Problema 3-1	16
3.2.2	Problema 3-2	17
4	FORMULAÇÃO DA EQUAÇÃO ADJUNTA DE TRANSPORTE - FUNÇÃO IMPORTÂNCIA	20
4.1	Solução Adjunta - Função Importância	20
4.2	Operador Adjunto de Transporte	24
4.3	Solução Adjunta no Método LTS_N	27
5	RESULTADOS NUMÉRICOS DA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO ADJUNTA DE TRANSPORTE PELO MÉTODO LTS_N	29
5.1	Introdução	29
5.2	Problemas	30
5.2.1	Problema 5-1	30

5.2.2	Problema 5-2	31
5.2.3	Problema 5-3	32
5.2.4	Problema 5-4	33
5.2.5	Problema 5-5	34
6	CONCLUSÃO	36
	ANEXOS	38
A	Funcional Linear e Operador Adjunto	38
B	Formulação para Inversão da Matriz $A_{\mathbf{N}}(s)$	39
B.1	Redução da Matriz pela Decomposição de Schur	39
B.1.1	Inversão da Matriz por Particionamento	39
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	42
	APÊNDICES	45
I	Funcional Linear e Operador Adjunto	45
II	Formulação para Inversão da Matriz $A_{\mathbf{N}}(s)$	46
II.1	Redução da Matriz pela Decomposição de Schur	46
II.1.1	Inversão da Matriz por Particionamento	47

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras Romanas

E	Energia
E'	Energia do grupo ' , veja a equação (2.3), página 4
\mathbf{r}	vetor posição , veja a equação (2.1), página 4
t	tempo

Letras Gregas

ϕ	fluxo angular
Ω	The number of angels per unit area, veja a equação (2.1), página 4
∇	Operador nabla , veja a equação (2.3)

ÍNDICE DE FIGURAS

- 5.1 Teste de convergência para o método LTS_N como função da ordem de quadratura. 30
- 5.2 Comparação entre os métodos LTS_4 e ANISN S_4P_1 para a solução adjunta. . 35

ÍNDICE DE TABELAS

3.1	Fluxo escalar pelas duas formulações para a solução LTS ₁₀ do problema 3-1.	17
3.2	Seções de choque associadas ao problema 3-2.	18
3.3	Fluxo escalar pelas duas formulações para solução LTS ₁₀ do problema 3-2. .	19
5.1	Comparação entre o fluxo integrado devido a fonte $S_{gi}(0)$ e a solução adjunta na cela $(0, \mu_i, E_g)$ para a solução LTS ₈ do problema 5-2.	32
5.2	Relação de reciprocidade: $\phi(x, \mu) = \phi^*(x, -\mu)$	33

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

A equação de transporte de Boltzmann é uma equação íntegro-diferencial que descreve a distribuição de partículas no espaço, direção e energia, num meio, ao longo do tempo. Como esta equação, por sua complexidade, só admite soluções analíticas para casos bastante idealizados, solução de Case [Case e Zweifel, 1967], há um especial interesse no desenvolvimento de métodos computacionais eficientes para a solução do problema de transporte.

Nos últimos anos, foi proposto por Vilhena e colaboradores o método LTS_N que resolve analiticamente a aproximação de ordenadas discretas (S_N) da equação de transporte em geometria cartesiana unidimensional, aplicando a técnica da transformada de Laplace na variável espacial, sobre um domínio finito [Vilhena e Barichello, 1991; Barichello, 1992]. Nesse período, o método LTS_N já foi aplicado em modelo de um grupo [Barichello e Vilhena, 1993], multigrupo [Vilhena e Barichello, 1995], espalhamento isotrópico e anisotrópico [Oliveira, 1993], meio homogêneo e heterogêneo, criticalidade [Batistela et al., 1997] e problemas inversos [Vilhena e Barichello, 1993]. A formulação LTS_N também foi estendida a problemas estacionários em uma e duas dimensões e em domínios convexos bidimensionais [Zabadal et al., 1993; Zabadal et al., 1995b; Zabadal et al., 1995a; Zabadal, 1994]. Uma revisão completa e detalhada é encontrada nos trabalhos de Vilhena et alli [Vilhena et al., 1998a; Vilhena et al., 1998b].

Este trabalho tem como objetivo principal estender a aplicação do método LTS_N para a solução do problema adjunto de transporte de nêutron em geometria cartesiana unidimensional, espalhamento anisotrópico e modelo multigrupo.

A equação adjunta de transporte de Boltzmann desempenha um papel fundamental na teoria de transporte. A solução adjunta, interpretada fisicamente como uma função

importância, revela um amplo espectro de aplicações tais como em problemas de blindagem e, coerente com esta interpretação, compõe toda a análise de problemas de transporte pelos métodos de perturbação e variacional abordando, por exemplo, os problemas de determinação da mudança no fator de multiplicação efetivo resultante de pequenas variações nas seções de choque, cálculos de dimensões críticas, a avaliação das constantes de grupo para problemas multigrupos, o uso de problemas simples para derivação de problemas mais complexos, etc. Dentro da bioengenharia, onde se faz uso da radioterapia de nêutrons no tratamento de alguns tipos de câncer, o cálculo de dose também compõe o espectro de aplicações da solução adjunta.

Para cumprir o objetivo proposto, desenvolveu-se, no capítulo 2, uma base teórica na qual foram expostas as técnicas de ordenadas discretas, multigrupo e transformada de Laplace, cujo conjunto compõe o método LTS_N . No capítulo 4, desenvolveu-se formalmente a interpretação da solução adjunta como função importância a partir do princípio variacional, e a seguir construiu-se o operador de transporte adjunto.

Surgida da necessidade de generalização da fonte adjunta para cálculos da função importância [Graça, 1986], no capítulo 3 propõe-se uma nova formulação LTS_N que permite o cálculo de transporte de nêutrons, tanto adjunto quanto direto, com uma fonte arbitrária em problemas que demandem elevada ordem de quadratura ou grande espessura de placa. A implementação desta proposta inspira-se na propriedade de invariância de projeção dos meios isotrópicos, contudo sua aplicação tem caráter mais geral, incluindo meios anisotrópicos. Com este novo procedimento, evita-se o problema de *overflow* que surge na solução particular da formulação LTS_N sugerida por Barichello, L. B., para elevada ordem de quadratura ou grande espessura de placa.

Finalmente, no capítulo 5, apresenta-se resultados de simulações numéricas de problemas adjuntos, calculados pela nova formulação LTS_N , comparando-os ou com a resposta de um detector, de acordo com a interpretação de função importância ou com as relações de reciprocidade entre a solução adjunta e o fluxo angular de nêutrons ou com os resultados obtidos pelo código ANISN.

CAPÍTULO 2

FORMULAÇÃO LTS_N PARA A SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE

Neste capítulo, é apresentada a equação linearizada de transporte de Boltzmann estacionária. Também são mostradas as técnicas de ordenadas discretas, multigrupo e transformada de Laplace, cujo conjunto constitui o método LTS_N .

2.1 Equação de Transporte de Boltzmann

A forma complexa do transporte de partículas, nêutrons ou fótons, onde ocorrem espalhamentos e transferência de energia, é originária da equação desenvolvida por Boltzmann, 1872, para estudos da teoria cinética dos gases. Basicamente, essa é uma equação de balanço, determinada pela adição e subtração de partículas num dado incremento de volume dV em torno de \mathbf{r} , de direção $d\Omega$ em torno de Ω e de energia dE em torno de E , no tempo t . O conjunto de celas, formado por todos os elementos diferenciais $dVd\Omega dE$, constitui o espaço de fase diferencial.

Na teoria de transporte, os nêutrons são considerados partículas pontuais, de massa constante e com momento e posição definidos. As propriedades físicas da interação com o meio, relativas à mecânica quântica, são incorporadas às seções de choque do problema [Graça, 1988].

A quantidade chamada densidade angular de nêutrons, $N(\mathbf{r}, \Omega, E, t)$, é definida como o número provável de nêutrons em uma posição \mathbf{r} , com direção Ω e energia E num dado tempo t , por unidade de volume, ângulo sólido e energia. O produto da velocidade v pela respectiva densidade angular de nêutrons define a grandeza escalar fluxo angular de

nêutrons,

$$\phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t) = vN(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t). \quad (2.1)$$

Claramente,

$$\phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E, t)d\Omega dE \quad (\text{nêutrons} \cdot \text{área}^{-1} \cdot \text{segundo}^{-1}), \quad (2.2)$$

é o fluxo de nêutrons em \mathbf{r} com direção $d\Omega$ em torno de $\boldsymbol{\Omega}$ e energia dE em torno de E num dado tempo t . O fluxo angular de nêutrons é particularmente importante em cálculos envolvendo quantidades integrais do fluxo (funcionais).

A essência da teoria de transporte é a determinação da densidade angular de nêutrons ou, alternativamente, do fluxo angular em todo o espaço de fase, a todo tempo.

Nêutrons podem ser introduzidos numa cela pelos seguintes processos:

1. Originam-se em dV com direção e energia apropriadas(fonte local).
2. Deslocam-se para dV de regiões espaciais adjacentes com direção e energia apropriadas.
3. Quando, com direções e energias diversas, sofram uma interação em dV , assumindo direção e energia adequadas ao elemento $dVd\Omega dE$.

De maneira similar, nêutrons podem ser removidos de $dVd\Omega dE$ se:

1. Na interação, são absorvidos ou têm alteradas direção ou energia.
2. Por, simplesmente, saírem de dV para regiões espaciais adjacentes.

Desse balanço de partículas, deriva-se a equação de transporte de Boltzmann cuja representação estacionária tem a forma genérica

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) + \sigma_t(\mathbf{r}, E)\phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) = \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\Omega' \sigma_S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E)\phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E') + S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E), \quad (2.3)$$

ou, na linguagem de operadores,

$$\mathbf{L}\Phi = S, \quad (2.4)$$

onde o operador \mathbf{L} é

$$\mathbf{L} = \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla + \sigma_t(\mathbf{r}, E) - \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\boldsymbol{\Omega}' \sigma_S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E) \quad (2.5)$$

A função $\sigma_t(\mathbf{r}, E)$ é a seção de choque macroscópica total e representa a probabilidade de interação, com o meio, de um nêutron de energia E , numa posição \mathbf{r} por unidade de distância percorrida. Esta seção de choque engloba todos os tipos de interação e corresponde, portanto, ao inverso do livre caminho médio ($1/cm$). Há algumas circunstância físicas em que também pode depender de $\boldsymbol{\Omega}$ e t . A função $\sigma_S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E)$ é a seção de choque de espalhamento diferencial, definida como

$$\sigma_S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E) \equiv \sigma_S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E') c(\mathbf{r}, E') f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E) \quad (2.6)$$

onde $\sigma_S(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E')$ é a seção de choque de espalhamento macroscópica, $c(\mathbf{r}, E')$ é o número médio de nêutrons secundários emitidos numa colisão de um nêutron incidente com energia E' , na posição \mathbf{r} , e $f(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E)$ é a probabilidade de que esses nêutrons secundários sejam emitidos na direção $\boldsymbol{\Omega}$ e com energia E .

