

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

# Simulações de Problemas de Transporte de Partículas em Geometria X-Y

por

Gustavo Alcides Lorensi

Dissertação submetida como requisito parcial  
para a obtenção do grau de  
Mestre em Matemática Aplicada

Prof. Dr. Esequia Sauter  
Orientador

Porto Alegre, janeiro de 2020.

## CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Lorensi, Gustavo Alcides

Simulações de Problemas de Transporte de Partículas em Geometria X-Y / Gustavo Alcides Lorensi.—Porto Alegre: PPGMAP da UFRGS, 2020.

89 p.: il.

Dissertação (mestrado) —Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2020.  
Orientador: Sauter, Esequia

Dissertação: Matemática Aplicada,  
Equação de transporte, formulação integral, Método de Nyström

# Simulações de Problemas de Transporte de Partículas em Geometria X-Y

por

Gustavo Alcides Lorensi

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

## Mestre em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Teoria de Transporte de Partículas

Orientador: Prof. Dr. Esequia Sauter

Banca examinadora:

Profa. Dra. Liliane Basso Barichello  
PPGMAp-UFRGS

Prof. Dr. Pedro Henrique de Almeida Konzen  
IME-UFRGS

Prof. Dr. Roberto David Martinez Garcia  
IEAv-CTA

Dissertação apresentada e aprovada em  
24 de janeiro de 2020.

Prof. Dr. Esequia Sauter  
Coordenador

# Sumário

LISTA DE FIGURAS . . . . .	vi
LISTA DE TABELAS . . . . .	viii
LISTA SIGLAS E SÍMBOLOS . . . . .	x
RESUMO . . . . .	xii
ABSTRACT . . . . .	xiii
<b>1 INTRODUÇÃO . . . . .</b>	<b>1</b>
1.1 Estrutura do trabalho . . . . .	3
<b>2 O PROBLEMA DE TRANSPORTE DE PARTÍCULAS . . . . .</b>	<b>5</b>
2.1 Formulação integro-diferencial do problema . . . . .	5
2.2 Formulação integral para o caso não refletivo . . . . .	6
2.3 Formulação integral para o caso semi-refletivo . . . . .	12
2.3.1 Espelhamento com relação a fronteira $L_1$ . . . . .	13
2.3.2 Espelhamento com relação as fronteiras $L_1$ e $L_2$ . . . . .	17
2.3.3 Espelhamento com relação as fronteiras $L_1$ , $L_2$ e $L_3$ . . . . .	19
2.3.4 Espelhamento com relação as quatro fronteiras . . . . .	23
2.4 Formulação integral da corrente para o caso sem reflexão . . . . .	26
2.5 Formulação integral da corrente para o caso com reflexão . . . . .	29
2.5.1 Corrente com espelhamento em relação a fronteira $L_1$ . . . . .	29
2.5.2 Corrente com espelhamento em relação as quatro fronteiras . . . . .	32
<b>3 FUNÇÕES DE BICKLEY-NAYLOR . . . . .</b>	<b>35</b>
3.1 Definições e computação das funções de Bickley-Naylor . . . . .	35
3.2 Interpolações das funções de Bickley-Naylor . . . . .	42

<b>4</b>	<b>METODOLOGIA E IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL</b>	<b>52</b>
4.1	Metodologia Numérica . . . . .	52
4.2	Implementação computacional . . . . .	59
<b>5</b>	<b>RESULTADOS</b> . . . . .	<b>62</b>
5.1	Tempo computacional . . . . .	63
5.2	Corrente de partículas . . . . .	72
<b>6</b>	<b>CONSIDERAÇÕES FINAIS</b> . . . . .	<b>78</b>
6.1	Contribuições deste trabalho . . . . .	78
6.2	Perspectivas . . . . .	78
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS</b> . . . . .	<b>80</b>
<b>7</b>	<b>APÊNDICE A</b> . . . . .	<b>86</b>

## Lista de Figuras

2.1	Representação geométrica do domínio $D = [0, a] \times [0, b]$ . . . . .	7
2.2	Representação geométrica das equações (2.9). . . . .	8
2.3	Alteração do intervalo de integração da equação (2.13). . . . .	10
2.4	Representação da reflexão com relação a fronteira $L_1$ , onde a $E_1$ representa o posicionamento do espelho, $\rho_1 \neq 0, \rho_2 = \rho_3 = \rho_4 = 0$ são os coeficientes de reflexão das fronteiras $L_1, L_2, L_3$ e $L_4$ , respectivamente, $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$ pontos de $D$ e $\mathbf{y}'$ reflexo de $\mathbf{y}$ através do espelho e as linhas conectando $\mathbf{y}$ e $\mathbf{y}'$ a $\mathbf{x}$ são os possíveis caminhos entre as partículas. . . . .	13
2.5	Representação geométrica das equações (2.28). . . . .	15
2.6	Representação da reflexão com relação as fronteiras $L_1$ e $L_2$ , onde $E_1$ representa o posicionamento do espelho, $\rho_1 \neq 0, \rho_2 \neq 0, \rho_3 = \rho_4 = 0$ os coeficientes de reflexão das fronteiras $L_1, L_2, L_3$ e $L_4$ , respectivamente, $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$ pontos de $D$ e $\mathbf{y}'$ reflexo de $\mathbf{y}$ através do espelho e as linhas conectando $\mathbf{y}$ e $\mathbf{y}'$ a $\mathbf{x}$ os possíveis caminhos entre as partículas. . . . .	17
2.7	Representação da reflexão com relação as fronteiras $L_1, L_2$ e $L_3$ , onde $E_1$ e $E_2$ representam os posicionamentos dos espelhos, $\rho_1 \neq 0, \rho_2 \neq 0, \rho_3 \neq 0$ e $\rho_4 = 0$ os coeficientes de reflexão das fronteiras $L_1, L_2, L_3$ e $L_4$ , respectivamente, $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$ pontos de $D$ e $\mathbf{y}'$ reflexo de $\mathbf{y}$ através do espelho e as linhas conectando $\mathbf{y}$ e $\mathbf{y}'$ a $\mathbf{x}$ os possíveis caminhos entre as partículas. . . . .	20
2.8	Representação da reflexão com relação as fronteiras $L_1, L_2$ e $L_3$ , onde $E_1$ e $E_2$ representam os posicionamentos dos espelhos, $\rho_1, \rho_2, \rho_3$ e $\rho_4$ , todos não nulos, são os coeficientes de reflexão das fronteiras $L_1, L_2, L_3$ e $L_4$ , respectivamente, $\mathbf{x}$ e $\mathbf{y}$ pontos de $D$ e $\mathbf{y}'$ reflexo de $\mathbf{y}$ através do espelho e as linhas conectando $\mathbf{y}$ e $\mathbf{y}'$ a $\mathbf{x}$ os possíveis caminhos entre as partículas. . . . .	23
3.1	Funções de Bickley-Naylor para $n = 1$ a $n = 7$ . . . . .	36
5.1	Gráfico da corrente de partículas para os problemas 1 e 2. . . . .	73
5.2	Gráfico da corrente de partículas para os problemas 3 e 4, onde a área em cinza representa a fonte $Q(\mathbf{x})$ . . . . .	74

5.3	Corrente de partículas do problema 5, onde a área em cinza representa a fonte $Q(\mathbf{x})$ . . . . .	75
5.4	Corrente de partículas do problema 6, onde a área em cinza representa a fonte $Q(\mathbf{x})$ . . . . .	76
5.5	Corrente de partículas do problema 7, onde as áreas em cinza representam a fonte $Q(\mathbf{x})$ . . . . .	77

## Lista de Tabelas

3.1	Maior erro relativo na comparação entre as diferentes representações e o valor referência para Bickley-Naylor de primeira ordem em diferentes tolerâncias. . . . .	39
3.2	Maior erro relativo na comparação entre as diferentes representações e o valor referência para Bickley-Naylor de segunda ordem em diferentes tolerâncias. . . . .	40
3.3	Maior erro relativo na comparação entre as diferentes representações e o valor referência para Bickley-Naylor de terceira ordem em diferentes tolerâncias. . . . .	41
3.4	Erros relativos entre $Ki_1(y)$ e a aproximação linear e quadrática sem a remoção de $y \ln(y)$ . . . . .	45
3.5	Erros relativos entre $Ki_1(y)$ e a aproximação linear e quadrática com a remoção de $y \ln(y)$ . . . . .	46
3.6	Erros relativos entre $Ki_2(y)$ e a aproximação linear e quadrática sem a soma de $\frac{y^2}{2} \ln(\frac{y}{2})$ . . . . .	48
3.7	Erros relativos entre $Ki_2(y)$ e a aproximação linear e quadrática com a soma de $\frac{y^2}{2} \ln(\frac{y}{2})$ . . . . .	49
3.8	Erros relativos entre $Ki_3(y)$ e a aproximação linear e quadrática sem a remoção de $y^3 \ln(\frac{y}{2})$ . . . . .	50
3.9	Erros relativos entre $Ki_3(y)$ e a aproximação linear e quadrática com a remoção de $y^3 \ln(\frac{y}{2})$ . . . . .	51
5.1	Média dos tempos de construção do núcleo $k_1$ sem remoção da singularidade para diferentes tamanhos de malha no Problema 1.	65
5.2	Média dos tempos de construção da malha de $k_1$ com remoção da singularidade para diferentes tamanhos de malhas e consumo de memória RAM. . . . .	66
5.3	Média dos tempos de cálculo do item 2a) do pseudocódigo antes e após as alterações. . . . .	68
5.4	Média dos tempos de cálculo dos termos da série de Neumann para diferentes tamanhos de malhas. . . . .	68



5.5	Tempo médio para o cálculo do Problema 1 para diferentes malhas antes e após alterações. . . . .	69
5.6	Tempo médio para o cálculo do Problema 2 para diferentes malhas antes e após alterações. . . . .	69
5.7	Porcentagem do tempo total que é gasto calculando os termos da série de Neumann para cada problema após alterações. . . . .	70
5.8	Tempo médio para o cálculo do Problema 3 para diferentes malhas antes e após alterações. . . . .	70
5.9	Tempo médio para o cálculo do Problema 4 para diferentes malhas antes e após alterações. . . . .	71
5.10	Tempo médio para o cálculo do Problema 5 para diferentes malhas antes e após alterações. . . . .	71

# LISTA SIGLAS E SÍMBOLOS

## Lista de Siglas

<i>GSL</i>	GNU Scientific Library
<i>SK<sub>N</sub></i>	Synthetic kernel
<i>GFD<sub>N</sub></i>	Green's Function Decomposition
<i>OpenMP</i>	Open Multi-Processing
<i>OpenMPI</i>	Open Message Passing Interface

## Lista de Símbolos

$Ki_1(r)$	Função de Bickley-Naylor de primeira ordem
$Ki_2(r)$	Função de Bickley-Naylor de segunda ordem
$Ki_3(r)$	Função de Bickley-Naylor de terceira ordem
$D$	Domínio bidimensional $D = [0, a] \times [0, b]$
$\mathbf{n}$	Vetor normal externo a $D$
$N_x$	Número de pontos da malha na direção $x$
$N_y$	Número de pontos da malha na direção $y$
$Q$	Fonte interna ( $\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$ )
$L_i$	Fronteira $i$ do domínio $D$
$\rho_i$	Coefficiente de reflexão com relação a fronteira $L_i$
$B_i$	Contribuição da fronteira com relação a fronteira $L_i$ ( $\text{cm}^{-2}\text{sr}^{-1}\text{s}^{-1}$ )

$\eta$	Cosseno do ângulo de elevação
$\sigma_t$	Seção de choque macroscópica total ( $\text{cm}^{-1}$ )
$\sigma_s$	Seção de choque macroscópica de espalhamento ( $\text{cm}^{-1}$ )
$\sigma_c$	Autovalor dominante do operador $L_g$ ( $\text{cm}^{-1}$ )
$J(\mathbf{x})$	Vetor corrente de partículas, $J(\mathbf{x}) = (J_1, J_2, J_3)$
$\Phi(\mathbf{x})$	Fluxo escalar ( $\text{partículas}/\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ )
$\Psi$	Fluxo angular ( $\text{cm}^{-2}\text{sr}^{-1}\text{s}^{-1}$ )
$\Omega$	Vetor direção
$\nabla$	Operador gradiente

# RESUMO

A equação de transporte é uma versão linear da equação formulada em 1872 por Ludwig Boltzmann que trata de fenômenos em dinâmica de gases rarefeitos. Devido ao seu elevado número de variáveis no espaço de fase e de sua estrutura integro-diferencial, simulações numéricas envolvendo tal equação exigem algoritmos complexos e de elevado custo computacional. Dentre as diferentes abordagens para contornar tal dificuldade está o Método de Nyström, o qual foi utilizado neste trabalho. O problema aqui tratado é a equação de transporte com espalhamento isotrópico em geometria X-Y com fronteira semi-refletiva. Assim, são apresentados a formulação integral para o fluxo e para a corrente de partículas, além de detalhes da implementação computacional para o cálculo de ambos. Também, são apresentados resultados sobre as funções de Bickley-Naylor que foram utilizados como estratégia para refinar os resultados apresentados. Algoritmos utilizados em tal problema foram otimizados e paralelizados com OpenMP e, a partir destes, resultados significativos na redução do tempo computacional foram obtidos para diversas condições.

# ABSTRACT

The transport equation is a linear version of the equation formulated in 1872 by Ludwig Boltzmann that deals with phenomena in rarefied gas dynamics. Due to its high number of variables in phase space and its integral-differential structure, numerical simulations involving such an equation require complex and high computational cost algorithms. Among the different approaches to overcome this difficulty is the Nyström Method, which was used in this work. The problem treated here is the transport equation with isotropic scattering in X-Y geometry with semi-reflective boundary. Thus, we present the integral formulation for the scalar flux and the particle current, as well as details of the computational implementation for the calculation of both. Also, methods that were used as a strategy to refine the results about the Bickley-Naylor functions are presented. Algorithms used in this problem were optimized and parallelized with OpenMP and, from these, significant results in the reduction of computational time were obtained for several conditions.

# 1 INTRODUÇÃO

A equação de transporte é uma versão linear da equação de Boltzmann, formulada em 1872 por Ludwig Boltzmann no contexto de fenômenos em dinâmica de gases rarefeitos [15], que modela problemas de transferência radiativa [19, 37] e transporte de partículas [13, 25, 33]. Esta é uma equação integro-diferencial que fornece uma descrição quantitativa da distribuição espacial, direcional, energética e temporal das partículas em um meio material. A incógnita desta equação é uma função distribuição das partículas no instante de tempo, nível de energia, ponto do domínio e direção e depende de sete variáveis independentes, sendo: três espaciais, duas direcionais, uma energética e uma temporal.

