Proceeding Series of the Brazilian Society of Applied and Computational Mathematics, Vol. 5, N. 1, 2017.

Trabalho apresentado no CNMAC, Gramado - RS, 2016.

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Solução Particular via Função de Green para a Adjunta da Equação de Transporte Unidimensional em Ordenadas Discretas: uma Aplicação em Problemas Inversos

Cássio Baissvenger Pazinatto[1]
Programa de Pós-graduação em Matemática Aplicada, UFRGS, Porto Alegre, RS
Liliane Basso Barichello[2]
Instituto de Matemática e Estatística, UFRGS, Porto Alegre, RS

Resumo. Uma solução particular derivada em termos da função de Green é desenvolvida para a equação adjunta à equação de transporte de partículas unidimensional monoenergética. A formulação desenvolvida é aplicada com sucesso em um problema inverso de reconstrução de fontes de partículas.

Palavras-chave. transporte de partículas, função de Green, problemas inversos

1 Introdução

O transporte de partículas é um fenômeno físico presente em diversas situações fundamentais na sociedade moderna, como na segurança e detecção do transporte de materiais nucleares [9, 10], análises tomográficas [7], prospecção de petróleo [1], dosagens radioterápicas [13], entre outras. A equação adjunta à equação de transporte é uma ferramenta matemática que auxilia na resolução de diversos dos problemas anteriormente citados, os quais, muitas vezes, são caracterizados como problemas inversos.

Em geometria unidimensional, como uma placa plana infinita, a equação adjunta à equação de transporte [8] pode ser escrita em sua forma integro-diferencial como

$$-\mu\frac{\partial}{\partial z}\psi^\dagger(z,\mu) + \sigma\psi^\dagger(z,\mu) = \frac{c}{2}\sum_{l=0}^{L} f_l P_l(\mu)\int_{-1}^{1} P_l(\mu')\psi^\dagger(z,\mu')d\mu' + S^\dagger(z,\mu), \tag{1}$$

onde $z \in (z_a,z_b)$ representa a variável espacial, $\mu \in [-1,1]$ é o cosseno do ângulo entre a placa e sua direção normal e $S^\dagger$ é uma fonte interior de partículas neutras. A seção de choque macroscópica total, σ, e o número médio de partículas emergindo de colisões, c, são considerados constantes. Como usual [8], o núcleo de espalhamento é descrito através da expansão, de ordem L, em polinômios de Legendre, P_l, onde f_l são os coeficientes, constantes, da expansão e $f_0 = 1$.

Uma técnica típica para a obtenção de solução para a Eq. (1) é o método de Ordenadas Discretas [5]. A variável angular da Eq. (1) é discretizada e uma regra de quadratura

[1]cpazinatto@ufrgs.br
[2]lbaric@mat.ufrgs.br

composta por n_d nós μ_i e pesos w_i no intervalo $[-1,1]$ é usada para aproximar o termo integral da equação, conforme

$$-\mu_i \frac{d}{dz}\psi^\dagger(z,\mu_i) + \sigma\psi^\dagger(z,\mu_i) = \frac{c}{2}\sum_{l=0}^{L} f_l P_l(\mu) \sum_{n=1}^{n_d} w_n P_l(\mu_n)\psi^\dagger(z,\mu_n) + S^\dagger(z,\mu_i), \qquad (2)$$

para $i = 1,\ldots,n_d$. Soluções para o sistema de equações diferenciais ordinárias descrito pela Eq. (2) podem ser obtidas através da superposição da solução para a equação homogênea com qualquer solução particular [2, 12]. O sistema de equações discretizadas na variável angular, descrito pela Eq. (2), introduz uma simplificação relevante na forma integro-diferencial da Eq. (1), mesmo assim, a obtenção de soluções particulares não é uma tarefa simples. No âmbito dos métodos analíticos, poucas estratégias são oferecidas na literatura, muitas vezes restritas a casos particulares de termos-fontes ou impondo restrições com respeito aos parâmetros da equação.