Na equação de transporte (2.3), os termos do lado esquerdo representam a remoção de nêutrons, os do lado direito, as formas de ocupação de uma cela do espaço de fase diferencial. O primeiro termo do lado esquerdo expressa a densidade de fuga líquida, saída menos entrada, de nêutrons de dV para regiões espaciais adjacentes e o segundo, a densidade de remoção de nêutrons da direção e energia originais, $d\boldsymbol{\Omega} dE$, por espalhamento em dV ou a remoção por absorção. No lado direito, o primeiro termo designa a densidade de probabilidade total de que nêutrons em dV , com quaisquer direções e energias, assumam a direção $d\boldsymbol{\Omega}$ e a energia dE como consequência de um espalhamento ou origemem, por fissão, nêutrons secundários com estas direção e energia. O segundo termo representa uma fonte independente emitindo uma densidade de nêutrons com direção $d\boldsymbol{\Omega}$ e energia dE no elemento de volume ordinário dV .

Para geometria plana unidimensional, ou de placa, com simetria azimutal, a equação de transporte de Boltzmann estacionária tem a seguinte configuração

$$\mu \frac{d\phi(x, \mu, E)}{dx} + \sigma_t \phi(x, \mu, E) = 2\pi \int_0^\infty dE' \int_{-1}^1 d\mu' \sigma_S(x, \mu', E' \rightarrow \mu, E) \phi(x, \mu', E') + S(x, \mu, E), \quad (2.7)$$

onde μ é o cosseno do ângulo formado pela direção do movimento do nêutron e o eixo x .

2.2 Método de Ordenadas Discretas - S_N

O método de ordenadas discretas, comumente referido como método S_N , é um meio eficiente de solução numérica da equação de transporte de Boltzmann. O método está centrado no tratamento da variável angular. Para problemas de transporte de nêutrons em geometria plana, o método de ordenadas discretas, tal como o método Wick-Chandrasekhar, é fundamentalmente uma substituição da integral referente a transferência angular por uma fórmula de quadratura.

A equação de transporte em geometria plana unidimensional, para um espalhamento anisotrópico e uma fonte generalizada, conforme (2.7), é

$$\mu \frac{d\phi(x, \mu, E)}{dx} + \sigma_t \phi(x, \mu, E) = 2\pi \int_0^\infty dE' \int_{-1}^1 d\mu' \sigma_S(x, \mu', E' \rightarrow \mu, E) \phi(x, \mu', E') + S(x, \mu, E), \quad (2.8)$$

sujeita às condições de contorno

$$\phi(0, \mu, E) = f(\mu, E), \quad \mu > 0 \quad (2.8a)$$

$$\phi(x_0, \mu, E) = g(\mu, E), \quad \mu < 0. \quad (2.8b)$$

Se o espalhamento depender só de $\mu_0 = \mu \cdot \mu'$, o cosseno do ângulo de espalhamento no sistema de laboratório, o kernel de espalhamento pode ser aproximado por uma série truncada de polinômios de Legendre

$$\sigma_S(x, \mu_0, E) \cong \sum_{\ell=0}^M \frac{(2\ell+1)}{4\pi} \sigma_S^\ell(x, E) P_\ell(\mu) P_\ell(\mu'), \quad (2.9)$$

onde, pelo teorema da adição dos polinômios de Legendre para simetria azimutal,

$$P_\ell(\mu_0) = P_\ell(\mu) P_\ell(\mu'), \quad (2.10)$$

sendo $P_\ell(\mu)$ o polinômio de Legendre de ordem ℓ e $\sigma_S^\ell(x)$, os coeficientes de expansão referentes a P_ℓ . Usando esta aproximação, a equação (2.8) fica

$$\mu \frac{d\phi(x, \mu, E)}{dx} + \sigma_t \phi(x, \mu, E) = \int_0^\infty dE' \sum_{\ell=0}^M \frac{(2\ell+1)}{2} \sigma_S^\ell(x, E' \rightarrow E) P_\ell(\mu) \int_{-1}^1 d\mu' P_\ell(\mu') \phi(x, \mu', E') + S(x, \mu, E), \quad (2.11)$$

O termo integral associado à variável angular da equação acima é, então, aproximado por uma fórmula de quadratura numérica,

$$\int_{-1}^1 d\mu' P_\ell(\mu')\phi(x, \mu', E') \cong \sum_{i=1}^N w_i \phi(x, \mu_i, E') P_\ell(\mu_i), \quad (2.12)$$

onde $\{\mu_i\}$ representa um conjunto de direções discretas e $\{w_i\}$ os pesos, ambos gerados pela fórmula de quadratura.

A fórmula de quadratura gaussiana, amplamente usada em integração numérica, é bastante apropriada para o método em ordenadas discretas porque satisfaz o critério de simetria de direções e pesos em relação a $\mu = 0$ (invariância de projeção) e os pesos, por serem sempre positivos, também satisfazem a condição da integral do fluxo angular ser positiva. Além disso, a quadratura gaussiana integra exatamente um polinômio de grau $(2N - 1)$.

Por haver uma singularidade em $\mu = 0$, o conjunto de direções não deve incluí-la. Esta restrição é atendida pela quadratura gaussiana de ordem par.

Para a aproximação do termo integral, usando a quadratura gaussiana, substitui-se a aproximação (2.12) na equação (2.11) e aplica-se o método da colocação considerando as raízes do polinômio de Legendre de grau N como pontos de colocação. Deste procedimento resulta:

$$\mu_j \frac{\partial \phi_j(x, E)}{\partial x} + \sigma_t \phi_j(x, E) = \int_0^\infty dE' \sum_{\ell=0}^M \frac{(2\ell+1)}{2} \sigma_S^\ell(x, E' \rightarrow E) P_\ell(\mu_j) \sum_{i=1}^N w_i P_\ell(\mu_i) \phi_i(x, E') + S_j(x, E), \quad (2.13)$$

com $j = 1, 2, \dots, N$ (par), e condições de contorno

$$\phi_k(0, E) = f_k(E), \quad \mu_k > 0 \quad (2.13a)$$

$$\phi_{k+N/2}(x_0, E) = g_k(E), \quad \mu_{k+N/2} < 0. \quad (2.13b)$$

com $k = 1, 2, \dots, N/2$, $\phi_j(x, E) = \phi(x, \mu_j, E)$ e os μ_k ordenados de forma decrescente: $-1 < \mu_N < \dots < \mu_{N/2+1} < 0 < \mu_{N/2} < \dots < \mu_1 < 1$.

A expressão (2.13) representa um conjunto de N equações diferenciais de primeira ordem em $\phi_i(x, E)$, uma para cada variável angular considerada, acopladas pela seção de choque diferencial.

O conjunto $\{\mu_i\}$ dos N pontos da quadratura gaussiana são exatamente as N raízes do polinômio de Legendre P_N . Esta vinculação faz o método S_N , usando quadratura gaussiana, ser formalmente equivalente ao método P_{N-1} com condições de contorno de Mark (superfície livre)[Bell e Glasstone, 1970]. Através desta equivalência, pode-se mostrar que o grau de anisotropia M da aproximação (2.9) deve ser menor ou igual à ordem da quadratura gaussiana. Este também é um limite fisicamente apropriado porque seria uma incoerência descrever a dependência angular do kernel de espalhamento melhor do que a do fluxo angular.

2.3 Equação de Multigrupo S_N

A variável energia da equação de transporte será posta agora na forma da aproximação multigrupo. O primeiro passo no desenvolvimento da teoria de multigrupo é dividir o espectro de energia do fluxo angular em um número finito, G , de intervalos separados pela energia E_g , onde $g = 1, 2, \dots, G$. Cada intervalo de energia é chamado grupo e o número do grupo é o valor g do limite de energia mais baixo. A ordem de numeração é tal que quando g cresce, a energia decresce, $E_g > E_{g+1}$.

As seções de choque são determinadas dentro de cada grupo como uma média ponderada e são chamadas de constantes de grupo. Para isto, necessita-se de uma estimativa prévia da dependência em energia do fluxo para ser usada como função peso dentro de cada grupo, ϕ_{aprox} , ou seja,

$$\sigma_{t,g} = \frac{1}{\phi_g} \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_t(E) \phi(E) dE \cong \frac{1}{\phi_{g,\text{aprox}}} \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_t(E) \phi_{\text{aprox}}(E) dE \quad (2.14)$$

e

$$\begin{aligned} \sigma_{t,g' \rightarrow g} &= \frac{1}{\phi_{g'}} \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \phi(E') \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_S(E' \rightarrow E) dE dE' \cong \\ &\frac{1}{\phi_{g',\text{aprox}}} \int_{E_{g'}}^{E_{g'-1}} \phi_{\text{aprox}}(E') \int_{E_g}^{E_{g-1}} \sigma_S(E' \rightarrow E) dE dE' \quad (2.15) \end{aligned}$$

onde

$$\phi_g(x, \mu) = \int_{E_g}^{E_{g-1}} \phi(x, \mu, E) dE \quad (2.16)$$

A equação de transporte unidimensional em geometria plana, quando aplicado o método de multigrupo, fica:

$$\mu \frac{\partial \phi_g(x, \mu)}{\partial x} + \sigma_{t,g}(x) \phi_g(x, \mu) = \int_{-1}^1 \sum_{g'=1}^G \sigma_{S,g' \rightarrow g}(x, \mu' \rightarrow \mu) \phi_{g'}(x, \mu') d\mu' + S_g(x, \mu), \quad g = 1, 2, \dots, G \quad (2.17)$$

Novamente a equação de transporte é decomposta, agora em um conjunto de G equações diferenciais de primeira ordem acopladas pela dependência em energia da seção de choque diferencial. Embora não seja feito neste trabalho, pode-se desacoplar a parte referente à energia considerando que numa interação o nêutron (ou nêutrons) gerado ou permanece no mesmo grupo ou passa para um grupo de menor energia (*downscattering*). Isto permite que a equação de transporte, partindo-se do grupo de mais alta energia, $g = 1$, seja resolvida como uma série sucessiva de problemas monoenergéticos com o termo de *downscattering* dos grupos anteriores introduzidos como fonte. Todavia, este não é um procedimento válido para a transferência de grupo entre grupos térmicos.

A partir dessas considerações, conjugando os métodos S_N e multigrupo, a equação (2.13) toma a forma

$$\mu_j \frac{d\phi_{g,j}(x)}{dx} + \sigma_{t,g} \phi_{g,j}(x) = \sum_{\ell=0}^M \frac{(2\ell+1)}{2} \sum_{g'=1}^G \sigma_{S,g' \rightarrow g}^{\ell}(x) P_{\ell}(\mu_j) \sum_{i=1}^N w_i P_{\ell}(\mu_i) \phi_{g',i}(x) + S_{g,j}(x), \quad (2.18)$$

com $j = 1, 2, \dots, N$ (par) e sujeita às condições de contorno

$$\phi_{g,k}(0) = f_{g,k}, \quad (2.18a)$$

$$\phi_{g,k+N/2}(L) = g_{g,k}. \quad (2.18b)$$

com $k = 1, \dots, N/2$ e $g = 1, \dots, G$.

A expressão (2.18) representa um conjunto de GN equações diferenciais ordinárias de primeira ordem acopladas pela seção de choque diferencial.

2.4 Solução LTS_N

O método LTS_N consiste, basicamente, na aplicação da transformada de Laplace no sistema de equações diferenciais ordinárias gerado pela aproximação multigrupo- S_N (Eq.

2.18), resultando em um sistema de equações algébricas simbólicas (dependentes de s). Após a solução analítica deste sistema, aplica-se a inversa da transformada de Laplace. Nos parágrafos a seguir, apresenta-se a formulação do método LTS_N para solução de problemas de transporte em geometria de placa e modelo multigrupo.