Atualmente há diversas áreas de interesse para o estudo dessa equação, como no transporte de nêutrons em reatores nucleares [35, 36], em áreas da saúde para análises tomográficas [5, 6, 29, 31, 32], para a avaliação da dosagem em tratamentos radioterápicos [26, 40, 44] e na prospecção de petróleo [8, 9, 10, 12, 42]. Juntamente com o aumento no número de aplicações e o avanço computacional, surgiram diferentes abordagens para o tratamento numérico da equação de transporte, classificadas principalmente em dois ramos: probabilística e determinística.

Na abordagem probabilística destacam-se os métodos de Monte Carlo [26, 28, 45]. A principal diferença desta abordagem está no fato das partículas serem tratadas individualmente, ao contrário do tratamento contínuo descrito na equação do transporte. Isto é, cada partícula é simulada desde o nascimento até a morte, modificando sua energia à medida que se deslocam e interagem com outras partículas [16]. Embora a eficiência deste método possa ser considerada superior quando um número suficientemente grande de partículas é computado este requer elevado tempo de processamento e consumo de memória [16].

Já na abordagem determinística duas diferentes famílias de métodos são citadas aqui: os métodos de ordenadas discretas e os métodos integrais. Os métodos de ordenadas discretas consistem em discretizar a variável angular da equação integro-diferencial, aproximando o termo integral da equação através de uma quadratura numérica e resolver o sistema de equações diferenciais resultante. Neste sentido, são levantadas duas questões: a escolha de um conjunto de direções que minimizem os erros de discretização e a seleção de um bom tratamento analítico ou numérico na variável espacial. Esses dois aspectos são cruciais para produzir métodos computacionalmente eficientes e, conseqüentemente, resultados precisos. O sistema de equações diferenciais obtido depois da discretização angular pode ser resolvido por diversas metodologias, por exemplo, Diamond Difference [8], Spectral Green Function [22], Arbitrarily High Order Transport [12], Analytical Discrete Ordinates [11], Finite Elements Method [30] e Finite Volume Method [37].

Os métodos integrais consistem em resolver a equação integral formulada a partir da equação integro-diferencial. Uma diferença entre as duas formulações é que, para o espalhamento isotrópico, a primeira tem como solução o fluxo escalar, enquanto a segunda tem como solução o fluxo angular. Na prática, isso significa que a equação integral precisa ser discretizada apenas na variável espacial, uma vantagem importante quando o objetivo é obter precisão nos resultados numéricos. Também, uma vez calculado o fluxo escalar com precisão, o fluxo angular pode ser reconstruído facilmente. Algumas metodologias da família de métodos integrais são:  $GFD_N$  [43], SKN [4], Nyström [7], Nyström Produto [41].

Os métodos de ordenadas discretas são afetados por oscilações numericamente espúrias e não físicas chamadas de efeito raio [18, 34]. Em geral, essas oscilações não são mitigadas mesmo quando a discretização é refinada, dificultando o cálculo de resultados numéricos precisos. Diferentemente dos métodos de ordenadas discretas, os métodos integrais são conhecidos por suprimirem o efeito raio, uma vez que não é necessário discretizar a variável angular. Apesar disso, esses

métodos também são conhecidos por produzirem algoritmos complexos e com elevado custo computacional. Implementações ingênuas não funcionam, pois os núcleos dos operadores integrais envolvidos possuem singularidades.

Nesse trabalho a equação do transporte em um meio com espalhamento isotrópico em geometria X-Y com fronteiras semi-refletivas foi resolvida com o método de Nyström. Esse método consiste em aplicar uma quadratura numérica no operador integral e, com o devido tratamento das singularidades do núcleo, produzir um sistema linear algébrico com resultado. O principal objetivo deste trabalho é dar continuidade aos trabalhos já desenvolvidos por Azevedo *el al.* [7] e Sauter *el al.* [41], onde o problema citado foi resolvido, mas ficaram algumas lacunas, tal como o cálculo da corrente para o caso com reflexão. Mais especificamente, esse trabalho apresenta os seguintes avanços:

1. apresenta um estudo detalhado do artigo [41];
2. apresenta a formulação matemática para a corrente de partículas em condições similares às apresentadas em [41];
3. descreve a estrutura do algoritmo utilizado pelos autores em [41], bem como a otimização realizada nesse trabalho;
4. apresenta estudo sobre as funções de Bickley-Naylor de ordens um a três, bem como formas de otimização computacional destas.

Dentre os itens acima descritos, os itens (2) e (4) são as principais contribuições deste trabalho.

## 1.1 Estrutura do trabalho

Este trabalho está dividido em seis capítulos. No primeiro capítulo, são apresentadas as motivações que levaram ao desenvolvimento da pesquisa e a re-



levância do problema. No segundo capítulo, é apresentado o problema de transporte de partículas, através da formulação integro-diferencial e em seguida a formulação integral. Neste mesmo capítulo são apresentadas as formulações integrais tanto para o fluxo de partículas quando para a corrente nos casos sem e com reflexão da fronteira.

O terceiro capítulo dedica-se ao estudo das funções de Bickley-Naylor, sendo descrita sua definição, remoção de singularidade e resultados referentes a sua aproximação. No capítulo seguinte, a metodologia numérica e a implementação computacional relacionada ao algoritmo para o cálculo do fluxo escalar e da corrente são detalhadas.

Já no quinto capítulo são apresentados os resultados referentes ao tempo computacional das rotinas implementadas e a corrente de partículas para alguns problemas. Por fim, apresenta-se as considerações finais com as contribuições deste trabalho e as perspectivas de trabalhos futuros.

## 2 O PROBLEMA DE TRANSPORTE DE PARTÍCULAS

### 2.1 Formulação integro-diferencial do problema

O problema considerado neste trabalho é dado pela equação integro-diferencial do transporte em geometria X-Y,

$$\Omega \cdot \nabla \Psi(\mathbf{x}, \Omega) + \sigma_t \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_{S^2} \Psi(\mathbf{x}, \Omega') d\Omega' + Q(\mathbf{x}), \quad (2.1a)$$

onde  $\mathbf{x} = (x_1, x_2, x_3) \in D \times \mathbb{R}$ ,  $D = [0, a] \times [0, b]$ ,  $\Omega \in S^2$  é a esfera unitária em  $\mathbb{R}^3$ , ou seja,  $\Omega = (\Omega_1, \Omega_2, \Omega_3)$ ,  $\Omega_1^2 + \Omega_2^2 + \Omega_3^2 = 1$  e  $\nabla \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = \frac{\partial \Psi}{\partial x_1} \vec{i} + \frac{\partial \Psi}{\partial x_2} \vec{j}$ . A condição de contorno semi-refletiva é dada por

$$\Psi(\mathbf{x}, \Omega) = \rho(\mathbf{x})\Psi(\mathbf{x}, \Omega') + (1 - \rho(\mathbf{x}))B(\mathbf{x}), \quad \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \quad \mathbf{x} \in \partial D \times \mathbb{R}, \quad (2.1b)$$

onde,  $\Omega' = \Omega - 2(\mathbf{n} \cdot \Omega)\mathbf{n}$  é a reflexão de  $\Omega$  na fronteira e  $\mathbf{n}$  é o vetor normal externo a  $D$ . O coeficiente de reflexão  $\rho$  é um função constante por partes dada por

$$\rho(\mathbf{x}) = \begin{cases} \rho_1, & \text{se } \mathbf{x} \in L_1 \\ \rho_2, & \text{se } \mathbf{x} \in L_2 \\ \rho_3, & \text{se } \mathbf{x} \in L_3 \\ \rho_4, & \text{se } \mathbf{x} \in L_4 \end{cases} \quad (2.2)$$

com  $0 \leq \rho_1, \rho_2, \rho_3, \rho_4 \leq 1$ . Aqui  $L_i$ ,  $1 \leq i \leq 4$ , são as quatro fronteiras do domínio definidos por  $L_1 = (x_1, 0)$ ,  $L_2 = (0, x_2)$ ,  $L_3 = (x_1, b)$  e  $L_4 = (a, x_2)$ , para  $0 \leq x_1 \leq a$  e  $0 \leq x_2 \leq b$ .

A contribuição da fronteira  $B$  também é definida por partes

$$B(\mathbf{x}) = \begin{cases} B_1(x_1), & \text{se } \mathbf{x} \in L_1, \\ B_2(x_2), & \text{se } \mathbf{x} \in L_2, \\ B_3(x_1), & \text{se } \mathbf{x} \in L_3, \\ B_4(x_2), & \text{se } \mathbf{x} \in L_4. \end{cases} \quad (2.3)$$

Ainda,  $\sigma_t$  e  $\sigma_s$  são, respectivamente, as seções de choque macroscópica total e de espalhamento, as quais são aqui tratadas como constantes e  $Q(\mathbf{x})$  é o termo fonte.

O primeiro termo do lado direito da equação (2.1a) é interpretado como a média do fluxo nas direções e é definido como o fluxo escalar, dado por

$$\Phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi} \int_{S^2} \Psi(\mathbf{x}, \Omega) d\Omega. \quad (2.4)$$

Adicionalmente, a corrente de partículas é definida por

$$J(\mathbf{x}) = \int_{S^2} \Psi(\mathbf{x}, \Omega) \Omega d\Omega. \quad (2.5)$$

Ao longo deste trabalho os coeficientes  $\sigma_t$  e  $\sigma_s$  serão medidos em  $\text{cm}^{-1}$ ,  $\Psi$  e  $B$  em  $\text{cm}^{-2}\text{sr}^{-1}\text{s}^{-1}$ ,  $\Phi$  em partículas/ $\text{cm}^{-2}\text{s}^{-1}$  e  $Q$  em  $\text{cm}^{-3}\text{s}^{-1}$ .

A proposta desse trabalho é aplicar o método de Nyström para resolver o problema descrito acima. Como esse método pertence a família de métodos integrais, é necessário escrever a sua formulação integral. Por questão de conveniência, primeiro será desenvolvida a formulação integral para o problema não refletivo, isto é, quando  $\rho(\mathbf{x}) \equiv 0$ , e na sequência, a formulação integral para o problema semi-refletivo será estabelecida.

## 2.2 Formulação integral para o caso não refletivo

Primeiramente apresenta-se o caso em que não existe a reflexão da fronteira de  $D$ , isto é, quando  $\rho(\mathbf{x}) \equiv 0$ . Nesse caso, a condição de contorno (2.1b)

assume a seguinte forma:

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = B_1(\mathbf{x}), \quad \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \quad \mathbf{x} \in L_1 \times \mathbb{R}, \end{array} \right. \quad (2.6a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = B_2(\mathbf{x}), \quad \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \quad \mathbf{x} \in L_2 \times \mathbb{R}, \end{array} \right. \quad (2.6b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = B_3(\mathbf{x}), \quad \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \quad \mathbf{x} \in L_3 \times \mathbb{R}, \end{array} \right. \quad (2.6c)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = B_4(\mathbf{x}), \quad \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \quad \mathbf{x} \in L_4 \times \mathbb{R}, \end{array} \right. \quad (2.6d)$$

onde  $L_1, L_2, L_3$  e  $L_4$  são as fronteiras do domínio  $D$ , como apresentado na Figura 2.1.

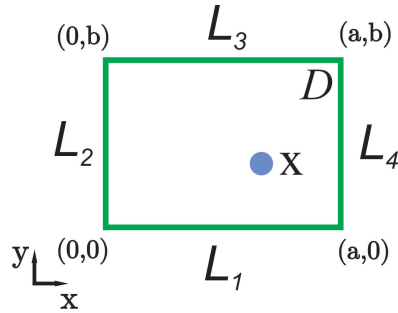


Figura 2.1: Representação geométrica do domínio  $D = [0, a] \times [0, b]$ .

Para simplificar a notação, o termo do lado direito na equação (2.1) é definido por

$$S(\mathbf{x}) = \sigma_s \Phi(\mathbf{x}) + Q(\mathbf{x}). \quad (2.7)$$

A equação (2.1) é resolvida pelo método das características (ver [37]) e o fluxo angular é calculado em termos da fonte  $S(\mathbf{x})$  da seguinte forma:

$$\Psi(\mathbf{x}, \Omega) = \Psi(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma_t s} + \int_0^{s(\mathbf{x}, \Omega)} S(\mathbf{x} - r\Omega)e^{-\sigma_t r} dr \quad (2.8)$$

onde  $s(\mathbf{x}, \Omega) = \sup_{s>0} \{ s : \mathbf{x} - s\Omega \in D \times \mathbb{R} \}$ .

Aplicando as condições de contorno (2.6) na equação (2.8), resulta que

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = B_1(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma t s} + \int_0^{s(\mathbf{x}, \Omega)} S(\mathbf{x} - r\Omega)e^{-\sigma t r} dr, \quad \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \quad \mathbf{x} - s\Omega \in L_1 \times \mathbb{R}, \quad (2.9a) \\ \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = B_2(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma t s} + \int_0^{s(\mathbf{x}, \Omega)} S(\mathbf{x} - r\Omega)e^{-\sigma t r} dr, \quad \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \quad \mathbf{x} - s\Omega \in L_2 \times \mathbb{R}, \quad (2.9b) \\ \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = B_3(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma t s} + \int_0^{s(\mathbf{x}, \Omega)} S(\mathbf{x} - r\Omega)e^{-\sigma t r} dr, \quad \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \quad \mathbf{x} - s\Omega \in L_3 \times \mathbb{R}, \quad (2.9c) \\ \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = B_4(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma t s} + \int_0^{s(\mathbf{x}, \Omega)} S(\mathbf{x} - r\Omega)e^{-\sigma t r} dr, \quad \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \quad \mathbf{x} - s\Omega \in L_4 \times \mathbb{R}. \quad (2.9d) \end{array} \right.$$

A Figura 2.2 ilustra, geometricamente, o que cada uma das equações descritas acima representa para um dado  $\mathbf{x}$  no domínio. A cor amarela representa a equação (2.9a), enquanto o vermelho (2.9b), o laranja (2.9c) e o azul (2.9d).