Uma maneira de se obter soluções para a equação homogênea é através da superposição de soluções espectrais da forma $\psi^\dagger(z,\mu_i) = \phi^\dagger(\nu,\mu_i)e^{-z/\nu}$, as quais dão origem ao problema de autovalores

$$\left(\frac{\mu_i}{\nu} + \sigma\right)\phi^\dagger(\nu,\mu_i) = \frac{c}{2}\sum_{l=0}^{L} f_l P_l(\mu) \sum_{n=1}^{n_d} w_n P_l(\mu_n)\phi^\dagger(\nu,\mu_i), \qquad (3)$$

para $i = 1,\ldots,n_d$. É destacado que para $\nu_j \neq \nu_k$, tem-se uma relação de ortogonalidade do tipo [3]

$$\sum_{i=1}^{n_d} \mu_i w_i \phi^\dagger(\nu_j,\mu_i)\phi^\dagger(\nu_k,\mu_i) = 0, \qquad (4)$$

a qual pode ser facilmente verificada ao avaliar a Eq. (3) em $\nu = \nu_j$, previamente multiplicada por $w_i\phi(\nu_k,\mu_i)$, subtrair a equação resultante de uma variação da mesma, onde são trocados os lugares dos índices j e k, e, por fim, somar para $i = 1,\ldots,n_d$. Neste trabalho, será derivada uma solução particular para o sistema de equações descrito na Eq. (2) baseada na função de Green em meio infinito. Na próxima seção, a formulação é apresentada e, na sequência, é feita uma aplicação em um problema inverso de reconstrução de fonte.

2 Soluções Particulares

A utilização de funções de Green para a obtenção de soluções particulares para a equação de transporte já foi sugerida por Case e Zweifel [4] e posteriormente aplicada para as equações de ordenadas discretas por Barichello *et al.* [3]. Tal estratégia também pode ser utilizada, seguindo [12], para a obtenção de soluções particulares para a equação adjunta à equação de transporte.

2.1 Função de Green

A função de Green é aqui definida como uma solução da Eq (2) com termo fonte dado por $S^\dagger(z,\mu) = \delta(z-\tau)\delta_{i,\alpha}$, com $\delta(z-\tau)$ representando a função Delta de Dirac e $\delta_{i,\alpha}$ a função Delta de Kronecker, isto é, a solução de

$$-\mu_i \frac{d}{dz} G(z,\mu_i;\tau,\mu_\alpha) + \sigma G(z,\mu_i;\tau,\mu_\alpha) \\ = \frac{c}{2} \sum_{l=0}^{L} f_l P_l(\mu_i) \sum_{n=1}^{n_d} w_n P_l(\mu_n) G(z,\mu_n;\tau,\mu_\alpha) + \delta(z-\tau)\delta_{i,\alpha}, \tag{5}$$

onde $G(z,\mu_i;\tau,\mu_\alpha)$ pode ser interpretado como o fluxo angular em (z,μ_i) de partículas migradas de $\tau \in (z_a,z_b)$ com direção μ_α, $\alpha = 1,\ldots,n_d$. Tal solução pode ser escrita como uma combinação linear das soluções elementares $\psi^\dagger(z,\mu_i)$, obtidas por meio da Eq. (3). Ao supor que para algum s, com $1 \leq s \leq n_d$, se tenha $\nu_1 > 0,\ldots,\nu_s > 0$ e $-\nu_{s+1} < 0,\ldots,-\nu_{n_d} < 0$, para $z \in \mathbb{R}$, é imposto que $G(z,\mu_i;\tau,\mu_\alpha)$ seja finita ao passo em que $|z| \to \infty$, desta forma, são escritas [3]

$$G(z,\mu_i;\tau,\mu_\alpha) = -\sum_{j=1}^{s} A_{j,\alpha} \phi^\dagger(\nu_j,\mu_i) e^{-(z-\tau)/\nu_j} \tag{6}$$