A equação de transporte (2.18) pode ser descrita na forma matricial

$$\frac{d\Phi(x)}{dx} - \mathbf{A}\Phi(x) = \mathbf{Q}(x), \quad (2.19)$$

onde \mathbf{A} é uma matriz de ordem $G \times N$, $\Phi(x)$ é o vetor coluna fluxo angular

$$\Phi(x) = \text{col}[\phi_{11}(x) \dots \phi_{G1}(x) \dots \phi_{1N}(x) \dots \phi_{GN}(x)] \quad (2.20)$$

e $\mathbf{Q}(x)$ é o vetor coluna

$$\mathbf{Q}(x) = \text{col}[S_{11}(x)/\mu_1 \dots S_{G1}(x)/\mu_1 \dots S_{1N}(x)/\mu_N \dots S_{GN}(x)/\mu_N], \quad (2.21)$$

Sabe-se que a solução da equação (2.19) é expressa como [Schilling e Lee, 1988]

$$\Phi(x) = e^{\mathbf{A}x}\Phi(0) + \int_0^x e^{\mathbf{A}(x-\xi)}\mathbf{Q}(\xi) d\xi, \quad (2.22)$$

com $\Phi(0)$ sendo o fluxo angular em $x = 0$. Cabe observar que somente $N/2$ componentes do vetor $\Phi(0)$, correspondentes ao fluxo angular incidente no sistema, são conhecidas.

Quando se aplica a transformada de Laplace, a equação (2.19) fica

$$s\bar{\Phi}(s) - \Phi(0) - \mathbf{A}\bar{\Phi}(s) = \bar{\mathbf{Q}}(s), \quad (2.23)$$

onde a barra denota a transformada de Laplace, s é o parâmetro da transformada e $\Phi(0)$ é o vetor coluna condição de contorno em $x = 0$. A equação (2.23) pode ser reescrita como

$$(s\mathbf{I} - \mathbf{A})\bar{\Phi}(s) = \Phi(0) + \bar{\mathbf{Q}}(s), \quad (2.24)$$

onde \mathbf{I} é a matriz identidade. Por simplicidade, toma-se $\bar{\mathbf{A}}_{GN}(s) = (s\mathbf{I} - \mathbf{A})$. Então:

$$\bar{\Phi}(s) = \bar{\mathbf{A}}_{GN}^{-1}(s)\Phi(0) + \bar{\mathbf{A}}_{GN}^{-1}(s)\bar{\mathbf{Q}}(s). \quad (2.25)$$

Os elementos da matriz simbólica $\bar{\mathbf{A}}_{GN}^{-1}(s)$ são quocientes de polinômios em s , dispostos de modo conveniente à aplicação da técnica de expansão de Heaviside para a inversa da transformada de Laplace.

$$\Phi(s) = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \bar{\mathbf{A}}_{GN}^{-1}(s) \right\} \Phi(0) + \mathcal{L}^{-1} \left\{ \bar{\mathbf{A}}_{GN}^{-1}(s) \bar{\mathbf{Q}}(s) \right\}, \quad (2.26)$$

\mathcal{L}^{-1} denota a inversa da transformada de Laplace. Usando a propriedade da convolução no segundo termo do membro direito da expressão acima, tem-se

$$\Phi(s) = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \overline{\mathbf{A}}_{GN}^{-1}(s) \right\} \Phi(0) + \mathcal{L}^{-1} \left\{ \overline{\mathbf{A}}_{GN}^{-1}(s) \right\} * \mathbf{Q}(x), \quad (2.27)$$

com o asterisco designando a convolução.

Ao se inverter analiticamente a matriz $\overline{\mathbf{A}}_{GN}(s)$ e com a posterior aplicação da técnica de expansão de Heaviside para a inversa da transformada, tem-se uma solução analítica para a variável espacial do fluxo angular. Este procedimento leva à seguinte expressão para o fluxo angular

$$\Phi(x) = \mathbf{B}(x)\Phi(0) + \int_0^x \mathbf{B}(x - \xi)\mathbf{Q}(\xi)d\xi, \quad (2.28)$$

onde

$$\mathbf{B}(x) = \mathcal{L}^{-1} \left\{ \frac{\text{adj}(\overline{\mathbf{A}}_{GN}(s))}{\det(\overline{\mathbf{A}}_{GN}(s))} \right\} = \sum_{k=1}^{GN} \left\{ \frac{\text{adj}(\overline{\mathbf{A}}_{GN}(s_k))}{\frac{d}{ds}\det(\overline{\mathbf{A}}_{GN}(s_k))} \right\} e^{s_k x} = \sum_{k=1}^{GN} \mathbf{P}_k e^{s_k x}, \quad (2.29)$$

onde os s_k 's são as raízes do determinante da matriz $\overline{\mathbf{A}}_{GN}(s)$ e o conjunto de GN matrizes \mathbf{P}_k representa uma notação mais concisa do conjunto de GN matrizes $\{\text{adj}(\overline{\mathbf{A}}_{GN}(s_k))/\frac{d}{ds}\det(\overline{\mathbf{A}}_{GN}(s_k))\}$. Ou seja, nesta notação, os elementos da matriz $\mathbf{B}(x)$ são:

$$b_{ij}(x) = \sum_{k=1}^{GN} p_{kij} e^{s_k x} \quad (2.30)$$

Numa notação matricial em bloco, a equação (2.28) fica

$$\begin{bmatrix} \Phi_1(x) \\ \Phi_2(x) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}(x) & \mathbf{B}_{12}(x) \\ \mathbf{B}_{21}(x) & \mathbf{B}_{22}(x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1(0) \\ \Phi_2(0) \end{bmatrix} + \int_0^x d\xi \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}(x - \xi) & \mathbf{B}_{12}(x - \xi) \\ \mathbf{B}_{21}(x - \xi) & \mathbf{B}_{22}(x - \xi) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1(\xi) \\ \mathbf{Q}_2(\xi) \end{bmatrix} \quad (2.31)$$

sujeita as condições de contorno

$$\Phi_1(0) = \mathbf{f}_1 \quad (2.31a)$$

$$\Phi_2(x_0) = \mathbf{g}_2 \quad (2.31b)$$

onde, nos vetores, o índice 1 e 2 referem-se às $N/2$ direções positivas e $N/2$ direções negativas respectivamente.

Vale notar que o vetor $\Phi(0)$ não está completamente determinado, tendo-se em vista que só $N/2$ componentes, referentes a $\mu > 0$, são conhecidas. As outras $N/2$ condições para $\mu < 0$ devem ser obtidas através da solução de um sistema algébrico de equações lineares a partir das condições de contorno em $x = x_0$.

É importante frisar que neste desenvolvimento não foi feita nenhuma aproximação. Desta forma, a equação (2.28) ou (2.31) equivalendo à solução (2.22), gera uma solução analítica para a variável espacial da equação (2.19). Neste contexto também é necessário ressaltar que foi provado por Pazos, utilizando a teoria de semi-grupos fortemente contínuos, a convergência do método LTS_N [Pazos e Vilhena, 1998; Pazos, 1995].

CAPÍTULO 3

PROPOSTA DE UMA NOVA FORMULAÇÃO LTS_N

Neste capítulo, é proposta uma nova formulação LTS_N utilizando-se o princípio da invariância de projeção. Ao final, faz-se a comparação dos resultados numéricos entre a formulação proposta e a formulação em uso.

3.1 Proposta de uma Nova Formulação LTS_N

A formulação LTS_N (2.31), embora determine corretamente o problema (2.19), apresenta severas restrições de ordem prática devido a seu perfil exponencial. As limitações desta equação originam-se nas raízes positivas do determinante da matriz $\overline{\mathbf{A}}_{GN}$. As raízes do determinante são sempre anti-simétricas,

$$s_k = -s_{N-k+1}, \quad k = 1, \dots, N, \quad (3.1)$$

e como parte do argumento da exponencial, as raízes positivas originam problema de *overflow* para elevada ordem de quadratura ou grande espessura da placa.

Na formulação LTS_N , sugerida por Barichello, L.B. , contornou-se essa dificuldade com uma mudança de base, trocando a variável dos argumentos relativos às raízes positivas de x por $(x - x_0)$. Todavia, permanece o problema de *overflow* na componente particular da solução LTS_N , exigindo que esta seja construída por outro método. Nesta construção, a forma funcional da fonte estará sempre sujeita às dificuldades e restrições do método como, por exemplo, no uso do método coeficientes a determinar. Nesta formulação, a solução LTS_N

tem a configuração:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \Phi_1(x) \\ \Phi_2(x) \end{bmatrix} &= \left\{ \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^+(x-x_0) & \mathbf{B}_{12}^+(x-x_0) \\ \mathbf{B}_{21}^+(x-x_0) & \mathbf{B}_{22}^+(x-x_0) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^-(x) & \mathbf{B}_{12}^-(x) \\ \mathbf{B}_{21}^-(x) & \mathbf{B}_{22}^-(x) \end{bmatrix} \right\} \begin{bmatrix} \mathbf{H}_1 \\ \mathbf{H}_2 \end{bmatrix} \\ &+ \begin{bmatrix} \text{SOLUÇÃO PARTICULAR CONSTRUÍDA} \\ \text{A PARTIR DE ALGUM MÉTODO} \end{bmatrix}, \quad (3.2) \end{aligned}$$

onde \mathbf{H}_1 e \mathbf{H}_2 são vetores modificados em consequência da mudança de base, \mathbf{B}^+ é a componente da matriz $\mathbf{B}(x)$ relativa às raízes positivas e \mathbf{B}^- , a componente relativa às raízes negativas.

Neste trabalho, propõe-se uma nova formulação para a equação matricial (2.31) com vistas a superar as insuficiências da formulação (3.2). Para tanto, explora-se a propriedade de invariância de projeção, ou invariância frente à reflexão, do problema de transporte expresso na equação (2.19).

A invariância de projeção significa a equivalência de condições entre as coordenadas (x, μ) e $(-x, -\mu)$ ou, alternativamente, o tratamento equivalente a fluxos de direções μ e $-\mu$ [Duderstadt e Martin, 1979]. O par $(-x, -\mu)$ pode ser recolocado por $(x_0 - x, -\mu)$ como resultado do deslocamento do ponto de reflexão de 0 para $x_0/2$. Na solução LTS_N , a propriedade de invariância de projeção está representada pela anti-simetria das raízes do determinante da matriz $\bar{\mathbf{A}}_{GN}$, conforme (3.1). Também revela-se na simetria dos elementos $p_{k,i,j}$'s quando se decompõe a matriz $\mathbf{B}(x)$ em GN matrizes $\mathbf{B}_k(x)$ segundo (2.29),

$$p_{k,i,j} = p_{N-k+1, N-i+1, N-j+1} \quad k, i, j = 1, \dots, N. \quad (3.3)$$

Embora a ordem do índice k , como resultado da ordenação s_k , seja uma escolha arbitrária, a simetria sempre existe.