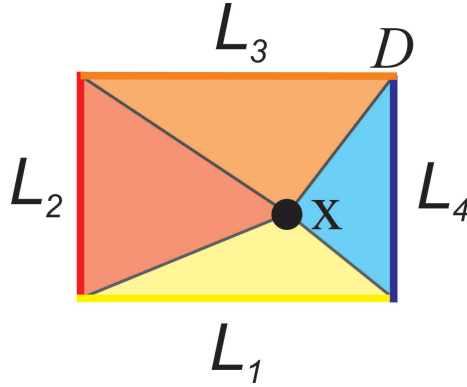


Figura 2.2: Representação geométrica das equações (2.9).

Integrando as equações (2.9) sobre a esfera unitária obtêm-se a seguinte equação:

$$\int_{S^2} \Psi(\mathbf{x}) d\Omega = \int_{S_1^2} B_1(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma t s} d\Omega + \int_{S_2^2} B_2(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma t s} d\Omega + \int_{S_3^2} B_3(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma t s} d\Omega + \int_{S_4^2} B_4(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma t s} d\Omega \quad (2.10)$$

$$+ \int_{S^2} \int_0^s S(\mathbf{x} - r\Omega)e^{-\sigma t r} dr d\Omega \quad (2.11)$$

onde os primeiros quatro termos representam a contribuição da fronteira e o último termo representa a contribuição do interior do domínio. Mais especificamente, para

cada  $\mathbf{x} \in D$ ,  $S_1^2$  representa os ângulos que tocam a fronteira  $L_1$  e  $S_2^2$ ,  $S_3^2$ ,  $S_4^2$  as fronteiras  $L_2$ ,  $L_3$  e  $L_4$ , respectivamente.

Multiplicando a equação acima por  $\frac{1}{4\pi}$  e tomando  $S^2 = S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 + S_4^2$ , obtêm-se uma representação para o fluxo escalar. Sendo esta equação reescrita como

$$\Phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi} \int_{S^2} B(\mathbf{x} - s\Omega) e^{-\sigma_t s} d\Omega + \frac{1}{4\pi} \int_{S^2} \int_0^s S(\mathbf{x} - r\Omega) e^{-\sigma_t r} dr d\Omega \quad (2.12)$$

onde  $B(\mathbf{x})$  é dado pela equação (2.3).

Tomando  $\mathbf{y} = \mathbf{x} - r\Omega$ , como  $d\mathcal{S}(\mathbf{y}) = s^2 d\Omega$  e  $d\mathbf{y} = s^2 dr d\Omega$ , é possível reescrever a equação anterior de forma que

$$\Phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}} \int_D S(\mathbf{y}) \frac{e^{-\sigma_t |\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2} d\mathbf{y} + \frac{1}{4\pi} \int_{\mathbb{R}} \int_{\partial D} B(\mathbf{y}) \frac{e^{-\sigma_t |\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2} d\mathcal{S}(\mathbf{y}). \quad (2.13)$$

Observe que  $\mathcal{S}(\mathbf{y}) = dl dy_3$ , onde  $dl$  é o elemento de comprimento ao longo de  $\partial D$ .

Devido a simetria do problema com relação à componente  $x_3$  pode-se alterar o primeiro intervalo de integração de  $\mathbb{R}$  para  $(-\infty, x_3]$  e, em consequência, dobrar o termo que está sendo integrado. As Figuras 2.3a e 2.3b ilustram os intervalos de integração antes e após a alteração, respectivamente.

Assim, o fluxo escalar pode ser escrito por

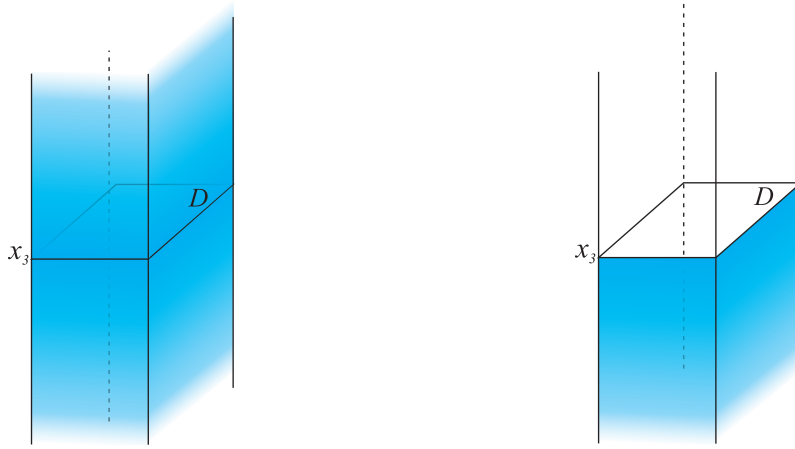
$$\Phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{x_3} \int_D S(\mathbf{y}) \frac{e^{-\sigma_t |\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2} d\mathbf{y} + \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{x_3} \int_{\partial D} B(\mathbf{y}) \frac{e^{-\sigma_t |\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2} d\mathcal{S}(\mathbf{y}). \quad (2.14)$$

Agora, introduzimos uma mudança de variável a partir do cosseno do ângulo de elevação  $\eta$ , definido por:

$$\eta = \frac{\sqrt{(x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2}}{\sqrt{(x_1 - y_1)^2 + (x_2 - y_2)^2 + (x_3 - y_3)^2}} := \frac{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \quad (2.15)$$

As seguintes identidades são calculadas:

$$\sqrt{1 - \eta^2} = \frac{\sqrt{(x_3 - y_3)^2}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \text{ e } dy_3 = \frac{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^3 d\eta}{(x_3 - y_3) |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2}. \quad (2.16)$$



(a) Intervalo de integração antes da alteração. (b) Intervalo de integração após alteração.

Figura 2.3: Alteração do intervalo de integração da equação (2.13).

Substituindo (2.15) e (2.16) em (2.14), para o primeiro termo do lado direito, obtêm-se que

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{x_3} \int_D S(\mathbf{y}) \frac{e^{-\sigma_t |\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2} dy_1 dy_2 dy_3 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^1 \int_D S(\mathbf{y}) \frac{e^{-\sigma_t \frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2}{\eta}}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2} \frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^3}{(x_3 - y_3) |\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2} dy_1 dy_2 d\eta \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_0^1 \int_D S(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t \frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2}{\eta}} \frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}{|x_3 - y_3| |\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2} dy_1 dy_2 d\eta \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_0^1 \int_D S(\mathbf{y}) \frac{e^{-\frac{\sigma_t}{\eta} |\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2}}{\sqrt{1-\eta^2} |\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2} dy_1 dy_2 d\eta. \quad (2.17)
\end{aligned}$$

Já para o segundo termo obtêm-se que

$$\begin{aligned}
\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{x_3} \int_{\partial D} B(\mathbf{y}) \frac{e^{-\sigma_t |\mathbf{x}-\mathbf{y}|}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2} dl dy_3 &= \frac{1}{2\pi} \int_0^1 \int_{\partial D} B(\mathbf{y}) \frac{e^{-\frac{\sigma_t}{\eta} |\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^2} \frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|^3}{(x_3 - y_3) |\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2} dl d\eta \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_0^1 \int_{\partial D} B(\mathbf{y}) \frac{e^{-\frac{\sigma_t}{\eta} |\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2} \frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}{|x_3 - y_3|} dl d\eta \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_0^1 \int_{\partial D} B(\mathbf{y}) \frac{e^{-\frac{\sigma_t}{\eta} |\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2} \frac{1}{\sqrt{1-\eta^2}} \eta dl d\eta \\
&= \frac{1}{2\pi} \int_0^1 \int_{\partial D} B(\mathbf{y}) \frac{\eta e^{-\frac{\sigma_t}{\eta} |\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2^2 \sqrt{1-\eta^2}} |\mathbf{x}-\mathbf{y}| dl d\eta. \quad (2.18)
\end{aligned}$$

Substituindo as equações (2.17) e (2.18) na equação (2.14), resulta que o fluxo escalar é dado por

$$\Phi(\mathbf{x}) = \frac{1}{2\pi} \int_0^1 \int_D S(\mathbf{y}) \frac{e^{-\frac{\sigma t}{\eta} |\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2}}{\sqrt{1-\eta^2} |\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2} dy_1 dy_2 d\eta + \frac{1}{2\pi} \int_0^1 \int_{\partial D} B(\mathbf{y}) \frac{\eta e^{-\frac{\sigma t}{\eta} |\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2} (\mathbf{y}-\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2^2 \sqrt{1-\eta^2}} d\ell d\eta. \quad (2.19)$$

A equação (2.19) pode ser reescrita utilizando a notação de operador, ou seja,

$$\Phi(\mathbf{x}) = (L_g S)(\mathbf{x}) + (L_b B)(\mathbf{x}), \quad (2.20)$$

onde

$$(L_g S)(\mathbf{x}) := \int_D S(\mathbf{y}) k_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{y} \text{ e } (L_b B)(\mathbf{x}) := \int_{\partial D} B(\mathbf{y}) k_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\ell. \quad (2.21)$$

Aqui, os núcleos  $k_1$  e  $k_2$  são dados por:

$$k_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) := \frac{1}{2\pi} \frac{1}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2} \int_0^1 \frac{e^{-\frac{\sigma t}{\eta} |\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2}}{\sqrt{1-\eta^2}} d\eta = \frac{1}{2\pi} \frac{\text{Ki}_1(\sigma t |\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2)}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2} \quad (2.22)$$

e

$$k_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) := \frac{1}{2\pi} \frac{(\mathbf{y}-\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2^2} \int_0^1 \frac{\eta e^{-\frac{\sigma t}{\eta} |\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2}}{\sqrt{1-\eta^2}} d\eta = \frac{1}{2\pi} \frac{(\mathbf{y}-\mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2^2} \text{Ki}_2(\sigma t |\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2), \quad (2.23)$$

onde  $\text{Ki}_1$  e  $\text{Ki}_2$  são a primeira e segunda função de Bickley-Naylor, respectivamente.

Na equação (2.21) é possível observar que o termo  $L_g S$  representa a contribuição de cada ponto do domínio  $D$  e  $L_b B$  representa a contribuição de cada ponto de  $\partial D$ , e são chamados de contribuição da fonte e da fronteira, respectivamente. A partir das equações (2.22) e (2.23) observa-se que ambos os núcleos dependem apenas da distância percorrida pela partícula, isto é,  $k_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = k_1(|\mathbf{x}-\mathbf{y}|)$  e  $k_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = k_2(|\mathbf{x}-\mathbf{y}|)$ .

Na equação (2.21),  $(L_b B)(\mathbf{x})$  é a integral de linha de um campo escalar, logo, a orientação do caminho não interfere no sinal da integral. Portanto, pode-se



escrever a função  $(L_b B)(\mathbf{x})$  como a soma de quatro termos positivos da seguinte forma:

$$\begin{aligned}
(L_b B)(\mathbf{x}) &= \frac{x_2}{2\pi} \int_0^a B_1(y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t |\mathbf{x} - (y_1, 0)|_2)}{|\mathbf{x} - (y_1, 0)|_2^2} dy_1 \\
&+ \frac{x_1}{2\pi} \int_0^b B_2(y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t |\mathbf{x} - (0, y_2)|_2)}{|\mathbf{x} - (0, y_2)|_2^2} dy_2 \\
&+ \frac{b - x_2}{2\pi} \int_0^a B_3(y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t |\mathbf{x} - (y_1, b)|_2)}{|\mathbf{x} - (y_1, b)|_2^2} dy_1 \\
&+ \frac{a - x_1}{2\pi} \int_0^b B_4(y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t |\mathbf{x} - (a, y_2)|_2)}{|\mathbf{x} - (a, y_2)|_2^2} dy_2. \tag{2.24}
\end{aligned}$$

A substituição da equação (2.7) na equação (2.20) produz uma forma compacta para escrever a formulação integral do problema dada pela equação:

$$\Phi = L_g(\sigma_s \Phi + Q) + (L_b B). \tag{2.25}$$

Devido ao fato que  $\|L_g \sigma_s\| < 1$  nos espaços  $L^2(D)$  e  $L^\infty(D)$ , quando  $\sigma_s < \sigma_c$ , onde  $\sigma_c$  é o maior autovalor de  $L_g$  em  $L^2(D)$  [7], esta última equação pode ser reescrita como

$$\Phi = (1 - \sigma_s L_g)^{-1}(L_g Q + L_b B). \tag{2.26}$$

### 2.3 Formulação integral para o caso semi-refletivo

Utilizando a técnica de espelhamento juntamente com o método das características é possível generalizar o problema para os caso onde a fronteira é semi-refletiva. Assim, primeiramente apresenta-se o caso onde apenas uma das fronteiras é semi-refletiva, e em seguida apresenta-se os casos com dois, três e quatro fronteiras semi-refletivas.

### 2.3.1 Espelhamento com relação a fronteira $L_1$

Quando apenas uma das fronteiras é semi-refletiva considera-se a condição de contorno como

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = \rho_1 \Psi(\mathbf{x}, \Omega') + (1 - \rho_1) B_1(\mathbf{x}), & \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \mathbf{x} \in L_1 \times \mathbb{R}, \quad (2.27a) \\ \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = B_2(\mathbf{x}), & \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \mathbf{x} \in L_2 \times \mathbb{R}, \quad (2.27b) \\ \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = B_3(\mathbf{x}), & \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \mathbf{x} \in L_3 \times \mathbb{R}, \quad (2.27c) \\ \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = B_4(\mathbf{x}), & \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \mathbf{x} \in L_4 \times \mathbb{R}. \quad (2.27d) \end{array} \right.$$

A Figura 2.4 ilustra como ocorre a reflexão para este caso e a linha cinza representa a fronteira onde ocorre a reflexão. Sendo possível observar que o ponto  $\mathbf{x}$  sofre influência do ponto  $\mathbf{y}$  não só através da fonte, mas também através da reflexão da fronteira  $L_1$ , a linha contínua ligando tais pontos ilustra um dos possíveis caminhos da partícula  $\mathbf{y}$  até  $\mathbf{x}$ , já o ponto  $\mathbf{y}'$  e a linha pontilhada representam o reflexo da partícula e o caminho através da reflexão.