para $z > \tau$ e limitada quando $z \to \infty$, e

$$G(z,\mu_i;\tau,\mu_\alpha) = \sum_{j=s+1}^{n_d} B_{j,\alpha} \phi^\dagger(-\nu_j,\mu_i) e^{-(\tau-z)/\nu_j} \tag{7}$$

para $z < \tau$ e limitada quando $z \to -\infty$. Por definição, as Eqs. (6) e (7) possuem saltos quando $z \to \tau$. Para tratar das descontinuidades, são impostas as condições

$$-\mu_i \lim_{\epsilon \to 0} \big[G(\tau+\epsilon,\mu_i;\tau,\mu_\alpha) - G(\tau-\epsilon,\mu_i;\tau,\mu_\alpha) \big] = \delta_{i,\alpha}, \tag{8}$$

para $i = 1,\ldots,n_d$, obtidas ao integrar as Eqs. (5) em $z \in (\tau-\epsilon,\tau+\epsilon)$ [3, 4]. Para a determinação das constantes $A_{j,\alpha}$ e $B_{j,\alpha}$, as Eqs. (6) e (7) são substituídas nas Eqs. (8) de forma que

$$\mu_i \sum_{j=1}^{s} A_{j,\alpha} \phi^\dagger(\nu_j,\mu_i) + \mu_i \sum_{j=s+1}^{n_d} B_{j,\alpha} \phi^\dagger(-\nu_j,\mu_i) = \delta_{i,\alpha}. \tag{9}$$

para $i = 1,\ldots,n_d$. Ao multiplicar a Eq. (9) por $w_i \phi^\dagger(\nu_\beta,\mu_i)$, com $\beta \in \{1,\ldots,s\}$, e somar todos os valores do índice i, são obtidas, através da relação de ortogonalidade da Eq. (4),

$$A_{j,\alpha} = \frac{w_\alpha \phi^\dagger(\nu_j,\mu_\alpha)}{\sum_{j=1}^{n_d} w_i \mu_i \left[\phi^\dagger(\nu_j,\mu_i)\right]^2}, \tag{10}$$

para $j \in \{1,\ldots,s\}$. De forma semelhante, a Eq. (9) pode ser multiplicada por $w_i \phi^\dagger(-\nu_\beta,\mu_i)$, com $\beta \in \{s+1,\ldots,n_d\}$, e somada sobre todos os valores do índice i, de forma a serem obtidas

$$B_{j,\alpha} = \frac{w_\alpha \phi^\dagger(-\nu_j,\mu_\alpha)}{\sum_{j=1}^{n_d} w_i \mu_i \left[\phi^\dagger(-\nu_j,\mu_i)\right]^2}, \tag{11}$$

com $j \in \{s+1,\ldots,n_d\}$. A seguir, uma solução particular para a Eq. (2) será escrita em termos das Eqs. (6) e (7).

DOI: 10.5540/03.2017.005.01.0488

2.2 Formulação da Solução Particular

Seguindo Pazinatto [11], a solução particular para a equação adjunta à equação de transporte é finalmente escrita em termos da função de Green como

$$\psi_p^\dagger(z,\mu_i) = \int_{z_a}^{z_b} \sum_{\alpha=1}^{n_d} G(z,\mu_i;\tau,\mu_\alpha) S^\dagger(\tau,\mu_\alpha) d\tau, \tag{12}$$

ou, por meio das Eqs. (6) e (7),

$$\psi_p^\dagger(z,\mu_i) = \sum_{j=1}^{s} \mathcal{A}_j(z)\phi^\dagger(\nu_j,\mu_i) + \sum_{j=s+1}^{n_d} \mathcal{B}_j(z)\phi^\dagger(-\nu_j,\mu_i), \tag{13}$$

onde $\mathcal{A}_j(z)$ e $\mathcal{B}_j(z)$, são tais que

$$\mathcal{A}_j(z) = -\sum_{\alpha=1}^{n_d} A_{j,\alpha} \int_{z_a}^{z} S^\dagger(\tau,\mu_\alpha) e^{-(z-\tau)/\nu_j} d\tau, \tag{14}$$

$$\mathcal{B}_j(z) = \sum_{\alpha=1}^{n_d} B_{j,\alpha} \int_{z}^{z_b} S^\dagger(\tau,\mu_\alpha) e^{-(\tau-z)/\nu_j} d\tau. \tag{15}$$