A formulação proposta, quando comparada a (3.2), mantém a decomposição da matriz $\mathbf{B}(x)$ em componentes relativa às raízes positivas, \mathbf{B}^+ , e negativas, \mathbf{B}^- . A diferença consiste em não considerar a mudança $(x-x_0)$ como um artifício matemático, mas sim, como parte efetiva da solução justificada pela invariância de projeção e, como tal, extensiva aos demais termos relacionados a \mathbf{B}^+ . Isto passa pela identificação, através da simetria imposta pela invariância, do par $(x-x_0, -\mu)^*$ com a parte da solução que compreende \mathbf{B}^+ e, (x, μ)

com a que compreende \mathbf{B}^- . Deste modo, a solução LTS_N , homogênea e particular, é posta explicitamente como uma superposição linear do fluxo angular referente a direções negativas ($\mu < 0$) e positivas ($\mu > 0$). Ou seja,

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \Phi_1(x) \\ \Phi_2(x) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^+(x-x_0) & \mathbf{B}_{12}^+(x-x_0) \\ \mathbf{B}_{21}^+(x-x_0) & \mathbf{B}_{22}^+(x-x_0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1(x_0) \\ \Phi_2(x_0) \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^-(x) & \mathbf{B}_{12}^-(x) \\ \mathbf{B}_{21}^-(x) & \mathbf{B}_{22}^-(x) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1(0) \\ \Phi_2(0) \end{bmatrix} \\ &+ \int_{x_0}^x d\xi \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^+(x-\xi) & \mathbf{B}_{12}^+(x-\xi) \\ \mathbf{B}_{21}^+(x-\xi) & \mathbf{B}_{22}^+(x-\xi) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1(\xi) \\ \mathbf{Q}_2(\xi) \end{bmatrix} + \int_0^x d\xi \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^-(x-\xi) & \mathbf{B}_{12}^-(x-\xi) \\ \mathbf{B}_{21}^-(x-\xi) & \mathbf{B}_{22}^-(x-\xi) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1(\xi) \\ \mathbf{Q}_2(\xi) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.4)$$

onde $\Phi_1(0)$ e $\Phi_2(x_0)$ são as condições de contorno do problema (conforme 2.31a-b) e $\Phi_2(0)$ e $\Phi_1(x_0)$ devem ser determinadas por um sistema linear de GN equações algébricas construído a partir das condições de contorno na forma:

$$\begin{aligned} \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^+(-x_0) & \mathbf{B}_{12}^-(0) \\ \mathbf{B}_{21}^+(0) & \mathbf{B}_{22}^-(x_0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1(x_0) \\ \Phi_2(0) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mathbf{I} - \mathbf{B}_{11}^-(0) & \mathbf{I} - \mathbf{B}_{12}^+(-x_0) \\ \mathbf{I} - \mathbf{B}_{21}^-(x_0) & \mathbf{I} - \mathbf{B}_{22}^+(0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1(0) \\ \Phi_2(x_0) \end{bmatrix} \\ &+ \int_0^{x_0} d\xi \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^+(x-\xi) & \mathbf{B}_{12}^+(x-\xi) \\ -\mathbf{B}_{21}^-(x-\xi) & -\mathbf{B}_{22}^-(x-\xi) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1(\xi) \\ \mathbf{Q}_2(\xi) \end{bmatrix} \end{aligned} \quad (3.5)$$

Nesta formulação, todas as exponenciais que aparecem na solução têm argumentos negativos. E, em relação à (3.2), a formulação proposta facilita sobremaneira o tratamento da solução particular ao construí-la, de forma geral, dentro da solução LTS_N . A forma funcional da fonte só tem as restrições comuns à integração analítica ou numérica. Além disto, o fluxo angular pode ser determinado no contorno resolvendo estritamente o sistema de equações algébricas (3.5).

3.2 Resultados Numéricos

No que segue, são apresentados os resultados de simulações numéricas obtidos pela formulação proposta, equação (3.4), comparando-os aos resultados obtidos pela formulação

*O sinal da mudança de $(x_0 - x)$ para $(x - x_0)$ está im-licito na anti simetria das raízes s_k

corrente, equação (3.2). Ambos os algoritmos são implementados em linguagem FORTRAN 90.

No algoritmo da formulação proposta, a inversão da matriz $\overline{\mathbf{A}}_{GN}$ é feita de forma recursiva, combinando a decomposição generalizada de Schur[Golup e Loan, 1989] e o método do particionamento para a inversão de matrizes bloco[Demidovich e Maron, 1987]. Sucintamente, esta combinação consiste em aplicar o método de particionamento para inversão de matrizes bloco na matriz triangular superior resultante da decomposição de Schur. Para fazer a inversa da transformada de Laplace por expansão de Heaviside, calcula-se a matriz adjunta desta matriz triangular, dividindo-a pela derivada do determinante avaliada na raiz s_k . Todo este desenvolvimento está apresentado no Apêndice II e, na implementação do algoritmo, foram usadas sub-rotinas do LAPAC [Anderson e et alli, 1992].

Esse método de inversão de matrizes é amplamente usado no desenvolvimento do método LTS_N . Entretanto, inicia-se uma aplicação mais constante, principalmente para problemas de transferência radiativa que exigem elevada ordem de quadratura, do método de diagonalização da matriz $\overline{\mathbf{A}}_{GN}$ para posterior inversão. Este procedimento despende menos memória e tempo computacionais. Ambas as formulações independem do método de inversão da matriz.

A seguir são apresentados dois problemas para a comparação de resultados, explicitando como a formulação corrente resolveu a componente particular da solução.

3.2.1 Pro lema 3-1

Considere o problema de transporte de neutrons monoenergéticos, em geometria de placa, anisotropia linear, condições de contorno de superfície livre e com fonte externa. A seção de choque macroscópica total é $\sigma_t = 1.0cm^{-1}$ e os coeficientes do kernel de espalhamento são $\sigma_{s0} = 0.99cm^{-1}$ e $\sigma_{s1} = 0.80cm^{-1}$. A espessura da placa é $x_0 = 100cm$. A fonte é uma função exponencial com emissão isotrópica na forma: $(x) = \frac{1}{2}e^{-0.1x}$. Para a configuração corrente, a inversão da matriz é feita por diagonalização e a componente particular da solução é resolvida pelo método coeficientes a determinar. Os fluxos escalares são apresentados na tabela 3.1 para a solução LTS_{10} .

Há que se reforçar que a solução pela formulação corrente, usando o método co-

Tabela 3.1 Fluxo escalar pelas duas formulações para a solução LTS₁₀ do problema 3-1.

POSIÇÃO (<i>cm</i>)	NOVA FORMULAÇÃO (Fluxo Escalar: $cm^{-2}s^{-1}$)	FORMULAÇÃO CORRENTE (Fluxo Escalar: $cm^{-2}s^{-1}$)
0	7.84715360E+000 ^(*)	7.84715360E+000
10	1.83176721E+001	1.83176721E+001
20	1.35087741E+001	1.35087741E+001
30	8.09939254E+000	8.09939254E+000
40	4.42631546E+000	4.42631546E+000
50	2.29668956E+000	2.29668956E+000
60	1.15281209E+000	1.15281209E+000
70	5.64120334E-001	5.64120334E-001
80	2.67233984E-001	2.67233984E-001
90	1.15033682E-001	1.15033682E-001
100	2.16775991E-002	2.16775991E-002

(*): $84 \ 1 \ 0 \ +000 = 84 \ 1 \ 10 \ 000$

eficientes a determinar, só é possível para fontes de classes de funções muito particulares, enquanto a formulação proposta não tem essas restrições.

3.2.2 Pro lema 3-2

Neste segundo exemplo, o problema de transporte é multigrupo, em geometria de placa, condições de contorno de superfície livre e, como fonte externa isotrópica, uma função delta de Dirac localizada no contorno esquerdo da placa. A espessura da placa é $x_0 = 100cm$ e são considerados três grupos de energia, cujas seções de choque macroscópicas são mostradas na tabela 3.2.

Para a solução da formulação corrente, a inversão da matriz \mathbf{A}_{GN} também é feita por

Tabela 3.2 Seções de choque associadas ao problema 3-2.

GRUPO (g)	σ_t (cm^{-1})	$\sigma_{s0,g' \rightarrow g}$ (cm^{-1})	$\sigma_{s1,g' \rightarrow g}$ (cm^{-1})
1	0.7529	$1 \rightarrow 1 = 0.621500$	$1 \rightarrow 1 = 0.392300$
	0.7529	$2 \rightarrow 1 = 0.000336$	$2 \rightarrow 1 = 0.000210$
	0.7529	$3 \rightarrow 1 = 0.000000$	$3 \rightarrow 1 = 0.000000$
2	0.88798	$1 \rightarrow 2 = 0.027490$	$1 \rightarrow 2 = 0.016350$
	0.88798	$2 \rightarrow 2 = 0.839750$	$2 \rightarrow 2 = 0.684400$
	0.88798	$3 \rightarrow 2 = 0.000150$	$3 \rightarrow 2 = 0.000080$
3	2.9865	$1 \rightarrow 3 = 0.007490$	$1 \rightarrow 3 = 0.004350$
	2.9865	$2 \rightarrow 3 = 0.033400$	$2 \rightarrow 3 = 0.022300$
	2.9865	$3 \rightarrow 3 = 2.867600$	$3 \rightarrow 3 = 2.161900$

decomposição de Schur combinada com a inversão de matrizes bloco e a solução particular é resolvida usando o artifício de substituir a fonte de superfície por um fluxo incidente no contorno[Bell e Glasstone, 1970]:

$$S(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega}, E) = -\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Omega} \phi(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega}, E) \quad (3.6)$$

No caso presente:

$$\frac{1}{2} = \mu \phi(0, \mu, E). \quad (3.7)$$

Desta forma, a formulação corrente resolve um problema homogêneo com a condição de contorno

$$\phi(0, \mu, E) = \frac{1}{2\mu}. \quad (3.8)$$

Os resultados, para a comparação entre as duas formulações, são apresentados na tabela 3.3 para solução LTS₁₀.

Tabela 3.3 Fluxo escalar pelas duas formulações para solução LTS₁₀ do problema 3-2.

GRUPO (g)	POSIÇÃO (cm)	NOVA FORMULAÇÃO ($cm^{-2}s^{-1}$)	FORMULAÇÃO CORRENTE ($cm^{-2}s^{-1}$)
1	0	9.11488137E-001 ^(*)	9.11488137E-001
	25	9.62872256E-005	9.62872256E-005
	50	5.17932444E-007	5.17932444E-007
	75	7.67905528E-009	7.67905528E-009
	100	6.05341670E-011	6.05341551E-011
2	0	9.99618452E-001	9.99618452E-001
	25	9.64684489E-003	9.64684489E-003
	50	1.45856852E-004	1.45856852E-004
	75	2.20236795E-006	2.20236795E-006
	100	2.05717443E-008	2.05717442E-008
3	0	1.05339844E+000	1.05339844E+000
	25	3.12205114E-003	3.12205114E-003
	50	4.71268758E-005	4.71268758E-005
	75	7.11582867E-007	7.11582867E-007
	100	3.51634982E-009	3.51634988E-009

(*): 114881 -001 = 114881 10⁻⁰⁰¹

Novamente, nota-se o esforço para a construção da solução particular pela formulação corrente e o uso constante da equação (3.4) para obter-se a solução pela formulação proposta.

CAPÍTULO 4

FORMULAÇÃO DA EQUAÇÃO ADJUNTA DE TRANSPORTE - FUNÇÃO IMPORTÂNCIA

A seguir, apresenta-se o desenvolvimento formal da interpretação física da solução adjunta como função importância através da formulação variacional. Posteriormente, constrói-se o operador adjunto de transporte.