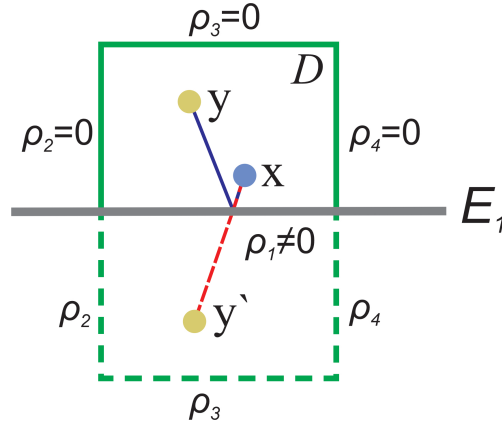


Figura 2.4: Representação da reflexão com relação a fronteira  $L_1$ , onde a  $E_1$  representa o posicionamento do espelho,  $\rho_1 \neq 0, \rho_2 = \rho_3 = \rho_4 = 0$  são os coeficientes de reflexão das fronteiras  $L_1, L_2, L_3$  e  $L_4$ , respectivamente,  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$  pontos de  $D$  e  $\mathbf{y}'$  reflexo de  $\mathbf{y}$  através do espelho e as linhas conectando  $\mathbf{y}$  e  $\mathbf{y}'$  a  $\mathbf{x}$  são os possíveis caminhos entre as partículas.

Aplicando tais condições de contorno na equação (2.8) segue que

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = \rho_1 B_2(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma_t s} + \rho_1 B_3(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma_t s} + \rho_1 B_4(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma_t s} \\ \quad + \rho_1 \int_0^{s(\mathbf{x}, \Omega)} S(\mathbf{x} - r\Omega)e^{-\sigma_t r} dr + \int_0^{s(\mathbf{x}, \Omega)} S(\mathbf{x} - r\Omega)e^{-\sigma_t r} dr \\ \quad + (1 - \rho_1)B_1(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma_t s}, \quad \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \quad \mathbf{x} - s\Omega \in L_1 \times \mathbb{R} \end{array} \right. \quad (2.28a)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = B_2(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma_t s} + \int_0^{s(\mathbf{x}, \Omega)} S(\mathbf{x} - r\Omega)e^{-\sigma_t r} dr, \quad \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \quad \mathbf{x} - s\Omega \in L_2 \times \mathbb{R} \end{array} \right. \quad (2.28b)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = B_3(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma_t s} + \int_0^{s(\mathbf{x}, \Omega)} S(\mathbf{x} - r\Omega)e^{-\sigma_t r} dr, \quad \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \quad \mathbf{x} - s\Omega \in L_3 \times \mathbb{R} \end{array} \right. \quad (2.28c)$$

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = B_4(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma_t s} + \int_0^{s(\mathbf{x}, \Omega)} S(\mathbf{x} - r\Omega)e^{-\sigma_t r} dr, \quad \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \quad \mathbf{x} - s\Omega \in L_4 \times \mathbb{R} \end{array} \right. \quad (2.28d)$$

A Figura 2.5 ilustra geometricamente o que cada uma das equações descritas acima representam para um dado  $\mathbf{x}$  no domínio  $D$ . Os três primeiros termos da equação (2.28a) representam as contribuições das fronteiras listradas  $L'_2$ ,  $L'_3$  e  $L'_4$ , as quais são reflexos de  $L_2$ ,  $L_3$  e  $L_4$ , respectivamente. O quarto termo representa a contribuição de todas as partículas da fonte que são refletidas por  $L_1$ , por exemplo, a contribuição da partícula  $\mathbf{y}$ , representada na Figura 2.4, quando é refletida por esta fronteira, é calculada como sendo um termo pertencente a região laranja listrado, representado na Figura 2.4 como partícula  $\mathbf{y}'$ . O quinto termo representa a contribuição da região em amarelo e o sexto termo a contribuição da fronteira  $L_1$ . As equações (2.28b), (2.28c) e (2.28d) representam as contribuições das partículas das regiões e fronteiras em vermelho, laranja e azul.

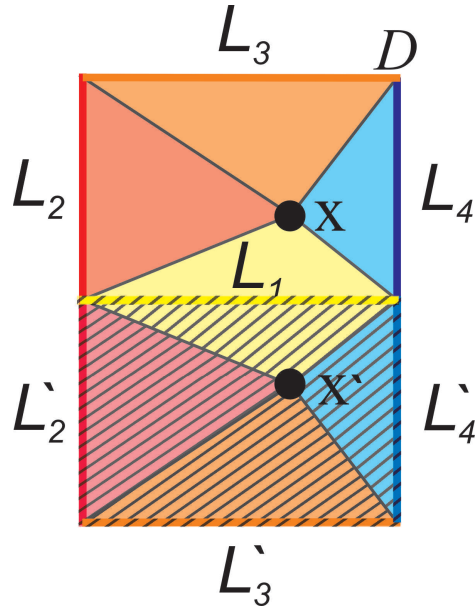


Figura 2.5: Representação geométrica das equações (2.28).

De maneira semelhante ao caso apresentado anteriormente, é possível estabelecer a representação (2.20), desde que os núcleos dos operadores sejam redefinidos consistentemente. Para o caso descrito nessa seção, a equação (2.20) é válida, desde que  $L_g$  possua o seguinte núcleo:

$$k_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{2\pi} \frac{\text{Ki}_1(\sigma_t r_{0000})}{r_{0000}} + \frac{1}{2\pi} \rho_1 \frac{\text{Ki}_1(\sigma_t r_{0100})}{r_{0100}}, \quad (2.29)$$

onde

$$r_{0000} = |\mathbf{x} - (y_1, y_2)|_2 \quad (2.30a)$$

$$r_{0100} = |\mathbf{x} - (y_1, -y_2)|_2 \quad (2.30b)$$

e a função  $(L_b B)(\mathbf{x})$  seja definida por:

$$\begin{aligned}
(L_b B)(\mathbf{x}) = & \frac{x_2}{2\pi} \int_0^a (1 - \rho_1) B_1(y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{10})}{r_{10}^2} dy_1 + \frac{x_1}{2\pi} \int_0^b B_2(y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{20})}{r_{20}^2} dy_2 \\
& + \frac{b - x_2}{2\pi} \int_0^a B_3(y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{30})}{r_{30}^2} dy_1 + \frac{a - x_1}{2\pi} \int_0^b B_4(y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{40})}{r_{40}^2} dy_2 \\
& + \rho_1 \left( \frac{x_2 + b}{2\pi} \int_0^a B_3(y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{3(-1)})}{r_{3(-1)}^2} dy_1 + \frac{x_1}{2\pi} \int_{-b}^0 B_2(-y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{20})}{r_{20}^2} dy_2 \right. \\
& \left. + \frac{a - x_1}{2\pi} \int_{-b}^0 B_4(-y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{40})}{r_{40}^2} dy_2 \right), \tag{2.31}
\end{aligned}$$

onde

$$r_{10} = |\mathbf{x} - (y_1, 0)|_2, \tag{2.32a}$$

$$r_{20} = |\mathbf{x} - (0, y_2)|_2, \tag{2.32b}$$

$$r_{30} = |\mathbf{x} - (y_1, b)|_2, \tag{2.32c}$$

$$r_{40} = |\mathbf{x} - (a, y_2)|_2, \tag{2.32d}$$

$$r_{3(-1)} = |\mathbf{x} - (y_1, -b)|_2. \tag{2.32e}$$

No núcleo  $k_1$ , equação (2.29), o primeiro termo representa a contribuição do interior do domínio  $D$  enquanto que o segundo termo representa a contribuição da reflexão do domínio  $D$  com relação a fronteira  $L_1$ , o qual possui coeficiente de reflexão  $\rho_1$ .

Na função  $(L_b B)(\mathbf{x})$ , equação (2.25), é possível observar que o primeiro termo representa a contribuição da fronteira onde está ocorrendo a reflexão e que tal termo é afetado negativamente pelo seu próprio coeficiente de reflexão  $\rho_1$ . Já os últimos três termos do operador, os quais estão multiplicados por  $\rho_1$ , representam as contribuições dos reflexos, representadas pelas linhas verdes pontilhadas da Figura 2.4.

### 2.3.2 Espelhamento com relação as fronteiras $L_1$ e $L_2$

Para o caso onde duas fronteiras são semi-refletivas, pode-se tratar como o espelhamento de uma das fronteiras do caso anterior, assim como ilustrado pela Figura 2.6.

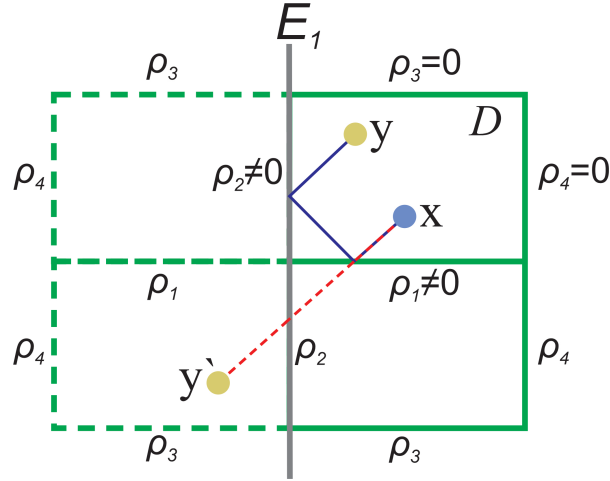


Figura 2.6: Representação da reflexão com relação as fronteiras  $L_1$  e  $L_2$ , onde  $E_1$  representa o posicionamento do espelho,  $\rho_1 \neq 0, \rho_2 \neq 0, \rho_3 = \rho_4 = 0$  os coeficientes de reflexão das fronteiras  $L_1, L_2, L_3$  e  $L_4$ , respectivamente,  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$  pontos de  $D$  e  $\mathbf{y}'$  reflexo de  $\mathbf{y}$  através do espelho e as linhas conectando  $\mathbf{y}$  e  $\mathbf{y}'$  a  $\mathbf{x}$  os possíveis caminhos entre as partículas.

Aplicando as condições de contorno dada pelas equações

$$\left\{ \begin{array}{ll} \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = \rho_1 \Psi(\mathbf{x}, \Omega') + (1 - \rho_1) B_1(\mathbf{x}), & \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \mathbf{x} \in L_1 \times \mathbb{R}, \quad (2.33a) \\ \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = \rho_2 \Psi(\mathbf{x}, \Omega') + (1 - \rho_2) B_2(\mathbf{x}), & \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \mathbf{x} \in L_2 \times \mathbb{R}, \quad (2.33b) \\ \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = B_3(\mathbf{x}), & \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \mathbf{x} \in L_3 \times \mathbb{R}, \quad (2.33c) \\ \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = B_4(\mathbf{x}), & \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \mathbf{x} \in L_4 \times \mathbb{R}, \quad (2.33d) \end{array} \right.$$

na equação (2.8) resulta que

$$\left\{ \begin{array}{l} \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = \rho_1(1 - \rho_2)B_2(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma_t s} + \rho_1 B_3(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma_t s} + \rho_1 B_4(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma_t s} \\ \quad + \rho_1 \int_0^{s(\mathbf{x}, \Omega)} S(\mathbf{x} - r\Omega)e^{-\sigma_t r} dr + \int_0^{s(\mathbf{x}, \Omega)} S(\mathbf{x} - r\Omega)e^{-\sigma_t r} dr \\ \quad + (1 - \rho_1)B_1(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma_t s} + \rho_1 \rho_2 B_3(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma_t s} + \rho_1 \rho_2 B_4(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma_t s} \\ \quad + \rho_1 \rho_2 \int_0^{s(\mathbf{x}, \Omega)} S(\mathbf{x} - r\Omega)e^{-\sigma_t r} dr, \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \mathbf{x} - s\Omega \in L_1 \times \mathbb{R}, \quad (2.34a) \\ \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = \rho_2(1 - \rho_1)B_1(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma_t s} + \rho_2 B_3(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma_t s} + \rho_2 B_4(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma_t s} \\ \quad + \rho_2 \int_0^{s(\mathbf{x}, \Omega)} S(\mathbf{x} - r\Omega)e^{-\sigma_t r} dr + \int_0^{s(\mathbf{x}, \Omega)} S(\mathbf{x} - r\Omega)e^{-\sigma_t r} dr \\ \quad + (1 - \rho_2)B_2(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma_t s} + \rho_2 \rho_1 B_3(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma_t s} + \rho_1 \rho_2 B_4(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma_t s} \\ \quad + \rho_1 \rho_2 \int_0^{s(\mathbf{x}, \Omega)} S(\mathbf{x} - r\Omega)e^{-\sigma_t r} dr, \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \mathbf{x} - s\Omega \in L_2 \times \mathbb{R}, \quad (2.34b) \\ \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = B_3(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma_t s} + \int_0^{s(\mathbf{x}, \Omega)} S(\mathbf{x} - r\Omega)e^{-\sigma_t r} dr, \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \mathbf{x} - s\Omega \in L_3 \times \mathbb{R}, \quad (2.34c) \\ \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = B_4(\mathbf{x} - s\Omega)e^{-\sigma_t s} + \int_0^{s(\mathbf{x}, \Omega)} S(\mathbf{x} - r\Omega)e^{-\sigma_t r} dr, \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \mathbf{x} - s\Omega \in L_4 \times \mathbb{R}. \quad (2.34d) \end{array} \right.$$

Integrando as equações anteriores sobre a esfera unitária juntamente com os métodos descritos anteriormente é possível obter a representação (2.20) para este caso, com o seguinte núcleo  $k_1$  e função  $(L_b B)(\mathbf{x})$ , respectivamente:

$$k_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \frac{1}{2\pi} \left( \frac{\text{Ki}_1(\sigma_t r_{0000})}{r_{0000}} + \rho_1 \frac{\text{Ki}_1(\sigma_t r_{0100})}{r_{0100}} + \rho_2 \frac{\text{Ki}_1(\sigma_t r_{1000})}{r_{1000}} + \rho_1 \rho_2 \frac{\text{Ki}_1(\sigma_t r_{1100})}{r_{1100}} \right) \quad (2.35)$$

onde  $r_{0000}, r_{0100}$  são dados pelas equações (2.30) e  $r_{1000} = |\mathbf{x} - (-y_1, y_2)|_2$  e  $r_{1100} = |\mathbf{x} - (-y_1, -y_2)|_2$ .

$$\begin{aligned}
(L_b B)(\mathbf{x}) = & \frac{x_2}{2\pi} \int_0^a (1 - \rho_1) B_1(y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{10})}{r_{10}^2} dy_1 + \frac{x_2}{2\pi} \rho_2 \int_{-a}^0 (1 - \rho_1) B_1(-y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{10})}{r_{10}^2} dy_1 \\
& + \frac{x_1}{2\pi} \int_0^b (1 - \rho_2) B_2(y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{20})}{r_{20}^2} dy_2 + \frac{x_1}{2\pi} \rho_1 \int_{-b}^0 (1 - \rho_2) B_2(-y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{20})}{r_{20}^2} dy_2 \\
& + \frac{x_2 + b}{2\pi} \rho_1 \int_0^a B_3(y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{3(-)})}{r_{3(-)}^2} dy_1 + \frac{x_2 + b}{2\pi} \rho_1 \rho_2 \int_{-a}^0 B_3(-y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{3(-)})}{r_{3(-)}^2} dy_1 \\
& + \frac{b - x_2}{2\pi} \int_0^a B_3(y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{30})}{r_{30}^2} dy_1 + \frac{b - x_2}{2\pi} \rho_2 \int_{-a}^0 B_3(-y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{30})}{r_{30}^2} dy_1 \\
& + \frac{x_1 + a}{2\pi} \rho_2 \int_0^b B_4(y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{4(-)})}{r_{4(-)}^2} dy_2 + \frac{x_1 + a}{2\pi} \rho_1 \rho_2 \int_{-b}^0 B_4(-y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{4(-)})}{r_{4(-)}^2} dy_2 \\
& + \frac{a - x_1}{2\pi} \int_0^b B_4(y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{40})}{r_{40}^2} dy_2 + \frac{a - x_1}{2\pi} \rho_1 \int_{-b}^0 B_4(-y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{40})}{r_{40}^2} dy_2 \quad (2.36)
\end{aligned}$$

onde os  $r'$ s são dados pelas equações (2.32) juntamente com  $r_{4(-)} = |\mathbf{x} - (-a, y_2)|_2$ .