Destaca-se que as integrais nas Eqs. (14) e (15) podem ser avaliadas antes da implementação computacional do método, oferecendo como consequência uma maior precisão nos resultados, assim como a possibilidade de um menor tempo computacional.

No contexto da formulação ADO (*Analytical Discrete Ordinates*) desenvolvida para a equação adjunta à equação de transporte [11], tem-se uma quadratura de n nós $\hat{\mu}_i$ e pesos $\hat{w}_i$ para o intervalo (0,1]. Desta forma, são fixados $n_d = 2n$, direções $\mu_i = \hat{\mu}_i$ e $\mu_{n+i} = -\hat{\mu}_i$, e pesos $w_i = \hat{w}_i$ e $w_{n+i} = \hat{w}_i$, para $i \in \{1,\dots,n\}$. A solução particular de Green é então dada por [11]

$$\Psi_{p,\pm}^\dagger(z) = \sum_{j=1}^{n} \Big[\mathcal{A}_j(z)\Phi_\pm^\dagger(\nu_j) + \mathcal{B}_j(z)\Phi_\mp^\dagger(\nu_j) \Big], \tag{16}$$

onde $\Psi_{p,\pm}^\dagger(z) = \begin{bmatrix} \psi_p^\dagger(z,\pm\mu_1) & \cdots & \psi_p^\dagger(z,\pm\mu_n) \end{bmatrix}^T$, $\Phi_\pm^\dagger(\nu) = \begin{bmatrix} \phi^\dagger(\nu,\pm\mu_1) & \cdots & \phi^\dagger(\nu,\pm\mu_n) \end{bmatrix}^T$, com

$$\Phi_\pm^\dagger(\nu) = \frac{1}{2} M^{-1}(I \mp \nu A)x \tag{17}$$

para $j = 1,\dots,n$, onde $1/\nu^2$ e x são, respectivamente, autovalores e autovetores de

$$(A_+A_-)x = \frac{1}{\nu^2}x, \tag{18}$$

com matrizes de ordem n

$$A_\pm = \left(\sigma I - \frac{c}{2} \sum_{l=0}^{L} f_l \Pi_l \Pi_l^T W[1 \mp (-1)^l] \right) M^{-1}, \tag{19}$$

onde foram aqui definidas as matrizes $M = \mathrm{diag}\,(\mu_1,\dots,\mu_n)$, $W = \mathrm{diag}\,(w_1,\dots,w_n)$ e os vetores $\Pi_l = \begin{bmatrix} P_l(\mu_1) & \cdots & P_l(\mu_n) \end{bmatrix}^T$, para $l \in \{0,1,\dots,L\}$.

DOI: 10.5540/03.2017.005.01.0488

Para o caso de fontes isotrópicas, isto onde, onde $S^\dagger$ independe da variável angular, as expressões para $\mathcal{A}_j(z)$ e $\mathcal{B}_j(z)$ nas Eqs. (14) e (15) podem ser simplificadas. No caso da utilização do método ADO em problemas com fontes isotrópicas, as expressões são escritas como

$$\mathcal{A}_j(z) = C_j \int_{z_a}^{z} e^{-(z-\tau)/\nu_j} d\tau, \quad \mathcal{B}_j(z) = C_j \int_{z}^{z_b} e^{-(\tau-z)/\nu_j} d\tau, \tag{20}$$

com

$$C_j = \frac{\sum_{i=1}^{n} w_i \left[\phi(\nu_j,\mu_i) + \phi(\nu_j,-\mu_i)\right]}{\sum_{i=1}^{n} w_i\mu_i \left[\phi(\nu_j,\mu_i)^2 - \phi(\nu_j,-\mu_i)^2\right]}. \tag{21}$$

Na próxima seção, serão apresentados alguns resultados numéricos a fim de atestar o correto funcionamento da solução particular de Green para a equação adjunta à equação de transporte.