4.1 Solução Adjunta - Função Importância

A definição e interpretação física da solução adjunta podem ser derivadas da determinação da resposta de um detector devido a um fluxo angular que satisfaz a equação linear de transporte de Boltzmann. A resposta é definida como um funcional linear*:[Graça, 1988]

$$(\phi) = \sigma, \phi \quad (4.1)$$

onde o fluxo angular é um elemento do espaço vetorial V , cujo domínio é o espaço de fase (\mathbf{r}, Ω, E) , e a função seção de choque macroscópica, ou função resposta, σ , é um elemento do espaço vetorial dual, definida neste mesmo domínio.

O parâmetro seção de choque macroscópica pode assumir uma variedade de expressões capazes de representar funcionais lineares resposta de interesse tais como taxa de reação, resposta dosimétrica, deposição de calor, etc., em todo ou em parte do espaço de fase.

*Os conceitos referentes a análise vetorial estão no índice

Uma avaliação do funcional linear resposta pode ser feita pela formulação do princípio variacional. Neste contexto, instituiu-se o uso do método dos multiplicadores de Lagrange requerendo que o funcional de interesse seja estacionário para pequenas mas arbitrárias variações da função fluxo angular, sujeito à restrição da equação de transporte de Boltzmann[Lewins, 1965]. Tal lagrangiano tem a forma

$$J(\phi) = \sigma, \phi + \phi^*, S - \mathbf{L}\phi \quad (4.2)$$

A função ϕ^* , como multiplicador de Lagrange, é um elemento do espaço vetorial dual[Reddy, 1986]. O fluxo angular ϕ que torna o funcional lagrangiano estacionário não faz, em geral, o funcional estacionário por si mesmo. Assim

$$J(\phi) = \sigma, \phi + \phi^*, -\mathbf{L}\phi \quad (4.3)$$

$$0 = \sigma, \phi - \phi^*, \mathbf{L}\phi \quad (4.4)$$

$$\sigma, \phi = \phi^*, \mathbf{L}\phi \quad (4.5)$$

Neste ponto, torna-se claro que a função dual ϕ^* determina a taxa de mudança no funcional resposta devido a uma pequena mudança da função fluxo angular na equação de transporte. De maneira equivalente, conforme Apêndice I, tem-se

$$\sigma, \phi = \mathbf{L}^*\phi^*, \phi, \quad (4.6)$$

sendo \mathbf{L}^* o operador adjunto da equação de transporte. Como ϕ é arbitrária, o lagrangiano só será estacionário se

$$\mathbf{L}^*\phi^* = \sigma. \quad (4.7)$$

Esta é, no cálculo variacional, a equação de Euler-Lagrange e, na teoria de transporte, a bem conhecida equação adjunta de transporte de Boltzmann.

A solução adjunta é às vezes referida como fluxo adjunto. Esta denominação se justifica ou como uma alusão ao fluxo angular obtido pela equação de transporte direta

ou pela relação de reciprocidade entre as duas soluções para problemas monoenergéticos, $\phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \phi^*(\mathbf{r}, -\boldsymbol{\Omega})$. A solução adjunta é adimensional (como poderá ser observado pela configuração do operador adjunto na próxima seção).

Formalmente, a construção do lagrangiano e o requerimento de ser estacionário estão fundamentados nas soluções exatas das equações de transporte direta e adjunta, respectivamente. Se estas soluções são inseridas no funcional J , tem-se

$$J(\phi) = \sigma, \phi + \phi^*, S - \mathbf{L}\phi \quad , \quad (4.8)$$

$$J(\phi) = \sigma, \phi \quad , \quad (4.9)$$

por outro lado,

$$J(\phi) = \sigma, \phi - \phi^*, \mathbf{L}\phi + \phi^*, S \quad , \quad (4.10)$$

$$J(\phi) = \phi^*, S \quad , \quad (4.11)$$

ou

$$\phi^*, S = \sigma, \phi \quad , \quad (4.12)$$

definindo-se a relação de correspondência entre os elementos do espaço vetorial e do espaço vetorial dual.

Pela equação (4.12), a função adjunta pode ser vista como uma função peso que pondera a influência de uma fonte no funcional resposta em consideração. Se a fonte S for uma função delta em seu domínio, $S(\mathbf{r}_0, \boldsymbol{\Omega}_0, E_0)$,

$$\phi^*(\mathbf{r}_0, \boldsymbol{\Omega}_0, E_0) = \sigma(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E), \phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) \quad , \quad (4.13)$$

ou, explicitamente,

$$\phi^*(\mathbf{r}_0, \boldsymbol{\Omega}_0, E_0) = \int \int \int \sigma(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) \phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) dV d\Omega dE \quad , \quad (4.14)$$

a função adjunta é interpretada como a medida de importância de uma partícula, introduzida numa cela do espaço de fase, em contribuir para a resposta de um detector[Lewins, 1965]. Desta interpretação deriva a também conhecida denominação de função importância para a solução adjunta.

Esta interpretação de função importância coloca a solução adjunta sobretudo como uma propriedade do espaço de fase que designa a capacidade de contribuição de cada cela para um funcional resposta. Neste sentido, quando se deseja determinar a resposta de um detector, não é necessário calcular o fluxo para cada fonte. Um único cálculo do adjunto, conjugado com a equação (4.12), será suficiente para compor a resposta para qualquer fonte. Nisto, naturalmente, está contemplado o efeito de mudanças (ou incertezas) na distribuição ou no espectro de emissão da fonte sobre um funcional resposta.

Da equação (4.13), pode-se determinar a chamada relação de reciprocidade para fluxo dependente da energia. Se a função resposta for também uma função delta, $\sigma(\mathbf{r}_1, \boldsymbol{\Omega}_1, E_1)$, a equação (4.13) resulta em

$$\phi^*(\mathbf{r}_0, \boldsymbol{\Omega}_0, E_0) = \phi(\mathbf{r}_1, \boldsymbol{\Omega}_1, E_1), \quad (4.15)$$

ou, em termos da função de Green e sua adjunta:

$$G^*(\mathbf{r}_1, \boldsymbol{\Omega}_1, E_1 \rightarrow \mathbf{r}_0, \boldsymbol{\Omega}_0, E_0) = G(\mathbf{r}_0, \boldsymbol{\Omega}_0, E_0 \rightarrow \mathbf{r}_1, \boldsymbol{\Omega}_1, E_1), \quad (4.16)$$

denotando que o fluxo angular em $(\mathbf{r}_1, \boldsymbol{\Omega}_1, E_1)$ devido a uma fonte em $(\mathbf{r}_0, \boldsymbol{\Omega}_0, E_0)$ é igual a solução adjunta em $(\mathbf{r}_0, \boldsymbol{\Omega}_0, E_0)$ devido a uma fonte adjunta em $(\mathbf{r}_1, \boldsymbol{\Omega}_1, E_1)$.

A formulação variacional, usada acima para estabelecer formalmente a equação adjunta de transporte e a interpretação da respectiva solução, é uma técnica da física matemática muito útil para estimar, através da solução de problemas simples, aspectos da solução de problemas de transporte mais complexos ou mesmo, aliada à teoria de perturbação convencional, estimar os efeitos de perturbações no operador de transporte sobre um funcional resposta de interesse. A formulação variacional também possibilita derivar aproximações da equação de transporte de modo consistente por, antes de permitir todas as variações possíveis da função fluxo angular, limitá-las a uma classe de variações. Neste

contexto, coerente com a interpretação de função importância, evidencia-se o papel fundamental da solução adjunta para os métodos de aproximação que, por sua vez, são de grande relevância no tratamento de transporte de nêutrons, em geral, muito complexos.

4.2 Operador Adjunto de Transporte

O operador de transporte adjunto pode ser definido a partir da igualdade dos pares duais

$$\phi^*, \mathbf{L}\phi = \mathbf{L}^*\phi^*, \phi, \quad (4.17)$$

conforme apêndice I. No desenvolvimento a seguir, o operador adjunto de transporte será construído termo-a-termo, a começar pelo termo de divergente (streaming):

$$\phi^*, \mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi = \int \int \int \phi^* \mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi \, dV \, d\Omega \, dE, \quad (4.18)$$

sabendo que

$$\nabla \cdot \mathbf{\Omega} \phi^* \phi = \mathbf{\Omega} \cdot (\phi \nabla \phi^* + \phi^* \nabla \phi), \quad (4.19)$$

então,

$$\mathbf{\Omega} \cdot \phi^* \nabla \phi = \nabla \cdot \mathbf{\Omega} \phi^* \phi - \phi \mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi^*. \quad (4.20)$$

Quando se substitui a igualdade (4.19) na (4.18), tem-se

$$\phi^*, \mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi = \int \int \int \nabla \cdot \mathbf{\Omega} \phi^* \phi \, dV \, d\Omega \, dE - \int \int \int \phi \mathbf{\Omega} \cdot \nabla \phi^* \, dV \, d\Omega \, dE. \quad (4.21)$$

O primeiro termo do membro direito da igualdade (4.21), pelo teorema do divergente, fica

$$\int \int \int \nabla \cdot \mathbf{\Omega} \phi^* \phi \, dV \, d\Omega \, dE = \int \int \int \mathbf{\Omega} \cdot \phi^*(\mathbf{r}_s, \mathbf{\Omega}, E) \phi(\mathbf{r}_s, \mathbf{\Omega}, E) \hat{\mathbf{n}} \, dS \, d\Omega \, dE. \quad (4.22)$$

onde $\hat{\mathbf{n}}$ é um vetor ortonormal ao elemento de superfície dS no sentido de saída do volume. Para condições de contorno de superfície livre do fluxo angular,

$$\phi(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega}, E) = 0 \quad \text{para} \quad \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\Omega} < 0, \quad (4.23)$$

e, solução adjunta satisfazendo as condições de contorno

$$\phi^*(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega}, E) = 0 \quad \text{para} \quad \hat{\mathbf{n}} \cdot \boldsymbol{\Omega} > 0, \quad (4.24)$$

a expressão (4.22) anula-se. Assim, para as condições de contorno acima,

$$\phi^*, \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \phi = - \int \int \int \phi \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \phi^* dV d\Omega dE = -\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \phi^*, \phi, \quad (4.25)$$

ou seja,

$$(\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla)^* = -\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla. \quad (4.26)$$

No termo subsequente, como a seção de choque macroscópica total é uma função real, tem-se

$$(\sigma_t)^* = \sigma_t. \quad (4.27)$$

No último termo, definindo

$$(\boldsymbol{\Omega}, E) \equiv \int \int \sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E) d\Omega' dE', \quad (4.28)$$

então,

$$\phi^*, \phi = \int \int \int dV d\Omega dE \phi^*(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, E) \int \int d\Omega' dE' \sigma_s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E' \rightarrow \boldsymbol{\Omega}, E) \phi(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', E'). \quad (4.29)$$