### 2.3.3 Espelhamento com relação as fronteiras $L_1$ , $L_2$ e $L_3$

A Figura 2.7 representa o caso onde as três fronteiras do domínio são semi-refletivas.

Para reflexão em três fronteiras do domínio, considera-se as condições de contorno como

$$\left\{ \begin{aligned} \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = \rho_1 \Psi(\mathbf{x}, \Omega') + (1 - \rho_1) B_1(\mathbf{x}), & \quad \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \quad \mathbf{x} \in L_1 \times \mathbb{R} & (2.37a) \end{aligned} \right.$$

$$\left\{ \begin{aligned} \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = \rho_2 \Psi(\mathbf{x}, \Omega') + (1 - \rho_2) B_2(\mathbf{x}), & \quad \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \quad \mathbf{x} \in L_2 \times \mathbb{R} & (2.37b) \end{aligned} \right.$$

$$\left\{ \begin{aligned} \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = \rho_3 \Psi(\mathbf{x}, \Omega') + (1 - \rho_3) B_3(\mathbf{x}), & \quad \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \quad \mathbf{x} \in L_3 \times \mathbb{R} & (2.37c) \end{aligned} \right.$$

$$\left\{ \begin{aligned} \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = B_4(\mathbf{x}), & \quad \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \quad \mathbf{x} \in L_4 \times \mathbb{R} & (2.37d) \end{aligned} \right.$$

é possível escrever o núcleo do operador  $L_g$  como

$$\begin{aligned}
k_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = & \frac{1}{2\pi} \sum_{j=0}^{+\infty} (\rho_1 \rho_3)^j \left[ \frac{\text{Ki}_1(\sigma_t r_{00j0})}{r_{00j0}} + \rho_2 \frac{\text{Ki}_1(\sigma_t r_{01j0})}{r_{01j0}} + \rho_1 \frac{\text{Ki}_1(\sigma_t r_{10j0})}{r_{10j0}} + \rho_1 \rho_2 \frac{\text{Ki}_1(\sigma_t r_{11j0})}{r_{11j0}} \right] \\
& + \frac{1}{2\pi} \sum_{j=-\infty}^{-1} (\rho_1 \rho_3)^{-j} \left[ \frac{\text{Ki}_1(\sigma_t r_{00j0})}{r_{00j0}} + \rho_2 \frac{\text{Ki}_1(\sigma_t r_{01j0})}{r_{01j0}} + \rho_1^{-1} \frac{\text{Ki}_1(\sigma_t r_{10j0})}{r_{10j0}} + \rho_1^{-1} \rho_2 \frac{\text{Ki}_1(\sigma_t r_{11j0})}{r_{11j0}} \right] \quad (2.38)
\end{aligned}$$



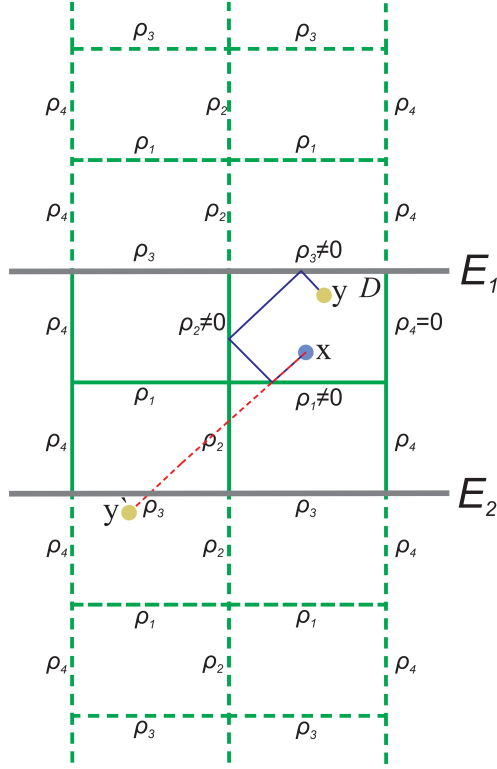


Figura 2.7: Representação da reflexão com relação as fronteiras  $L_1$ ,  $L_2$  e  $L_3$ , onde  $E_1$  e  $E_2$  representam os posicionamentos dos espelhos,  $\rho_1 \neq 0$ ,  $\rho_2 \neq 0$ ,  $\rho_3 \neq 0$  e  $\rho_4 = 0$  os coeficientes de reflexão das fronteiras  $L_1$ ,  $L_2$ ,  $L_3$  e  $L_4$ , respectivamente,  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$  pontos de  $D$  e  $\mathbf{y}'$  reflexo de  $\mathbf{y}$  através do espelho e as linhas conectando  $\mathbf{y}$  e  $\mathbf{y}'$  a  $\mathbf{x}$  os possíveis caminhos entre as partículas.

onde os  $r$ 's são dados pelas seguintes equações

$$r_{00j0} = |\mathbf{x} - (y_1, y_2 - 2jb)|_2, \quad j \in \mathbb{Z}, \quad (2.39a)$$

$$r_{01j0} = |\mathbf{x} - (y_1, -y_2 - 2jb)|_2, \quad j \in \mathbb{Z}, \quad (2.39b)$$

$$r_{10j0} = |\mathbf{x} - (-y_1, y_2 - 2jb)|_2, \quad j \in \mathbb{Z}, \quad (2.39c)$$

$$r_{11j0} = |\mathbf{x} - (-y_1, -y_2 - 2jb)|_2, \quad j \in \mathbb{Z}. \quad (2.39d)$$

Da equação (2.38) observa-se que o primeiro somatório representa as contribuições dos domínios entre os espelhos e dos reflexos do domínio abaixo do espelho  $E_2$ , enquanto que o segundo somatório representa as contribuições dos reflexos acima do espelho  $E_1$  da Figura 2.7. A função  $(L_b B)(\mathbf{x})$  pode ser escrito como  $(L_b B)(\mathbf{x}) = \mathcal{B}_1(\mathbf{x}) + \mathcal{B}_2(\mathbf{x}) + \mathcal{B}_3(\mathbf{x}) + \mathcal{B}_4(\mathbf{x})$ , onde os  $\mathcal{B}$ 's são dados pelas equações

(2.40), (2.43), (2.44) e (2.45), respectivamente e os  $r$ 's são dados pelas equações (2.46).

$$\mathcal{B}_1(\mathbf{x}) = \sum_{k=-\infty}^0 \frac{x_2 - 2kb}{2\pi} \rho_1^{|k|} \rho_3^{|k|} \left[ \int_0^a (1 - \rho_1) B_1(y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{1k})}{r_{1k}^2} dy_1 \right. \\ \left. + \rho_2 \int_{-a}^0 (1 - \rho_1) B_1(-y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{1k})}{r_{1k}^2} dy_1 \right] \quad (2.40)$$

$$+ \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{2kb - x_2}{2\pi} \rho_1^{|k|-1} \rho_3^{|k|} \left[ \int_0^a (1 - \rho_1) B_1(y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{1k})}{r_{1k}^2} dy_1 \right. \quad (2.41)$$

$$\left. + \rho_2 \int_{-a}^0 (1 - \rho_1) B_1(-y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{1k})}{r_{1k}^2} dy_1 \right] \quad (2.42)$$

$$\mathcal{B}_2(\mathbf{x}) = \frac{x_1}{2\pi} \left[ \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \rho_1^{|i|} \rho_3^{|i|} \int_{2ib}^{(2i+1)b} (1 - \rho_2) B_2(y_2 - 2ib) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{20})}{r_{20}^2} dy_2 \right. \\ + \sum_{i=1}^{+\infty} \rho_1^{|i|-1} \rho_3^{|i|} \int_{(2i-1)b}^{2ib} (1 - \rho_2) B_2(2ib - y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{20})}{r_{20}^2} dy_2 \\ \left. + \sum_{i=-\infty}^0 \rho_1^{|i|+1} \rho_3^{|i|} \int_{(2i-1)b}^{2ib} (1 - \rho_2) B_2(2ib - y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{20})}{r_{20}^2} dy_2 \right] \quad (2.43)$$

$$\mathcal{B}_3(\mathbf{x}) = \sum_{k=-\infty}^{-1} \frac{x_2 - (2k+1)b}{2\pi} \rho_1^{|k|} \rho_3^{|k|-1} \left[ \int_0^a (1 - \rho_3) B_3(y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{3k})}{r_{3k}^2} dy_1 \right. \\ \left. + \rho_2 \int_{-a}^0 (1 - \rho_3) B_3(-y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{3k})}{r_{3k}^2} dy_1 \right] \\ + \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(2k+1)b - x_2}{2\pi} \rho_1^{|k|} \rho_3^{|k|} \left[ \int_0^a (1 - \rho_3) B_3(y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{3k})}{r_{3k}^2} dy_1 \right. \\ \left. + \rho_2 \int_{-a}^0 (1 - \rho_3) B_3(-y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{3k})}{r_{3k}^2} dy_1 \right] \quad (2.44)$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}_4(\mathbf{x}) = & \frac{x_1 + a}{2\pi} \rho_2 \left[ \sum_{i=-\infty}^{\infty} \rho_1^{|i|} \rho_3^{|i|} \int_{2ib}^{(2i+1)b} B_4(y_2 - 2ib) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{4(-1)})}{r_{4(-1)}^2} dy_2 \right. \\
& + \sum_{i=1}^{+\infty} \rho_1^{|i|-1} \rho_3^{|i|} \int_{(2i-1)b}^{2ib} B_4(2ib - y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{4(-1)})}{r_{4(-1)}^2} dy_2 \\
& + \left. \sum_{i=-\infty}^0 \rho_1^{|i|+1} \rho_3^{|i|} \int_{(2i-1)b}^{2ib} B_4(2ib - y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{4(-1)})}{r_{4(-1)}^2} dy_2 \right] \\
& + \frac{a - x_1}{2\pi} \left[ \sum_{i=-\infty}^{\infty} \rho_1^{|i|} \rho_3^{|i|} \int_{2ib}^{(2i+1)b} B_4(y_2 - 2ib) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{40})}{r_{40}^2} dy_2 \right. \\
& + \sum_{i=1}^{+\infty} \rho_1^{|i|-1} \rho_3^{|i|} \int_{(2i-1)b}^{2ib} B_4(2ib - y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{40})}{r_{40}^2} dy_2 \\
& + \left. \sum_{i=-\infty}^0 \rho_1^{|i|+1} \rho_3^{|i|} \int_{(2i-1)b}^{2ib} B_4(2ib - y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{40})}{r_{40}^2} dy_2 \right] \tag{2.45}
\end{aligned}$$

$$r_{1k} = |\mathbf{x} - (y_1, 2kb)|_2 \tag{2.46a}$$

$$r_{2k} = |\mathbf{x} - (2ka, y_2)|_2 \tag{2.46b}$$

$$r_{3k} = |\mathbf{x} - (y_1, (2k + 1)b)|_2 \tag{2.46c}$$

$$r_{4k} = |\mathbf{x} - ((2k + 1)a, y_2)|_2. \tag{2.46d}$$

Quanto aos termos que compõem  $(L_b B)(\mathbf{x})$ , cada um deles representa a contribuição das reflexões de uma das fronteiras do domínio  $D$ , ou seja,  $\mathcal{B}_1$  representa todas as contribuições das reflexões da fronteira  $L_1$  e, analogamente, para os termos  $\mathcal{B}_2$ ,  $\mathcal{B}_3$  e  $\mathcal{B}_4$ .

### 2.3.4 Espelhamento com relação as quatro fronteiras

Para a generalização do problema, ou seja, onde todas as fronteiras são refletivas, as condições de contorno são dadas por

$$\begin{cases} \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = \rho_1 \Psi(\mathbf{x}, \Omega') + (1 - \rho_1) B_1(\mathbf{x}), & \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \mathbf{x} \in L_1 \times \mathbb{R} & (2.47a) \\ \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = \rho_2 \Psi(\mathbf{x}, \Omega') + (1 - \rho_2) B_2(\mathbf{x}), & \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \mathbf{x} \in L_2 \times \mathbb{R} & (2.47b) \\ \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = \rho_3 \Psi(\mathbf{x}, \Omega') + (1 - \rho_3) B_3(\mathbf{x}), & \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \mathbf{x} \in L_3 \times \mathbb{R} & (2.47c) \\ \Psi(\mathbf{x}, \Omega) = \rho_4 \Psi(\mathbf{x}, \Omega') + (1 - \rho_4) B_4(\mathbf{x}), & \mathbf{n} \cdot \Omega < 0, \mathbf{x} \in L_4 \times \mathbb{R}, & (2.47d) \end{cases}$$

e a Figura 2.8 representa tal caso.