3 Resultados Numéricos

A fim de testar a solução particular obtida, foi utilizada $\psi_p^\dagger = S^\dagger/(\sigma - cf_0)$, uma já conhecida solução particular para o problema adjunto de transporte com fonte constante $S^\dagger$. O erro relativo às soluções da equação adjunta calculado a partir de ambas expressões de soluções particulares, para $n = 4$, 8, 16 e 32, isto é, $n_d = 8$, 16, 32 e 64, foi no máximo $O(10^{-12})$.

Para um segundo teste da formulação derivada, uma aplicação em um problema inverso de reconstrução de fontes isotrópicas de partículas [6, 11] foi apresentado. Foi considerada uma placa definida para $z \in [0{,}10]$, composta por um único material, onde $\sigma = 1$ e $c = 0.8$. O espalhamento é isotrópico. Definida no interior do domínio, é suposta a presença de uma fonte polinomial de partículas definida por

$$S(z) = 1 - \frac{2}{5}z + \frac{1}{25}z^2. \tag{22}$$

Ainda, são posicionados três detectores de partículas no interior do domínio, d_1 em $z \in [1{,}2]$, d_2 em $z \in [3{,}5; 4{,}5]$ e, por fim, d_3 em $z \in [7{,}8]$, todos com seção de choque de absorção valendo $\sigma_{d_i} = 0{,}5$, conforme [11]. Na fronteira, são assumidas condições de contorno de vácuo. Para $i = 1{,}2{,}3$, é calculada leitura r_i do i-ésimo detector através do método ADO para a equação de transporte [2] com $n = 4$, isto é, $n_d = 8$ direções discretas.

Para a reconstrução da fonte, supõe-se que a mesma pertence ao espaço gerado pelos polinômios de grau até dois com coeficientes reais. Desta forma, de acordo com [11], os coeficientes da fonte reconstruída na base polinomial são dados por

$$\hat{r}_i(s_1,s_2,s_3) = s_1\langle\psi_i^\dagger,1\rangle + s_2\langle\psi_i^\dagger,z\rangle + s_3\langle\psi_i^\dagger,z^2\rangle, \tag{23}$$

para $i = 1{,}2{,}3$, onde $\langle\cdot\,,\cdot\rangle$ representa o produto interno clássico no espaço de fase $\mu\times z$ [8], $\psi_i^\dagger$ é a solução da equação adjunta à equação de transporte com fonte $S^\dagger$ definida como a seção de choque de absorção do i-ésimo detetor, e $\hat{r}_i(s_1,s_2,s_3)$ é a medição *calculada* do i-ésimo detector. Para a reconstrução, são supostas conhecidas medições r_i, e o problema reduz-se a obtenção dos coeficientes s_j que miniminizam $||\hat{r}(s_1,s_2,s_3) - r||_2$, com $\hat{r}(s_1,s_2,s_3) = \{\hat{r}_i(s_1,s_2,s_3)\}$ e $r = \{r_i\}$.

A equação adjunta é resolvida pelo método ADO com $n = 32$, isto é, $n_d = 64$ direções discretas e, para a obtenção das soluções particulares, é utilizada a proposta apresentada neste trabalho. São geradas um milhão de reconstruções, cada uma utilizando uma nova perturbação dos dados originais. A Tabela 1 expõe o valor mínimo, o máximo, a média, assim como o desvio padrão dos erros relativos calculados na norma L^2 entre as reconstruções e a fonte original.

Tabela 1: Valor mínimo, máximo, médio e desvio padrão dos erros relativos calculados na norma L^2 entre as reconstruções e a fonte original.