Trocando a ordem de integração,

$$\int \int \int dV d\Omega' dE' \phi(\mathbf{r}, \Omega', E') \int \int d\Omega dE \sigma_s(\mathbf{r}, \Omega', E' \rightarrow \Omega, E) \phi^*(\mathbf{r}, \Omega, E). \quad (4.30)$$

e renomeando as variáveis $\Omega', E' \rightarrow \Omega, E$, tem-se

$$\int \int \int dV d\Omega dE \phi(\mathbf{r}, \Omega, E) \int \int d\Omega' dE' \sigma_s(\mathbf{r}, \Omega, E \rightarrow \Omega', E') \phi^*(\mathbf{r}, \Omega', E') = \int \int \int dV d\Omega dE \phi^*(\mathbf{r}, \Omega, E) \int \int d\Omega' dE' \sigma_s(\mathbf{r}, \Omega', E' \rightarrow \Omega, E) \phi(\mathbf{r}, \Omega, E), \quad (4.31)$$

assim,

$$\mathbf{L}^* \equiv \int \int d\Omega' dE' \sigma_s(\mathbf{r}, \Omega, E \rightarrow \Omega', E'). \quad (4.32)$$

Portanto, pelos adjuntos (4.26), (4.27) e (4.32), constrói-se o operador adjunto de transporte

$$\mathbf{L}^* = -\Omega \cdot \nabla + \sigma_t(\mathbf{r}, E) - \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\Omega' \sigma_s(\mathbf{r}, \Omega, E \rightarrow \Omega', E') \quad (4.33)$$

e, conseqüentemente, a equação adjunta de transporte

$$\begin{aligned} & -\Omega \cdot \nabla \phi^*(\mathbf{r}, \Omega, E) + \sigma_t(\mathbf{r}, E) \phi^*(\mathbf{r}, \Omega, E) \\ & = \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\Omega' \sigma_s(\mathbf{r}, \Omega, E \rightarrow \Omega', E') \phi^*(\mathbf{r}, \Omega', E') + S^*(\mathbf{r}, \Omega, E) \end{aligned} \quad (4.34)$$

sujeita as condições de contorno (4.24),

$$\phi^*(\mathbf{r}_s, \Omega, E) = 0 \quad \text{para} \quad \hat{\mathbf{n}} \cdot \Omega > 0. \quad (4.35)$$

Portanto, como diferenças entre o operador de transporte e o operador adjunto, os termos de divergente têm sinais opostos, ou seja, o termo de fuga líquida do elemento de volume no operador \mathbf{L} é trocado por um termo de ganho líquido em \mathbf{L}^* . Na seção de choque diferencial estão invertidas as posições das variáveis que identificam o estado do nêutron antes e depois da interação. Isto caracteriza uma inversão no sentido do espalhamento e, se as seções de choque são consideradas como elementos de uma matriz $G \times G$, a matriz

seção de choque para a equação adjunta é a transposta à da equação para o fluxo angular. Finalmente, quando a função fluxo angular satisfaz as condições de contorno de superfície livre, a solução adjunta satisfará as condições de contorno (4.24). Isto está coerente com a interpretação de função importância visto que, para condições de contorno de superfície livre, o nêutron que deixa o sistema não pode mais contribuir para um funcional resposta.

4.3 Solução Adjunta no Método LTS_N

A equação adjunta de transporte, quando aproximada pelas técnicas de ordenadas discretas e multigrupo, pode ser deduzida da equação (2.18) com condições de contorno de superfície livre, fazendo-se as alterações que caracterizam o operador adjunto. Ou seja,

$$-\mu_j \frac{d\phi_{g,j}^*(x)}{dx} + \sigma_{tg}(x)\phi_{g,j}^*(x) + \sum_{\ell=0}^M \frac{(2\ell+1)}{2} \sum_{g'=1}^G \sigma_{s,g \rightarrow g'}^\ell(x) P_\ell(\mu_j) \sum_{i=1}^N w_i \phi_{g',i}^*(x) P_\ell(\mu_i) + S_{g,j}^*(x), \quad (4.36)$$

sujeita às condições de contorno

$$\phi_{g,j+N/2}^*(0) = 0, \quad (4.36a)$$

$$\phi_{g,j}^*(x_0) = 0, \quad j = 1, \dots, N/2 \text{ e } g = 1, \dots, G. \quad (4.36b)$$

É importante notar que, pela aproximação multigrupo- S_N , a equação (4.13) fica:

$$w_{i_1} \phi_{g_1,i_1}(x_1) = \sum_{i=1}^N \sum_{g=1}^G \int_0^{x_0} w_i \sigma_{gi}(x) \phi_{gi}(x) dx. \quad (4.37)$$

Como não surge nenhuma mudança na transformação do operador de transporte direto para o adjunto em relação à variável espacial, a forma geral da equação (3.4) é mantida para a solução adjunta considerando as condições de contorno (4.36a-b).

$$\begin{aligned}
\begin{bmatrix} \Phi_1^*(x) \\ \Phi_2^*(x) \end{bmatrix} &= \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^-(x) & \mathbf{B}_{12}^+(x-x_0) \\ \mathbf{B}_{21}^-(x) & \mathbf{B}_{22}^+(x-x_0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1^*(0) \\ \Phi_2^*(x_0) \end{bmatrix} \\
&+ \int_{x_0}^x d\xi \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^+(x-\xi) & \mathbf{B}_{12}^+(x-\xi) \\ \mathbf{B}_{21}^+(x-\xi) & \mathbf{B}_{22}^+(x-\xi) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1^*(\xi) \\ \mathbf{Q}_2^*(\xi) \end{bmatrix} + \int_0^x d\xi \begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^-(x-\xi) & \mathbf{B}_{12}^-(x-\xi) \\ \mathbf{B}_{21}^-(x-\xi) & \mathbf{B}_{22}^-(x-\xi) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1^*(\xi) \\ \mathbf{Q}_2^*(\xi) \end{bmatrix}
\end{aligned} \tag{4.38}$$

Com o mesmo argumento anterior, o sistema de equações algébricas a ser resolvido para o problema adjunto tem a forma:

$$\begin{bmatrix} \mathbf{B}_{11}^-(x_0) & \mathbf{B}_{12}^+(0) \\ \mathbf{B}_{21}^-(0) & \mathbf{B}_{22}^+(-x_0) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1^*(0) \\ \Phi_2^*(x_0) \end{bmatrix} = \int_0^{x_0} d\xi \begin{bmatrix} -\mathbf{B}_{11}^-(x-\xi) & -\mathbf{B}_{12}^-(x-\xi) \\ \mathbf{B}_{21}^+(x-\xi) & \mathbf{B}_{22}^+(x-\xi) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \mathbf{Q}_1(\xi) \\ \mathbf{Q}_2(\xi) \end{bmatrix} \tag{4.39}$$

Assim, a solução do problema adjunto de transporte pelo método LTS_N é determinada pela equação (4.38) a partir da solução do sistema de equações algébricas (4.39).

CAPÍTULO 5

RESULTADOS NUMÉRICOS DA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO ADJUNTA DE TRANSPORTE PELO MÉTODO LTS_N

5.1 Introdução

Neste capítulo, são resolvidos, como exemplo, cinco problemas adjuntos de transporte cuja simplicidade deve-se ao caráter de problema-teste. Os resultados obtidos por simulações numéricas são comparados ou com a resposta de um detector, de acordo com a interpretação da solução adjunta como função importância, ou pelas relações de reciprocidade ou pela comparação com o código ANISN.

Pela versatilidade já exposta, tanto a solução do problema adjunto de transporte quanto a do problema de transporte direto são construídas dentro nova formulação do método LTS_N , mantendo-se, inclusive, a mesma estrutura de algoritmos para ambas as soluções.

Os algoritmos são implementados em FORTRAN 90. Para a inversão da matriz $\overline{\mathbf{A}}_{GN}$, usa-se o algoritmo resultante da combinação do método de decomposição de Schur com o de particionamento para a inversão de matrizes bloco e, para a inversa da transformada de Laplace, usa-se a técnica de expansão de Heaviside, conforme Apêndice II. Neste procedimento, já introduzido na seção 3.2, a implementação envolve sub-rotinas do LAPACK . Para a geração dos pontos e pesos da quadratura gaussiana, utiliza-se o algoritmo GALEG. O sistema de equações algébricas é resolvido por eliminação de Gauss.

5.2 Pro lemas

Os problemas, juntamente com seus respectivos dados, são apresentados na seqüência abaixo. Todos são em geometria de placa, com espalhamento anisotrópico linear e, para o problema de transporte direto, são consideradas condições de contorno de superfície livre e, para o adjunto, $\phi^*(0, \mu, E) = 0$ para $\mu < 0$, $\phi^*(x_0, \mu, E) = 0$ para $\mu > 0$.

5.2.1 Pro lema 5-1

Para demonstrar a convergência numérica da solução LTS_N para problemas adjuntos de transporte, neste exemplo é calculada a solução adjunta escalar, em uma posição fixa ($x = 15cm$), para várias ordens de quadratura. O problema a ser resolvido é monoenergético, com espessura de placa $x_0 = 150cm$ e com fonte adjunta exponencial, $\sigma = e^{-0.1x}$. A seção de choque macroscópica total é $\sigma_t = 2.9664cm^{-1}$ e os coeficientes do kernel de espalhamento são $\sigma_{s0} = 2.8876cm^{-1}$ e $\sigma_{s1} = 1.2781cm^{-1}$. Os resultados são mostrados na figura 5.1.

Figura 5.1 Teste de convergência para o método LTS_N como função da ordem de quadratura(N).

Destes resultados, nota-se a convergência numérica da solução adjunta para $N > 4$

pelo método LTS_N . Isto está respaldado pela comprovada convergência do método para a solução exata do problema unidimensional[Pazos e Vilhena, 1998; Pazos, 1995].

5.2.2 Pro lema 5-2

Neste segundo exemplo, considera-se o problema adjunto de transporte multigrupo, espessura da placa $x_0 = 200cm$ e fonte unitária distribuída em todo o espaço de fase do sistema. Ou seja, pela interpretação de função importância, a solução deste problema expressa a capacidade de contribuição de cada ponto do espaço de fase para o fluxo integrado do sistema. Neste sentido, para a comparação de resultados, calculou-se o fluxo de nêutrons integrado através da solução de um problema de transporte com uma fonte externa unitária localizada na cela $(0, \mu_i, E_g)$ do espaço de fase. Fez-se isto para as $N/2$ direções positivas e para os três grupos de energia considerados. As seções de choque são mostradas na tabela 3.2 (seção 3.2) e os resultados para a solução LTS_8 estão na tabela 5.1.

Tabela 5.1 Comparação entre o fluxo integrado devido a fonte $S_{gi}(0)$ e a solução adjunta na cela $(0, \mu_i, E_g)$ para a solução LTS₈ do problema 5-2.

GRUPO (g)	DIREÇÃO μ_i	FLU O INTEGRADO NO SISTEMA	SOLUÇÃO ADJUNTA EM $x = 0$
1	1	1.05184425	1.05184425
1	2	2.16707119	2.16707119
1	3	2.67298761	2.67298761
1	4	2.37648740	2.37648740
2	1	2.16072716	2.16072716
2	2	4.36141952	4.36141952
2	3	5.17355101	5.17355101
2	4	4.32063201	4.32063201
3	1	5.9816934E-001 ^(*)	5.9816934E-001
3	2	1.20947878	1.20947878
3	3	1.43995162	1.43995162
3	4	1.21064849	1.21064849

(*): $81 \quad 4 \quad -001 = \quad 81 \quad 4 \quad 10^{-001}$

Neste exemplo, os resultados ficam comprovados pela consistência da solução adjunta como função importância.