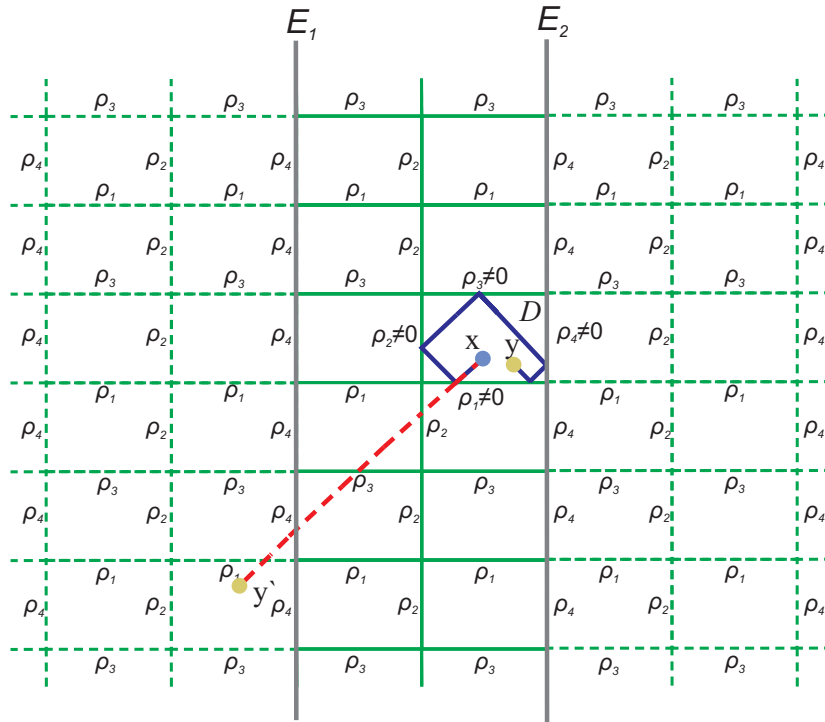


Figura 2.8: Representação da reflexão com relação as fronteiras  $L_1$ ,  $L_2$  e  $L_3$ , onde  $E_1$  e  $E_2$  representam os posicionamentos dos espelhos,  $\rho_1, \rho_2, \rho_3$  e  $\rho_4$ , todos não nulos, são os coeficientes de reflexão das fronteiras  $L_1, L_2, L_3$  e  $L_4$ , respectivamente,  $\mathbf{x}$  e  $\mathbf{y}$  pontos de  $D$  e  $\mathbf{y}'$  reflexo de  $\mathbf{y}$  através do espelho e as linhas conectando  $\mathbf{y}$  e  $\mathbf{y}'$  a  $\mathbf{x}$  os possíveis caminhos entre as partículas.

Neste caso o núcleo  $k_1$  é dado por

$$\begin{aligned}
k_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= \frac{1}{2\pi} \sum_{k=0}^{+\infty} \sum_{j=0}^{+\infty} \sum_{i=0}^1 \sum_{l=0}^1 (\rho_1 \rho_3)^j (\rho_2 \rho_4)^k \rho_1^i \rho_2^l \frac{\text{Ki}_1(\sigma_t r_{iljk})}{r_{iljk}} \\
&+ \frac{1}{2\pi} \sum_{k=0}^{+\infty} \sum_{j=-\infty}^{-1} \sum_{i=0}^1 \sum_{l=0}^1 \rho_1^{-1-j} \rho_3^{-j} (\rho_2 \rho_4)^k \rho_1^{1-i} \rho_2^l \frac{\text{Ki}_1(\sigma_t r_{iljk})}{r_{iljk}} \\
&+ \frac{1}{2\pi} \sum_{k=-\infty}^{-1} \sum_{j=0}^{+\infty} \sum_{i=0}^1 \sum_{l=0}^1 (\rho_1 \rho_3)^j \rho_2^{-1-k} \rho_4^{-k} \rho_1^i \rho_2^{1-l} \frac{\text{Ki}_1(\sigma_t r_{iljk})}{r_{iljk}} \\
&+ \frac{1}{2\pi} \sum_{k=-\infty}^{-1} \sum_{j=-\infty}^{-1} \sum_{i=0}^1 \sum_{l=0}^1 \rho_1^{-1-j} \rho_3^{-j} \rho_2^{-1-k} \rho_4^{-k} \rho_1^{1-i} \rho_2^{1-l} \frac{\text{Ki}_1(\sigma_t r_{iljk})}{r_{iljk}}, \quad (2.48)
\end{aligned}$$

onde

$$r_{00jk} = |\mathbf{x} - (y_1 - 2ka, y_2 - 2jb)|_2, \quad j, k \in \mathbb{Z}, \quad (2.49a)$$

$$r_{01jk} = |\mathbf{x} - (y_1 - 2ka, -y_2 - 2jb)|_2, \quad j, k \in \mathbb{Z}, \quad (2.49b)$$

$$r_{10jk} = |\mathbf{x} - (-y_1 - 2ka, y_2 - 2jb)|_2, \quad j, k \in \mathbb{Z}, \quad (2.49c)$$

$$r_{11jk} = |\mathbf{x} - (-y_1 - 2ka, -y_2 - 2jb)|_2, \quad j, k \in \mathbb{Z}. \quad (2.49d)$$

Já as contribuições da fronteira podem ser escritas como

$$(L_b B)(\mathbf{x}) := \mathcal{B}_1 + \mathcal{B}_2 + \mathcal{B}_3 + \mathcal{B}_4 \quad (2.50)$$

onde

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}_1 &= \sum_{k=-\infty}^0 \frac{x_2 - 2kb}{2\pi} \rho_1^{|k|} \rho_3^{|k|} \left[ \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \rho_2^{|i|} \rho_4^{|i|} \int_{2ia}^{(2i+1)a} (1 - \rho_1) B_1(y_1 - 2ia) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{1k})}{r_{1k}^2} dy_1 \right. \\
&+ \sum_{i=-\infty}^0 \rho_2^{|i|+1} \rho_4^{|i|} \int_{(2i-1)a}^{2ia} (1 - \rho_1) B_1(2ia - y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{1k})}{r_{1k}^2} dy_1 \\
&+ \left. \sum_{i=1}^{+\infty} \rho_2^{|i|-1} \rho_4^{|i|} \int_{(2i-1)a}^{2ia} (1 - \rho_1) B_1(2ia - y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{1k})}{r_{1k}^2} dy_1 \right] \\
&+ \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{2kb - x_2}{2\pi} \rho_1^{|k|-1} \rho_3^{|k|} \left[ \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \rho_2^{|i|} \rho_4^{|i|} \int_{2ia}^{(2i+1)a} (1 - \rho_1) B_1(y_1 - 2ia) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{1k})}{r_{1k}^2} dy_1 \right. \\
&+ \sum_{i=-\infty}^0 \rho_2^{|i|+1} \rho_4^{|i|} \int_{(2i-1)a}^{2ia} (1 - \rho_1) B_1(2ia - y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{1k})}{r_{1k}^2} dy_1 \\
&+ \left. \sum_{i=1}^{+\infty} \rho_2^{|i|-1} \rho_4^{|i|} \int_{(2i-1)a}^{2ia} (1 - \rho_1) B_1(2ia - y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{1k})}{r_{1k}^2} dy_1 \right], \quad (2.51)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}_2 = & \sum_{k=-\infty}^0 \frac{x_1 - 2ka}{2\pi} \rho_2^{|k|} \rho_4^{|k|} \left[ \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \rho_1^{|i|} \rho_3^{|i|} \int_{2ib}^{(2i+1)b} (1 - \rho_2) B_2(y_2 - 2ib) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{2k})}{r_{2k}^2} dy_2 \right. \\
& + \sum_{i=1}^{+\infty} \rho_1^{|i|-1} \rho_3^{|i|} \int_{(2i-1)b}^{2ib} (1 - \rho_2) B_2(2ib - y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{2k})}{r_{2k}^2} dy_2 \\
& + \left. \sum_{i=-\infty}^0 \rho_1^{|i|+1} \rho_3^{|i|} \int_{(2i-1)b}^{2ib} (1 - \rho_2) B_2(2ib - y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{2k})}{r_{2k}^2} dy_2 \right] \\
& + \sum_{k=1}^{+\infty} \frac{2ka - x_1}{2\pi} \rho_2^{|k|-1} \rho_4^{|k|} \left[ \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \rho_1^{|i|} \rho_3^{|i|} \int_{2ib}^{(2i+1)b} (1 - \rho_2) B_2(y_2 - 2ib) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{2k})}{r_{2k}^2} dy_2 \right. \\
& + \sum_{i=1}^{+\infty} \rho_1^{|i|-1} \rho_3^{|i|} \int_{(2i-1)b}^{2ib} (1 - \rho_2) B_2(2ib - y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{2k})}{r_{2k}^2} dy_2 \\
& + \left. \sum_{i=-\infty}^0 \rho_1^{|i|+1} \rho_3^{|i|} \int_{(2i-1)b}^{2ib} (1 - \rho_2) B_2(2ib - y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{2k})}{r_{2k}^2} dy_2 \right], \tag{2.52}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}_3 = & \sum_{k=-\infty}^{-1} \frac{x_2 - (2k+1)b}{2\pi} \rho_1^{|k|} \rho_3^{|k|-1} \left[ \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \rho_2^{|i|} \rho_4^{|i|} \int_{2ia}^{(2i+1)a} (1 - \rho_3) B_3(y_1 - 2ia) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{3k})}{r_{3k}^2} dy_1 \right. \\
& + \sum_{i=-\infty}^0 \rho_2^{|i|+1} \rho_4^{|i|} \int_{(2i-1)a}^{2ia} (1 - \rho_3) B_3(2ia - y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{3k})}{r_{3k}^2} dy_1 \\
& + \left. \sum_{i=1}^{+\infty} \rho_2^{|i|-1} \rho_4^{|i|} \int_{(2i-1)a}^{2ia} (1 - \rho_3) B_3(2ia - y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{3k})}{r_{3k}^2} dy_1 \right] \\
& + \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(2k+1)b - x_2}{2\pi} \rho_1^{|k|} \rho_3^{|k|} \left[ \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \rho_2^{|i|} \rho_4^{|i|} \int_{2ia}^{(2i+1)a} (1 - \rho_3) B_3(y_1 - 2ia) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{3k})}{r_{3k}^2} dy_1 \right. \\
& + \sum_{i=-\infty}^0 \rho_2^{|i|+1} \rho_4^{|i|} \int_{(2i-1)a}^{2ia} (1 - \rho_3) B_3(2ia - y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{3k})}{r_{3k}^2} dy_1 \\
& + \left. \sum_{i=1}^{+\infty} \rho_2^{|i|-1} \rho_4^{|i|} \int_{(2i-1)a}^{2ia} (1 - \rho_3) B_3(2ia - y_1) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{3k})}{r_{3k}^2} dy_1 \right], \tag{2.53}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}_4 = & \sum_{k=-\infty}^{-1} \frac{x_1 - (2k+1)a}{2\pi} \rho_2^{|k|} \rho_4^{|k|-1} \left[ \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \rho_1^{|i|} \rho_3^{|i|} \int_{2ib}^{(2i+1)b} (1-\rho_4) B_4(y_2 - 2ib) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{4k})}{r_{4k}^2} dy_2 \right. \\
& + \sum_{i=1}^{+\infty} \rho_1^{|i|-1} \rho_3^{|i|} \int_{(2i-1)b}^{2ib} (1-\rho_4) B_4(2ib - y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{4k})}{r_{4k}^2} dy_2 \\
& + \left. \sum_{i=-\infty}^0 \rho_1^{|i|+1} \rho_3^{|i|} \int_{(2i-1)b}^{2ib} (1-\rho_4) B_4(2ib - y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{4k})}{r_{4k}^2} dy_2 \right] \\
& + \sum_{k=0}^{+\infty} \frac{(2k+1)a - x_1}{2\pi} \rho_2^{|k|} \rho_4^{|k|} \left[ \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \rho_1^{|i|} \rho_3^{|i|} \int_{2ib}^{(2i+1)b} (1-\rho_4) B_4(y_2 - 2ib) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{4k})}{r_{4k}^2} dy_2 \right. \\
& + \sum_{i=1}^{+\infty} \rho_1^{|i|-1} \rho_3^{|i|} \int_{(2i-1)b}^{2ib} (1-\rho_4) B_4(2ib - y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{4k})}{r_{4k}^2} dy_2 \\
& + \left. \sum_{i=-\infty}^0 \rho_1^{|i|+1} \rho_3^{|i|} \int_{(2i-1)b}^{2ib} (1-\rho_4) B_4(2ib - y_2) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t r_{4k})}{r_{4k}^2} dy_2 \right] \tag{2.54}
\end{aligned}$$

onde  $r_{ik}$ 's são dados por (2.46).

Observe que calculando apenas os somatórios que apresentam termos  $k = 0$  e  $j = 0$ , considerando  $\rho_2, \rho_3$  e  $\rho_4$  nulos, bem como  $0^0 = 1$ , para o núcleo  $k_1$  e para  $(L_b B)$  é possível obter os termos descritos nas equações (2.29) e (2.25), ou seja, os mesmos termos para o caso onde apenas a fronteira  $L_1$  é refletiva.