Mínimo	Média	Máximo	Desvio Padrão
0,000424	0,054815	0,125005	0,024004

O erro relativo máximo obtido foi de cerca de 12,5%, entretanto, o desvio padrão do erro relativo indica que a maior parte dos resultados estão próximos do valor médio do erro relativo, cerca de 5,48%, o que representa um valor dentro da faixa de perturbações aplicada. Destaca-se que este teste supõe conhecido o espaço no qual a fonte de partículas se encontra. Em [11], para casos mais complexos, onde o espaço da reconstrução é mais pobre que o espaço no qual a fonte de partículas se encontra, técnicas de regularização foram necessárias para a obtenção de bons resultados.

4 Conclusões

Uma solução particular para a equação adjunta de transporte de partículas, em ordenadas discretas, foi derivada. Ao comparar a solução particular desenvolvida com conhecida solução particular constante do problema com fonte constante, pode-se dizer que os resultados foram muito satisfatórios, apresentando um erro menor que 10^{-12}. Adicionalmente, a solução particular foi aplicada com sucesso na resolução de um problema inverso de reconstrução de fonte isotrópica de partículas, apresentando um erro médio pequeno para diversas simulações com perturbações de até 10% nas medidas. Em [11], estão disponíveis testes mais abrangentes de reconstrução utilizando a abordagem aqui derivada para soluções particulares, corroborando os bons resultados aqui apresentados.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao CNPq e à CAPES pelo oferecimento de bolsas de Mestrado e Doutorado, e um dos autores (LBB) agradece o financiamento parcial do CNPq à este trabalho.

Referências

[1] A. Badruzzaman. Computational methods in nuclear geophysics. *Progress in Nuclear Energy*, 25:265–290, 1991. DOI: 10.1016/0149-1970(91)90013-F.

[2] L. B. Barichello. Explicit formulations for inverse radiative problems. In *Thermal Measurements and Inverse Techniques*. CRC Press, 2011. ISBN: 978-1439845554.

[3] L. B. Barichello, R. D. M. Garcia, and C. E. Siewert. Particular solutions for the discrete-ordinates method. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 64(3):219–226, 2000. DOI: 10.1016/S0022-4073(98)00146-0.

[4] K. M. Case and P. F. Zweifel. *Linear Transport Theory*. Addison-Wesley Publishing Company, 1967. ISBN: 978-0201009057.

[5] S. Chandrasekhar. *Radiative Transfer*. Dover Publications, New York, USA, 1960. ISBN: 978-0486605906.

[6] J. M. Hykes and Y. Y. Azmy. Radiation source reconstruction with known geometry and materials using the adjoint. *International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science and Engineering*, 2011.

[7] A. D. Klose and A. H. Heilscher. Optical tomography using the time-independent equation of radiative transfer - part 2: inverse model. *Journal of Quantitative Spectroscopy & Radiative Transfer*, 72:715–732, 2002. DOI: 10.1016/S0022-4073(01)00151-0.

[8] E. E. Lewis and W. F. Miller. *Computational Methods of Neutron Transport*. John Wiley & Sons, New York, USA, 1984. ISBN: 978-0471092452.

[9] T. D. McLaughlin, Sjoden G. E., and K. L. Manalo. 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.

[10] K. A. Miller and W. S. Charlton. An inverse transport approach to radiation source location for border security. *Annual Meeting of the European Safeguards Research and Development Association, Aix-en-Provence, France*, 2007.

[11] C. B. Pazinatto. Formulação ADO para o problema adjunto de transport unidimensional e aplicação em um problema inverso de reconstrução de fonte. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2015.

[12] C. B. Pazinatto, S. R. Cromianski, R. C. Barros, and L. B. Barichello. 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.

[13] J. Wood. *Computational Methods in Reactor Shielding*. Pergamon Press, 1982. ISBN: 978-0-08-028685-3.