5.2.3 Pro lema 5-3

Sabe-se que a solução adjunta e o fluxo angular, para problemas monoenergéticos, têm a relação de reciprocidade $\phi(x, \mu) = \phi^*(x, -\mu)$. Neste exemplo, resolve-se o problema adjunto de transporte monoenergético, com espessura de placa $x_0 = 80cm$ e como fonte externa, uma função delta de Dirac localizada na posição $x = 76cm$, $(x - 76)$. Para comparar os resultados dessa solução, baseando-se na relação de reciprocidade, é resolvido um problema de transporte monoenergético, para a mesma espessura de placa e uma fonte delta de Dirac com emissão isotrópica, também localizada na posição $x = 76cm$. As seção

de choque macroscópica total é $\sigma_t = 1.0cm^{-1}$ e os coeficientes do kernel de espalhamento são $\sigma_{s0} = 0.99cm^{-1}$ e $\sigma_{s1} = 0.8cm^{-1}$. O fluxo angular e a solução adjunta são calculados na posição $x = 37cm$ e os resultados para a solução LTS₁₂ são mostrados na tabela 5.2.

Tabela 5.2 Relação de reciprocidade: $\phi(x, \mu) = \phi^*(x, -\mu)$.

DIREÇÃO (μ)	FLU O ANGULAR	SOLUÇÃO ADJUNTA
9.8156E-001 ^(*)	4.145754E-002	9.159114E-002
9.0411E-001	4.316739E-002	8.930521E-002
7.6990E-001	4.617611E-002	8.541212E-002
5.8731E-001	5.036437E-002	8.025121E-002
3.6783E-001	5.555025E-002	7.424471E-002
1.2523E-001	6.148370E-002	6.784396E-002
-1.2523E-001	6.784396E-002	6.148370E-002
-3.6783E-001	7.424471E-002	5.555025E-002
-5.8731E-001	8.025121E-002	5.036437E-002
-7.6990E-001	8.541212E-002	4.617611E-002
-9.0411E-001	8.930521E-002	4.316739E-002
-9.8156E-001	9.159114E-002	4.145754E-002

(*) 81 -001 = 81 10⁻⁰⁰¹

Confirmando, pela relação de reciprocidade $\phi(x, \mu) = \phi^*(x, -\mu)$, os bons resultados da solução adjunta pelo método LTS_N.

5.2.4 Pro lema 5-4

Neste exemplo, para comparação de resultados, usa-se a relação de reciprocidade $\phi^*(x, \mu, E) = \phi(x', \mu', E')$, onde a fonte adjunta está posta em (x', μ', E') e a fonte direta, em (x, μ, E) . Usando a solução LTS₁, resolve-se o problema adjunto de transporte para uma placa de espessura $x_0 = 180cm$, com uma fonte delta de Dirac localizada na posição $x = 42cm$, direção $\mu = 0.6187$ e no grupo E_2 e um problema direto, nesta mesma placa, com uma fonte delta de Dirac localizada na posição $x = 11cm$, direção $\mu = -0.0950$ e no grupo E . As seções de choque associadas aos grupos de energia são mostradas na tabela

3.2 (seção 3.2). Os resultados obtidos são:

$$\phi^*(11, \mu, E) = 1.38895329E-007$$

e

$$\phi(42, \mu, E_2) = 1.38895329E-007,$$

comprovando pela relação de reciprocidade, a precisão dos resultados para a solução adjunta pelo método LTS_N .

5.2.5 Pro lema 5-5

Neste problema, considera-se uma placa com espessura $x_0 = 100$ cm e o fluxo adjunto é obtido para uma fonte unitária, para os três grupos de energia cujas seções de choque são mostradas na tabela 3.2, localizada ao longo de toda a placa. A função importância para este problema está relacionada com a contribuição de cada ponto do espaço de fase para o fluxo integrado. A solução adjunta LTS_4 para este problema é comparado com ANISN S_4P_1 e os resultados são apresentados na figura 5.2, onde é possível mostrar uma boa concordância entre ambos os métodos em todos os grupos de energia não só pelo comportamento da função mas também pelos valores numéricos.

Figura 5.2 Comparação entre os métodos LTS_4 e ANISN S_4P_1 para a solução adjunta.

CAPÍTULO 6

CONCLUSÃO

Sobre a extensão do método LTS_N à solução do problema adjunto de transporte de nêutrons e a proposta de uma nova formulação LTS_N que confere ao método uma maior abrangência em relação a suas aplicações, alguns pontos devem ser ressaltados.

Inicialmente, a decomposição da solução LTS_N , homogênea e particular, em componentes relativas aos fluxos angulares de direções positivas e negativas, proposta pela nova formulação, estabelece uma configuração fisicamente mais adequada à solução LTS_N . A nova formulação, quando comparada à formulação corrente, elimina o problema de *overflow* apresentado pela solução particular para uma fonte arbitrária em problemas que demandem elevada ordem de quadratura ou grande espessura de placa. Os resultados apresentados na tabela 3.1 para uma fonte exponencial e na tabela 3.3 para uma fonte delta de Dirac, acrescidos dos resultados da figura 5.1 que demonstram a convergência numérica, sustentam esta afirmativa.

O método LTS_N aplicado ao problema adjunto de transporte em geometria de placa sempre gera uma solução adjunta. Esta constatação baseia-se no caráter analítico do método para a solução da aproximação multigrupo- S_N . Como comprovação, os resultados obtidos pelas simulações numéricas apresentam uma boa concordância quando comparados à interpretação da solução adjunta como função importância (tabela 5.1) ou pelas relações de reciprocidade (tabela 5.2 e resultados do problema 5-4). Neste contexto, é importante salientar a provada convergência do método LTS_N que permite calcular a solução com a precisão desejada, aumentando-se a ordem de quadratura. Dessas considerações, portanto, pode-se concluir que o método LTS_N é um método computacional eficiente para a solução do problema adjunto de transporte de nêutrons.

Para finalizar, acredita-se que este trabalho, tanto pela nova formulação quanto pela mostrada capacidade de solução do problema adjunto, contribuiu para consolidação da abrangência do método LTS_N na solução de problemas de transporte em placa plana.

ANEXO A

Funcional Linear e Operador Adjunto

Seja V um espaço vetorial linear definido no campo dos reais \mathbb{R} , a transformação linear ℓ de V em \mathbb{R} é chamada funcional linear. O conjunto de todos os funcionais lineares do espaço vetorial V forma um espaço vetorial chamado espaço vetorial dual V^* (Reddy, 1986).

Ao se considerar um operador linear limitado que transforma um espaço linear normado V em um espaço linear normado V , $v \in V$, se $\ell(v)$ é um funcional linear definido em V , então

$$\ell(v) = \langle w, v \rangle, \quad (\text{A.1})$$

$w \in V^*$,

$$\ell(v) = \langle w, v \rangle \equiv \ell(v), \quad (\text{A.2})$$

onde $\ell(v)$ é um funcional definido em V^* . Claramente, $\ell(v)$ é linear. Portanto, a todo $\ell \in V^*$ corresponde um $w \in V^*$. A coleção de todas as correspondências assim construídas formam um operador ℓ^* com domínio em V^* e imagem contida em V^* ,

$$\ell^*(w), \quad \ell^*(w) = \ell^*w, \quad (\text{A.3})$$

O operador ℓ^* é chamado adjunto de ℓ .

ANEXO B

Formulação para Inversão da Matriz $\mathbf{A}_N(s)$

B.1 Redução da Matriz pela Decomposição de Schur

Considere a matriz $\mathbf{A}_N(s)$ escrita na forma

$$\mathbf{A}_N(s) = (s\mathbf{I} + \mathbf{A}), \quad (\text{B.1})$$

onde os elementos da matriz identidade \mathbf{I} e da matriz \mathbf{A} não dependem do parâmetro s . Aplicando-se a decomposição genérica de ShurGolup e Loan, 1989 na matriz $\mathbf{A}_N(s)$, tem-se

$$\mathbf{A}_N^{-1}(s) = \mathbf{Q} \mathbf{T}^{-1}. \quad (\text{B.2})$$

onde \mathbf{T} é uma matriz triangular superior e \mathbf{Q} e \mathbf{Q}^* são matrizes unitárias e \mathbf{Q}^* é a conjugada transposta da matriz \mathbf{Q} . Desta forma, tem-se que

$$\mathbf{A}_N^{-1}(s) = (s\mathbf{Q}^* \mathbf{I} + \mathbf{Q}^* \mathbf{T})^{-1} = (\mathbf{I} + \mathbf{T})^{-1} \mathbf{Q}, \quad (\text{B.3})$$

Assim, a matriz a ser invertida é da forma

$$s\mathbf{I} + \mathbf{T} = \begin{bmatrix} s + t_{11} & t_{12} & \cdots & t_{1N} \\ 0 & s + t_{22} & \cdots & t_{2N} \\ \vdots & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & s + t_{NN} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.4})$$

B.1.1 Inversão da Matriz por Particionamento

Para fazer-se a inversão da matriz B.4, usa-se o seguinte resultado de inversão de matrizes bloco,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{D} \\ \mathbf{0} & \mathbf{E} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}^{-1} & -\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{E}^{-1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{E}^{-1} \end{bmatrix}. \quad (\text{B.5})$$

Agora, estabelece-se o processo recursivo tal que

$$\mathbf{S}_1 = [s + t_{11}], \quad (\text{B.6})$$

$$\mathbf{S}_2 = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_1 & t_{12} \\ 0 & s + t_{22} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.7})$$

e para k -ésima matriz, tem-se:

$$\mathbf{S}_k = \begin{bmatrix} & \begin{bmatrix} t_{1k} \\ t_{2k} \\ \vdots \\ t_{(k-1)k} \end{bmatrix} \\ \mathbf{S}_{k-1} & \\ \mathbf{0} & s + t_{kk} \end{bmatrix} \quad (\text{B.8})$$

Aplicando a fórmula B.5 na seqüência de matrizes acima, obtêm-se:

$$\mathbf{S}_1^{-1} = \frac{1}{s + t_{11}}, \quad (\text{B.9})$$

$$\mathbf{S}_2^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_1^{-1} & -\mathbf{S}_1^{-1} \frac{t_{12}}{s + t_{22}} \\ 0 & \frac{1}{s + t_{22}} \end{bmatrix}, \quad (\text{B.10})$$

$$\mathbf{S}_k^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_{k-1}^{-1} & \frac{-\mathbf{S}_{k-1}^{-1}}{s + t_{kk}} \begin{bmatrix} t_{1k} \\ t_{(k-1)k} \end{bmatrix} \\ \mathbf{0} & \frac{1}{s + t_{kk}} \end{bmatrix} \quad (\text{B.11})$$

Para encontrar-se a transformada inversa de Laplace, usando o método de expansão de Heaviside, precisa-se conhecer uma fórmula para o cálculo da matriz adjunta. Sabendo que o determinante da matriz triangular, \mathbf{S}_k , é dado por

$$\det(\mathbf{S}_k) = \prod_{i=1}^k (s + t_{ii}), \quad (\text{B.12})$$

tem-se que

$$dj(\mathbf{S}_k) = \det(\mathbf{S}_k) \cdot \mathbf{S}_k^{-1} = \begin{bmatrix} dj(\mathbf{S}_{k-1})(s + t_{kk}) & - & dj(\mathbf{S}_{k-1}) & \begin{bmatrix} t_{1k} \\ \vdots \\ t_{(k-1)k} \end{bmatrix} \\ \mathbf{0} & & \det(\mathbf{S}_{k-1}) & \end{bmatrix} \quad (\text{B.13})$$

Para concluir, usa-se a técnica de expansão de Heaviside e encontra-se a seguinte expressão para a matriz inversa de $(s\mathbf{I} + \mathbf{A})$

$$\mathcal{L}^{-1} (s\mathbf{I} + \mathbf{A})^{-1} = \mathcal{L}^{-1} (s\mathbf{I} + \mathbf{T})^{-1} \mathbf{Q} = \sum_{i=1}^N \frac{dj(\mathbf{S}_N)_{s=s_i}}{\frac{d}{ds}(\det(\mathbf{S}_N)_{s=s_i})} \mathbf{Q}, \quad (\text{B.14})$$

onde $s_i = -t_{ii}$ e \mathbf{Q} denota a matriz conjugada transposta (hermitiana) da matriz \mathbf{A} .