## 2.4 Formulação integral da corrente para o caso sem reflexão

Primeiramente apresenta-se o caso onde não existe a reflexão na fronteira de  $D$ . A corrente de partículas é dada por

$$J(\mathbf{x}) = \int_{S^2} \Psi(\mathbf{x}, \Omega) \Omega d\Omega, \tag{2.55}$$

onde  $\Psi(\mathbf{x}, \Omega)$  é o fluxo angular e  $\Omega$  um vetor. Substituindo (2.8) e aplicando as condições de contorno na equação anterior obtém-se que

$$J(\mathbf{x}) = \int_{S^2} \int_0^{s(\mathbf{x}, \Omega)} \Omega S(\mathbf{x} - r\Omega) e^{-\sigma_t r} dr d\Omega + \int_{S^2} \Omega B(\mathbf{x} - s\Omega) e^{-\sigma_t s} d\Omega. \tag{2.56}$$

Realizando as operações descritas na seção 2.2, tomar  $\mathbf{y} = \mathbf{x} - r\Omega$ ,  $\Omega = \frac{(\mathbf{x}-\mathbf{y})}{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|}$ ,  $dS(\mathbf{y}) = r^2 d\Omega$ ,  $d\mathbf{y} = r^2 dr d\Omega$ , fazendo a mudança no intervalo de

integração e substituição de  $r$ , é possível reescrever a equação anterior de forma que as componentes do vetor corrente sejam dadas por

$$J_n(x) = \int_{\mathbb{R}} \int_D \Omega S(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t |\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \frac{d\mathbf{y}}{r^2} + \int_{\mathbb{R}} \int_{\partial D} \Omega B(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t |\mathbf{x}-\mathbf{y}|} \frac{dS(\mathbf{y})}{r^2} \quad (2.57a)$$

$$= \int_{\mathbb{R}} \int_D \frac{(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2} S(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t |\mathbf{x}-\mathbf{y}|} d\mathbf{y} + \int_{\mathbb{R}} \int_{\partial D} \frac{(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2} B(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t |\mathbf{x}-\mathbf{y}|} dS(\mathbf{y}) \quad (2.57b)$$

$$= 2 \int_{-\infty}^{x_3} \int_D \frac{(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^3} S(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t |\mathbf{x}-\mathbf{y}|} d\mathbf{y} + 2 \int_{-\infty}^{x_3} \int_{\partial D} \frac{(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^3} B(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t |\mathbf{x}-\mathbf{y}|} dS(\mathbf{y}), \quad (2.57c)$$

onde  $J_n(x)$  é um escalar e representa n-ésima componente do vetor corrente, ou seja  $J_1(x)$  representa a primeira componente do vetor corrente no ponto  $\mathbf{x}$ , analogamente para  $J_2(x)$  e  $J_3(x)$ . Novamente, definindo o cosseno do ângulo de elevação  $\eta$ , como em (2.15), pode-se reescrever os termos da equação (2.57c) de forma que o primeiro termo do lado direito seja dado por

$$2 \int_{-\infty}^{x_3} \int_D \frac{(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^3} S(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t \frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2}{\eta}} d\mathbf{y} = 2 \int_0^1 \int_D \frac{(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^3} S(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t \frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2}{\eta}} \frac{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^3 dy_1 dy_2 d\eta}{(x_3 - y_3) |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2} \quad (2.58a)$$

$$= 2 \int_0^1 \int_D \frac{(x_n - y_n)}{(x_3 - y_3) |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2} S(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t \frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2}{\eta}} dy_1 dy_2 d\eta \quad (2.58b)$$

$$= 2 \int_0^1 \int_D \frac{(x_n - y_n) S(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t \frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2}{\eta}} |\mathbf{x} - \mathbf{y}| \eta}{(x_3 - y_3) |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2 |\mathbf{x} - \mathbf{y}| \eta} dy_1 dy_2 d\eta \quad (2.58c)$$

$$= 2 \int_0^1 \int_D \frac{S(\mathbf{y})(x_n - y_n) e^{-\sigma_t \frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2}{\eta}} \eta}{\sqrt{1 - \eta^2} |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^2} dy_1 dy_2 d\eta \quad (2.58d)$$

$$= 2 \int_D \frac{S(\mathbf{y})(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^2} \int_0^1 \frac{\eta e^{-\sigma_t \frac{|\mathbf{x}-\mathbf{y}|_2}{\eta}}}{\sqrt{1 - \eta^2}} d\eta dy_1 dy_2 \quad (2.58e)$$

$$= \int_D \frac{2S(\mathbf{y})(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^2} \text{Ki}_2(\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2) dy_1 dy_2 \quad (2.58f)$$



e o segundo termo por

$$2 \int_{-\infty}^{x_3} \int_{\partial D} \frac{(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^3} B(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|} d\mathcal{S}(\mathbf{y}) = 2 \int_0^1 \int_{\partial D} \frac{(x_n - y_n) B(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t \frac{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2}{\eta}}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^3} \frac{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^3 d\ell d\eta}{(x_3 - y_3) |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2} \quad (2.59a)$$

$$= 2 \int_0^1 \int_{\partial D} \frac{(x_n - y_n) B(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t \frac{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2}{\eta}}}{(x_3 - y_3) |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2} \frac{|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \eta}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \eta} d\ell d\eta \quad (2.59b)$$

$$= 2 \int_{\partial D} \frac{(x_n - y_n) B(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^2} \int_0^1 \frac{\eta e^{-\sigma_t \frac{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2}{\eta}}}{\sqrt{1 - \eta^2}} \frac{|\mathbf{x} - \mathbf{y}| \eta}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2} d\eta d\ell \quad (2.59c)$$

$$= 2 \int_{\partial D} \frac{(x_n - y_n) B(\mathbf{y}) |\mathbf{x} - \mathbf{y}|}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^3} \int_0^1 \frac{\eta^2 e^{-\sigma_t \frac{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2}{\eta}}}{\sqrt{1 - \eta^2}} d\eta d\ell \quad (2.59d)$$

$$= 2 \int_{\partial D} \frac{(x_n - y_n) B(\mathbf{y}) |\mathbf{x} - \mathbf{y}|}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^3} \text{Ki}_3(\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2) d\ell \quad (2.59e)$$

$$= 2 \int_{\partial D} \frac{(x_n - y_n) B(\mathbf{y})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^3} \text{Ki}_3(\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2) (\mathbf{y} - \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} d\ell \quad (2.59f)$$

onde  $\text{Ki}_3$  é a terceira função de Bickley-Naylor.

Utilizando a notação de operador podemos reescrever  $J_n(x)$  de forma que

$$J_n(x) = (J_g S)(\mathbf{x}) + (J_b B)(\mathbf{x}), \quad (2.60)$$

onde

$$(J_g S)(\mathbf{x}) = \int_D k_{j1} S(\mathbf{y}) d\mathbf{y} \quad \text{e} \quad (J_b B)(\mathbf{x}) = \int_{\partial D} k_{j2} B(\mathbf{y}) d\ell \quad (2.61)$$

e os núcleos são dados por

$$k_{j1} = \frac{2(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^2} \text{Ki}_2(\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2) \quad \text{e} \quad k_{j2} = \frac{2(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^3} \text{Ki}_3(\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2) (\mathbf{y} - \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}. \quad (2.62)$$

Por fim, como  $S(\mathbf{x}) = \sigma_s \Phi(\mathbf{x}) + Q(\mathbf{x})$ , a corrente é dada por

$$J_n(\mathbf{x}) = (J_g S)(\mathbf{x}) + (J_b B)(\mathbf{x}) \quad (2.63a)$$

$$= (J_g(\sigma_s \Phi + Q))(\mathbf{x}) + (J_b B)(\mathbf{x}) \quad (2.63b)$$

$$= (J_g \sigma_s \Phi)(\mathbf{x}) + (J_g Q)(\mathbf{x}) + (J_b B)(\mathbf{x}), \quad (2.63c)$$

onde fluxo escalar  $\Phi$  é calculado conforme descrito na seção 2.2 e a função  $(J_b B)(\mathbf{x})$  na fronteira de  $D$  pode ser escrita como

$$\begin{aligned} (J_b B)(\mathbf{x}) &= 2x_2 \int_0^a B_1(y_1) \frac{(x_n - y_n) \text{Ki}_3(\sigma_t |\mathbf{x} - (y_1, 0)|_2)}{|\mathbf{x} - (y_1, 0)|_2^3} dy_1 \\ &+ 2x_1 \int_0^b B_2(y_2) \frac{(x_n - y_n) \text{Ki}_3(\sigma_t |\mathbf{x} - (0, y_2)|_2)}{|\mathbf{x} - (0, y_2)|_2^3} dy_2 \\ &+ 2(b - x_2) \int_0^a B_3(y_1) \frac{(x_n - y_n) \text{Ki}_3(\sigma_t |\mathbf{x} - (y_1, b)|_2)}{|\mathbf{x} - (y_1, b)|_2^3} dy_1 \\ &+ 2(a - x_1) \int_0^b B_4(y_2) \frac{(x_n - y_n) \text{Ki}_3(\sigma_t |\mathbf{x} - (a, y_2)|_2)}{|\mathbf{x} - (a, y_2)|_2^3} dy_2. \end{aligned} \quad (2.64)$$

## 2.5 Formulação integral da corrente para o caso com reflexão

Primeiramente apresenta-se o cálculo da corrente para o caso com reflexão em apenas uma fronteira e em seguida apresenta-se o caso com reflexão nas quatro fronteira do domínio.

### 2.5.1 Corrente com espelhamento em relação a fronteira $L_1$

Analogamente ao apresentado na seção 2.3, toma-se a condição de contorno como dado pelas equações (2.27). A partir destas a corrente pode ser escrita

como

$$\begin{aligned}
J(x) &= \rho_1 \left( \int_{S^2} B_2(\mathbf{x} - s\Omega) e^{-\sigma_t s} \Omega d\Omega + \int_{S^2} B_3(\mathbf{x} - s\Omega) e^{-\sigma_t s} \Omega d\Omega \right. \\
&\quad \left. + \int_{S^2} B_4(\mathbf{x} - s\Omega) e^{-\sigma_t s} \Omega d\Omega + \int_{S^2} \int_0^{s(\mathbf{x}, \Omega)} S(\mathbf{x} - r\Omega) e^{-\sigma_t r} \Omega dr d\Omega \right) \\
&\quad + \int_{S^2} (1 - \rho_1) B_1(\mathbf{x} - s\Omega) e^{-\sigma_t s} \Omega d\Omega + \int_{S^2} \int_0^{s(\mathbf{x}, \Omega)} S(\mathbf{x} - r\Omega) e^{-\sigma_t r} \Omega dr d\Omega \\
&\quad + \int_{S^2} B_2(\mathbf{x} - s\Omega) e^{-\sigma_t s} \Omega d\Omega + \int_{S^2} B_3(\mathbf{x} - s\Omega) e^{-\sigma_t s} \Omega d\Omega \\
&\quad + \int_{S^2} B_4(\mathbf{x} - s\Omega) e^{-\sigma_t s} \Omega d\Omega. \tag{2.65}
\end{aligned}$$

Alterando os intervalos de integração, segue que

$$\begin{aligned}
J_n(\mathbf{x}) &= \rho_1 \left( \int_{\mathbb{R}} \int_{\partial D} B_2(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \frac{(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \frac{d\mathbf{y}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2} + \int_{\mathbb{R}} \int_{\partial D} B_3(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \frac{(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \frac{d\mathbf{y}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2} \right. \\
&\quad \left. + \int_{\mathbb{R}} \int_{\partial D} B_4(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \frac{(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \frac{d\mathbf{y}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2} + \int_{\mathbb{R}} \int_D S(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \frac{(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \frac{d\mathbf{y}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2} \right) \\
&\quad + (1 - \rho_1) \int_{\mathbb{R}} \int_{\partial D} B_1(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \frac{(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \frac{d\mathbf{y}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2} + \int_{\mathbb{R}} \int_D S(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \frac{(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \frac{d\mathbf{y}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2} \\
&\quad + \int_{\mathbb{R}} \int_{\partial D} B_2(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \frac{(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \frac{d\mathbf{y}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2} + \int_{\mathbb{R}} \int_{\partial D} B_3(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \frac{(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \frac{d\mathbf{y}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2} \\
&\quad + \int_{\mathbb{R}} \int_{\partial D} B_4(\mathbf{y}) e^{-\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \frac{(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|} \frac{d\mathbf{y}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|^2}. \tag{2.66}
\end{aligned}$$

Assim como feito anteriormente, é possível reescrever cada um dos termos, logo

$$\begin{aligned}
J_n(\mathbf{x}) = & \rho_1 \left( \int_{\partial D} B_2(\mathbf{y}) \frac{2(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^3} \text{Ki}_3(\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2) (\mathbf{y} - \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} \, dl \right. \\
& + \int_{\partial D} B_3(\mathbf{y}) \frac{2(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^3} \text{Ki}_3(\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2) (\mathbf{y} - \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} \, dl \\
& + \int_{\partial D} B_4(\mathbf{y}) \frac{2(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^3} \text{Ki}_3(\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2) (\mathbf{y} - \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} \, dl \\
& \left. + \int_D S(\mathbf{y}) \frac{2(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^2} \text{Ki}_2(\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2) dy_1 dy_2 \right) \\
& + (1 - \rho_1) \int_{\partial D} B_1(\mathbf{y}) \frac{2(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^3} \text{Ki}_3(\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2) (\mathbf{y} - \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} \, dl \\
& + \int_D S(\mathbf{y}) \frac{2(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^2} \text{Ki}_2(\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2) dy_1 dy_2 \\
& + \int_{\partial D} B_2(\mathbf{y}) \frac{2(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^3} \text{Ki}_3(\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2) (\mathbf{y} - \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} \, dl \\
& + \int_{\partial D} B_3(\mathbf{y}) \frac{2(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^3} \text{Ki}_3(\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2) (\mathbf{y} - \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} \, dl \\
& + \int_{\partial D} B_4(\mathbf{y}) \frac{2(x_n - y_n)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^3} \text{Ki}_3(\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2) (\mathbf{y} - \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} \, dl. \tag{2.67}
\end{aligned}$$

Utilizando a notação de operador, pode-se escrever  $J_n$  como

$$J_n(\mathbf{x}) = (J_g \sigma_s \Phi)(\mathbf{x}) + (J_g Q)(\mathbf{x}) + (J_b B)(\mathbf{x}), \tag{2.68}$$

onde o núcleo de  $J_g$  e função  $(J_b B)$ , para este caso, são

$$k_{j1} = \frac{2(x_n - y_n)}{r_{0000}^2} \text{Ki}_2(\sigma_t r_{0000}) + \rho_1 \frac{2(x_n - y_n)}{r_{0100}^2} \text{Ki}_2(\sigma_t r_{0100}) \tag{2.69}$$

e

$$\begin{aligned}
(J_b B)(x) = & (1 - \rho_1) 2x_2 \int_0^a B_1(y_1) \frac{(x_n - y_n) \text{Ki}_3(\sigma_t r_{10})}{r_{10}^3} dy_1 \\
& + \rho_1 \left( 2x_1 \int_{-b}^0 B_2(-y_2) \frac{(x_n - y_n) \text{Ki}_3(\sigma_t r_{20})}{r_{20}^3} dy_2 + 2(x_2 + b) \int_0^a B_3(y_1) \frac{(x_n - y_n) \text{Ki}_3(\sigma_t r_{3(-1)})}{r_{3(-1)}^3} dy_1 \right. \\
& + 2(a - x_1) \int_{-b}^0 B_4(-y_2) \frac{(x_n - y_n) \text{Ki}_3(\sigma_t r_{40})}{r_{40}^3} dy_2 \left. + 2x_1 \int_0^b B_2(y_2) \frac{(x_n - y_n) \text{Ki}_3(\sigma_t r_{20})}{r_{20}^3} dy_2 \right. \\
& \left. + 2(b - x_2) \int_0^a B_3(y_1) \frac{(x_n - y_n) \text{Ki}_3(\sigma_t r_{30})}{r_{30}^3} dy_1 + 2(a - x_1) \int_0^b B_4(y_2) \frac{(x_n - y_n) \text{Ki}_3(\sigma_t r_{40})}{r_{40}^3} dy_2 \right)
\end{aligned}$$

onde os  $r$ 's são dados por (2.30) e (2.32).