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

Anderson, E. and et alli, 1992, **LAPACK User's Guide Society for Industrial and Applied Mathematics- SIAM** . Philadelphia.

Barichello, L. B., 1992. **Formulação Analítica para Solução do Problema de Ordenada Discreta Unidimensional** , Tese de Doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Barichello, L. B. and Vilhena, M. T., 1993. A General Approach to One Group One Dimensional Transport Equation , **Internuclear** , vol. 58(3), pp. 182-184.

Batistela, C. H. F., Vilhena, M. T., and Borges, V., 1997. Criticality by the LTS_N Method , **Journal of Nuclear Science and Technology** , vol. 34(6), pp. 603-606.

Bell, G. I. and Glasstone, S., 1970. **Nuclear Reactor Theory** . Litton Educational Publishing, Inc.

Case, J. M. and Zweifel, P. F., 1967. **Linear Transport Theory** . Addison Wesley Publishing, Company, Inc., New York.

Demidovich, B. P. and Maron, I. A., 1987. **Computational Mathematics** . Mir Publishers.

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

Golub, G. H. and Loan, C. F. V., 1989. **Matrix Computation** . The Johns Hopkins University Press.

Graça, C. O., 1986. **Reaction Rate Studies in a Fusion Reactor Blanket** , PhD thesis, University of Cambridge.

Graça, C. O., 1988. Optimization of Blanket Design for Fusion Reactors by Higher Order Perturbation Theory , **Nuclear Energ** , vol. 27, pp. 121-130.

Lewins, J., 1965. **Importance T e Adjoint Fuction** . Pergamon Press.

Oliveira, J. V. P., 1993. **Formulação LTS_N para o Problema de Ordenada Discreta com Anisotropia** , Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-Graduação em Matemática da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Pazos, R. P., 1995. **Equação de Transporte de Nêutrons - Enfoque de Semi-Grupo** , Dissertação de Mestrado, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada da Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Pazos, R. P. and Vilhena, M. T., 1998. Convergence of the LTSN Method: Approach of C0 Semi-Groups , **Progress in Nuclear Energ** , vol. 34, pp. 77.

Reddy, J. N., 1986. **Applied Functional Analysis and Variational Methods in Engineering** . MacGraw-Hill Book Company, Inc.

Schilling, R. and Lee, H., 1988. **Engineering Analysis - A Vector Space Approach** . John Wiley and Sons, New York.

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

Vilhena, M. T. and Barichello, L. B., 1993. Um Problema Inverso em Transporte de Nêutrons e Radiação , **Anais do IX ENFIR- Encontro Nacional de Física de Reatores e Termohidráulica**, vol. Caxambu - MG, pp. 22-24.

Vilhena, M. T. and Barichello, L. B., 1995. An Analytical Solution for Multi-group Slab Geometry Discrete Ordinates Problem , **Transport Theory and Statistical Physics**, vol. 24, pp. 1337.

Vilhena, M. T., Barichello, L. B., Zabadal, L. B., Segatto, C. F., and Cardona, A. V., 1998b. Analytical Solution for Approximations To The Multidimensional Transport Equation in Cartesian Geometry , **Progress in Nuclear Energ** , vol. . submetido para publicação.

Vilhena, M. T., Barichello, L. B., Zabadal, L. B., Segatto, C. F., and Cardona, A. V., 1998a. General Solution Of One-dimensional Approximations To The Transport Equation , **Progress in Nuclear Energ** , vol. 33, pp. 99.

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

Zabadal, J., Vilhena, M. T., and Barichello, L. B., 1993. Solução da Equação de ordenada discreta em Duas Dimensões pelo Método LTS_N , **Anais do IX ENFIR- Encontro Nacional de Física de Reatores e Termo idráulica**, vol. , pp. 90 92. Caxambu - MG.

Zabadal, J., Vilhena, M. T., and Barichello, L. B., 1995a. An Analytical Solution for the Two-Dimensional Discrete Ordinate Problem In a Convex Domain , **Progress in Nuclear Energ** , vol. .

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

APÊNDICE I

Funcional Linear e Operador Adjunto

Seja V um espaço vetorial linear definido no campo dos reais \mathbb{R} , a transformação linear ℓ de V em \mathbb{R} é chamada funcional linear. O conjunto de todos os funcionais lineares do espaço vetorial V forma um espaço vetorial chamado espaço vetorial dual V^* (Reddy, 1986).

Ao se considerar um operador linear limitado que transforma um espaço linear normado V em um espaço linear normado W , $v \in V$, se $\ell(v)$ é um funcional linear definido em V , então

$$\ell(v) = (w, v), \quad (I.1)$$

$w \in V^*$,

$$\ell(v) = (w, v) \equiv \ell(v), \quad (I.2)$$

onde $\ell(v)$ é um funcional definido em V . Claramente, $\ell(v)$ é linear. Portanto, a todo $\ell \in V^*$ corresponde um $w \in V^*$. A coleção de todas as correspondências assim construídas formam um operador $T: V^* \rightarrow V^*$ com domínio em V^* e imagem contida em V^* ,

$$T(w) = {}^*w, \quad (I.3)$$

O operador T é chamado adjunto de ℓ .

APÊNDICE II

Formulação para Inversão da Matriz $\mathbf{A}_N(s)$

II.1 Redução da Matriz pela Decomposição de Sc ur

Considere a matriz $\mathbf{A}_N(s)$ escrita na forma

$$\mathbf{A}_N(s) = (s\mathbf{I} + \mathbf{A}), \quad (\text{II.1})$$

onde os elementos da matriz identidade \mathbf{I} e da matriz \mathbf{A} não dependem do parâmetro s . Aplicando-se a decomposição genérica de ShurGolup e Loan, 1989 na matriz $\mathbf{A}_N(s)$, tem-se

$$\mathbf{A}_N^{-1}(s) = \mathbf{Q} \mathbf{T}^{-1}. \quad (\text{II.2})$$

onde \mathbf{T} é uma matriz triangular superior e \mathbf{Q} e \mathbf{Q}^* são matrizes unitárias e \mathbf{Q}^* é a conjugada transposta da matriz \mathbf{Q} . Desta forma, tem-se que

$$\mathbf{A}_N^{-1}(s) = (s\mathbf{Q} \mathbf{I} + \mathbf{Q} \mathbf{T})^{-1} = (\mathbf{Q}^{-1}(s\mathbf{I} + \mathbf{T})\mathbf{Q})^{-1}, \quad (\text{II.3})$$

Assim, a matriz a ser invertida é da forma

$$s\mathbf{I} + \mathbf{T} = \begin{bmatrix} s + t_{11} & t_{12} & \cdots & t_{1N} \\ 0 & s + t_{22} & \cdots & t_{2N} \\ \vdots & 0 & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & s + t_{NN} \end{bmatrix}. \quad (\text{II.4})$$

II.1.1 Inversão da Matriz por Particionamento

Para fazer-se a inversão da matriz II.4, usa-se o seguinte resultado de inversão de matrizes bloco,

$$\begin{bmatrix} \mathbf{C} & \mathbf{D} \\ \mathbf{0} & \mathbf{E} \end{bmatrix}^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{C}^{-1} & -\mathbf{C}^{-1}\mathbf{D}\mathbf{E}^{-1} \\ \mathbf{0} & \mathbf{E}^{-1} \end{bmatrix}. \quad (\text{II.5})$$

Agora, estabelece-se o processo recursivo tal que

$$\mathbf{S}_1 = [s + t_{11}], \quad (\text{II.6})$$

$$\mathbf{S}_2 = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_1 & t_{12} \\ 0 & s + t_{22} \end{bmatrix}, \quad (\text{II.7})$$

e para k -ésima matriz, tem-se:

$$\mathbf{S}_k = \begin{bmatrix} & \begin{bmatrix} t_{1k} \\ t_{2k} \\ \vdots \\ t_{(k-1)k} \end{bmatrix} \\ \mathbf{S}_{k-1} & \\ \mathbf{0} & s + t_{kk} \end{bmatrix} \quad (\text{II.8})$$

Aplicando a fórmula II.5 na seqüência de matrizes acima, obtêm-se:

$$\mathbf{S}_1^{-1} = \frac{1}{s + t_{11}}, \quad (\text{II.9})$$

$$\mathbf{S}_2^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_1^{-1} & -\mathbf{S}_1^{-1} \frac{t_{12}}{s + t_{22}} \\ 0 & \frac{1}{s + t_{22}} \end{bmatrix}, \quad (\text{II.10})$$

$$\mathbf{S}_k^{-1} = \begin{bmatrix} \mathbf{S}_{k-1}^{-1} & \frac{-\mathbf{S}_{k-1}^{-1}}{s + t_{kk}} \begin{bmatrix} t_{1k} \\ \vdots \\ t_{(k-1)k} \end{bmatrix} \\ \mathbf{0} & \frac{1}{s + t_{kk}} \end{bmatrix} \quad (\text{II.11})$$

Para encontrar-se a transformada inversa de Laplace, usando o método de expansão de Heaviside, precisa-se conhecer uma fórmula para o cálculo da matriz adjunta. Sabendo que o determinante da matriz triangular, \mathbf{S}_k , é dado por

$$\det(\mathbf{S}_k) = \prod_{i=1}^k (s + t_{ii}), \quad (\text{II.12})$$

tem-se que

$$dj(\mathbf{S}_k) = \det(\mathbf{S}_k) \cdot \mathbf{S}_k^{-1} = \begin{bmatrix} dj(\mathbf{S}_{k-1})(s + t_{kk}) & -dj(\mathbf{S}_{k-1}) \begin{bmatrix} t_{1k} \\ \vdots \\ t_{(k-1)k} \end{bmatrix} \\ \mathbf{0} & \det(\mathbf{S}_{k-1}) \end{bmatrix} \quad (\text{II.13})$$

Para concluir, usa-se a técnica de expansão de Heaviside e encontra-se a seguinte expressão para a matriz inversa de $(s\mathbf{I} + \mathbf{A})$

$$\mathcal{L}^{-1} (s\mathbf{I} + \mathbf{A})^{-1} = \mathcal{L}^{-1} (s\mathbf{I} + \mathbf{T})^{-1} \mathbf{Q} = \sum_{i=1}^N \frac{dj(\mathbf{S}_N)_{s=s_i}}{\frac{d}{ds}(\det(\mathbf{S}_N)_{s=s_i})} \mathbf{Q}_i, \quad (\text{II.14})$$

onde $s_i = -t_{ii}$ e \mathbf{Q}_i denota a matriz conjugada transposta (hermitiana) da matriz \mathbf{Q} .