## 2.5.2 Corrente com espelhamento em relação as quatro fronteiras

Generalizado a corrente para o caso onde todas as fronteiras são refletivas, obtêm-se novamente uma representação via operador bem como em (2.68), neste caso o núcleo  $k_{j1}$  e a função  $(J_b B) = \mathcal{B}_{j1} + \mathcal{B}_{j2} + \mathcal{B}_{j3} + \mathcal{B}_{j4}$  são, respectivamente,

$$\begin{aligned}
k_{j1}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) &= 2 \sum_{k=0}^{+\infty} \sum_{j=0}^{+\infty} \sum_{i=0}^1 \sum_{l=0}^1 (\rho_1 \rho_3)^j (\rho_2 \rho_4)^k \rho_1^i \rho_2^l \frac{(x_n - y_n) \text{Ki}_2(\sigma_t r_{iljk})}{r_{iljk}^2} \\
&+ 2 \sum_{k=0}^{+\infty} \sum_{j=-\infty}^{-1} \sum_{i=0}^1 \sum_{l=0}^1 \rho_1^{-1-j} \rho_3^{-j} (\rho_2 \rho_4)^k \rho_1^{1-i} \rho_2^l \frac{(x_n - y_n) \text{Ki}_2(\sigma_t r_{iljk})}{r_{iljk}^2} \\
&+ 2 \sum_{k=-\infty}^{-1} \sum_{j=0}^{+\infty} \sum_{i=0}^1 \sum_{l=0}^1 (\rho_1 \rho_3)^j \rho_2^{-1-k} \rho_4^{-k} \rho_1^i \rho_2^{1-l} \frac{(x_n - y_n) \text{Ki}_2(\sigma_t r_{iljk})}{r_{iljk}^2} \\
&+ 2 \sum_{k=-\infty}^{-1} \sum_{j=-\infty}^{-1} \sum_{i=0}^1 \sum_{l=0}^1 \rho_1^{-1-j} \rho_3^{-j} \rho_2^{-1-k} \rho_4^{-k} \rho_1^{1-i} \rho_2^{1-l} \frac{(x_n - y_n) \text{Ki}_2(\sigma_t r_{iljk})}{r_{iljk}^2}
\end{aligned} \tag{2.70}$$

e

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}_{j1} &= \sum_{k=-\infty}^0 2(x_2 - 2kb) \rho_1^{|k|} \rho_3^{|k|} \left[ \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \rho_2^{|i|} \rho_4^{|i|} \int_{2ia}^{(2i+1)a} (1 - \rho_1)(x_n - y_n) B_1(y_1 - 2ia) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{1k})}{r_{1k}^3} dy_1 \right. \\
&+ \sum_{i=-\infty}^0 \rho_2^{|i|+1} \rho_4^{|i|} \int_{(2i-1)a}^{2ia} (1 - \rho_1)(x_n - y_n) B_1(2ia - y_1) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{1k})}{r_{1k}^3} dy_1 \\
&+ \left. \sum_{i=1}^{+\infty} \rho_2^{|i|-1} \rho_4^{|i|} \int_{(2i-1)a}^{2ia} (1 - \rho_1)(x_n - y_n) B_1(2ia - y_1) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{1k})}{r_{1k}^3} dy_1 \right] \\
&+ \sum_{k=1}^{+\infty} 2(2kb - x_2) \rho_1^{|k|-1} \rho_3^{|k|} \left[ \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \rho_2^{|i|} \rho_4^{|i|} \int_{2ia}^{(2i+1)a} (1 - \rho_1)(x_n - y_n) B_1(y_1 - 2ia) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{1k})}{r_{1k}^3} dy_1 \right. \\
&+ \sum_{i=-\infty}^0 \rho_2^{|i|+1} \rho_4^{|i|} \int_{(2i-1)a}^{2ia} (1 - \rho_1)(x_n - y_n) B_1(2ia - y_1) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{1k})}{r_{1k}^3} dy_1 \\
&+ \left. \sum_{i=1}^{+\infty} \rho_2^{|i|-1} \rho_4^{|i|} \int_{(2i-1)a}^{2ia} (1 - \rho_1)(x_n - y_n) B_1(2ia - y_1) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{1k})}{r_{1k}^3} dy_1 \right],
\end{aligned} \tag{2.71}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}_{j_2} = & \sum_{k=-\infty}^0 2(x_1 - 2ka)\rho_2^{|k|}\rho_4^{|k|} \left[ \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \rho_1^{|i|}\rho_3^{|i|} \int_{2ib}^{(2i+1)b} (1 - \rho_2)(x_n - y_n)B_2(y_2 - 2ib) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{2k})}{r_{2k}^3} dy_2 \right. \\
& + \sum_{i=1}^{+\infty} \rho_1^{|i|-1}\rho_3^{|i|} \int_{(2i-1)b}^{2ib} (1 - \rho_2)(x_n - y_n)B_2(2ib - y_2) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{2k})}{r_{2k}^2} dy_2 \\
& + \left. \sum_{i=-\infty}^0 \rho_1^{|i|+1}\rho_3^{|i|} \int_{(2i-1)b}^{2ib} (1 - \rho_2)(x_n - y_n)B_2(2ib - y_2) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{2k})}{r_{2k}^3} dy_2 \right] \\
& + \sum_{k=1}^{+\infty} 2(2ka - x_1)\rho_2^{|k|-1}\rho_4^{|k|} \left[ \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \rho_1^{|i|}\rho_3^{|i|} \int_{2ib}^{(2i+1)b} (1 - \rho_2)(x_n - y_n)B_2(y_2 - 2ib) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{2k})}{r_{2k}^3} dy_2 \right. \\
& + \sum_{i=1}^{+\infty} \rho_1^{|i|-1}\rho_3^{|i|} \int_{(2i-1)b}^{2ib} (1 - \rho_2)(x_n - y_n)B_2(2ib - y_2) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{2k})}{r_{2k}^3} dy_2 \\
& + \left. \sum_{i=-\infty}^0 \rho_1^{|i|+1}\rho_3^{|i|} \int_{(2i-1)b}^{2ib} (1 - \rho_2)(x_n - y_n)B_2(2ib - y_2) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{2k})}{r_{2k}^3} dy_2 \right], \tag{2.72}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}_{j_3} = & \sum_{k=-\infty}^{-1} 2(x_2 - (2k+1)b)\rho_1^{|k|}\rho_3^{|k|-1} \left[ \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \rho_2^{|i|}\rho_4^{|i|} \int_{2ia}^{(2i+1)a} (1 - \rho_3)(x_n - y_n)B_3(y_1 - 2ia) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{3k})}{r_{3k}^3} dy_1 \right. \\
& + \sum_{i=-\infty}^0 \rho_2^{|i|+1}\rho_4^{|i|} \int_{(2i-1)a}^{2ia} (1 - \rho_3)(x_n - y_n)B_3(2ia - y_1) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{3k})}{r_{3k}^3} dy_1 \\
& + \left. \sum_{i=1}^{+\infty} \rho_2^{|i|-1}\rho_4^{|i|} \int_{(2i-1)a}^{2ia} (1 - \rho_3)(x_n - y_n)B_3(2ia - y_1) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{3k})}{r_{3k}^3} dy_1 \right] \\
& + \sum_{k=0}^{+\infty} 2((2k+1)b - x_2)\rho_1^{|k|}\rho_3^{|k|} \left[ \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \rho_2^{|i|}\rho_4^{|i|} \int_{2ia}^{(2i+1)a} (1 - \rho_3)(x_n - y_n)B_3(y_1 - 2ia) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{3k})}{r_{3k}^3} dy_1 \right. \\
& + \sum_{i=-\infty}^0 \rho_2^{|i|+1}\rho_4^{|i|} \int_{(2i-1)a}^{2ia} (1 - \rho_3)(x_n - y_n)B_3(2ia - y_1) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{3k})}{r_{3k}^3} dy_1 \\
& + \left. \sum_{i=1}^{+\infty} \rho_2^{|i|-1}\rho_4^{|i|} \int_{(2i-1)a}^{2ia} (1 - \rho_3)(x_n - y_n)B_3(2ia - y_1) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{3k})}{r_{3k}^3} dy_1 \right], \tag{2.73}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
\mathcal{B}_{j_4} = & \sum_{k=-\infty}^{-1} 2(x_1 - (2k+1)a)\rho_2^{|k|}\rho_4^{|k|-1} \left[ \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \rho_1^{|i|}\rho_3^{|i|} \int_{2ib}^{(2i+1)b} (1-\rho_4)(x_n - y_n)B_4(y_2 - 2ib) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{4k})}{r_{4k}^3} dy_2 \right. \\
& + \sum_{i=1}^{+\infty} \rho_1^{|i|-1}\rho_3^{|i|} \int_{(2i-1)b}^{2ib} (1-\rho_4)(x_n - y_n)B_4(2ib - y_2) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{4k})}{r_{4k}^3} dy_2 \\
& \left. + \sum_{i=-\infty}^0 \rho_1^{|i|+1}\rho_3^{|i|} \int_{(2i-1)b}^{2ib} (1-\rho_4)(x_n - y_n)B_4(2ib - y_2) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{4k})}{r_{4k}^3} dy_2 \right] \\
& + \sum_{k=0}^{+\infty} 2((2k+1)a - x_1)\rho_2^{|k|}\rho_4^{|k|} \left[ \sum_{i=-\infty}^{+\infty} \rho_1^{|i|}\rho_3^{|i|} \int_{2ib}^{(2i+1)b} (1-\rho_4)(x_n - y_n)B_4(y_2 - 2ib) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{4k})}{r_{4k}^3} dy_2 \right. \\
& + \sum_{i=1}^{+\infty} \rho_1^{|i|-1}\rho_3^{|i|} \int_{(2i-1)b}^{2ib} (1-\rho_4)(x_n - y_n)B_4(2ib - y_2) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{4k})}{r_{4k}^3} dy_2 \\
& \left. + \sum_{i=-\infty}^0 \rho_1^{|i|+1}\rho_3^{|i|} \int_{(2i-1)b}^{2ib} (1-\rho_4)(x_n - y_n)B_4(2ib - y_2) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t r_{4k})}{r_{4k}^3} dy_2 \right] \tag{2.74}
\end{aligned}$$

onde os  $r'$ s são dados por (2.46) e (2.49).

### 3 FUNÇÕES DE BICKLEY-NAYLOR

#### 3.1 Definições e computação das funções de Bickley-Naylor

O problema de transferência de calor vem sendo estudado desde o século XVIII, quando, em 1701, Isaac Newton publicou anonimamente o artigo *Scala Graduum Caloris* [20]. Em 1935, Wiliam Gee Bickley [23, 24], ao estudar esse problema, obteve a função de Bessel modificada de segunda ordem [2] dada por

$$K_0(x) = \int_0^\infty \cos(x \sinh(t)) dt \quad (3.1)$$

e desenvolveu uma relação de recorrência para calcular sucessivas integrações de  $K_0(x)$ , dadas por

$$\left\{ \begin{array}{l} Ki_0 = K_0(x) \\ Ki_n(x) = \int_x^\infty Ki_{n-1}(t) dt, \end{array} \right. \quad (3.2a)$$

$$(3.2b)$$

as quais posteriormente foram nomeadas de funções de Bickley-Naylor de ordem  $n$ .

Atualmente, as funções têm sido aplicadas em áreas como transporte térmico [3] e transporte de partículas [17] e podem ser aproximadas de várias formas, tais como por polinômios de Chebychev [21] e expressões polinomiais [39]. A Figura 3.1 apresenta as funções de Bickley-Naylor para  $n$  de um a sete.

Além da formulação dada pela recorrência da equação (3.2), as funções de Bickley-Naylor podem ser expressas de diferentes formas, como descrito por Altaç [3], Bickley [23] e Bickley e Naylor [24].

Uma forma equivalente para definir as funções das equações (3.2) é dada por

$$Ki_n(r) = \int_1^\infty \frac{e^{-rt}}{t^n \sqrt{t^2 - 1}} dt. \quad (3.3)$$



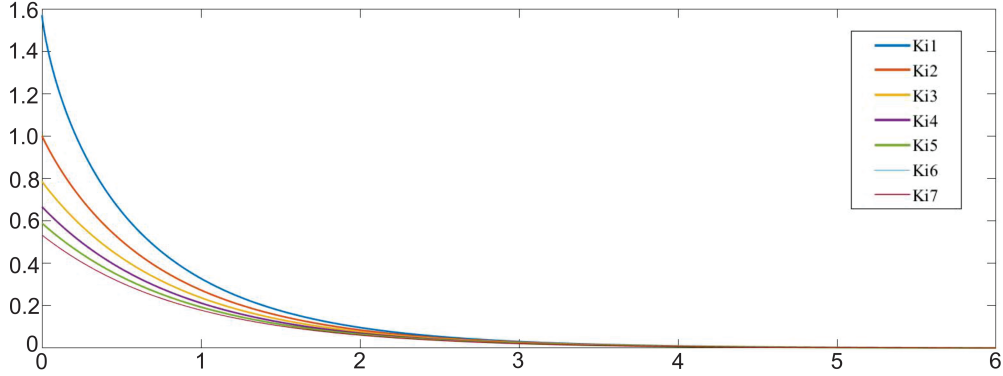


Figura 3.1: Funções de Bickley-Naylor para  $n = 1$  a  $n = 7$

Tomando  $x = 1/t$  e  $n = 1, 2$  e  $3$ , têm-se as seguintes representações para as funções Bickley-Naylor de primeira, segunda e terceira ordem, respectivamente:

$$\text{Ki}_1(r) = \int_0^1 \frac{e^{-r/x}}{\sqrt{1-x^2}} dx, \quad (3.4)$$

$$\text{Ki}_2(r) = \int_0^1 \frac{x e^{-r/x}}{\sqrt{1-x^2}} dx \quad (3.5)$$

e

$$\text{Ki}_3(r) = \int_0^1 \frac{x^2 e^{-r/x}}{\sqrt{1-x^2}} dx. \quad (3.6)$$

Além das representações integrais para as equações (3.4), (3.5) e (3.6), Altaç [3] descreve as expansões em séries dadas, respectivamente, por:

$$\text{Ki}_1(r) = \frac{\pi}{2} + r \left[ \gamma + \ln \left( \frac{r}{2} \right) \right] \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(r/2)^{2k}}{(k!)^2 (2k+1)} \quad (3.7)$$

$$- r \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(r/2)^{2k}}{(k!)^2 (2k+1)^2} - r \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(r/2)^{2k} H(k+1)}{(k!)^2 (2k+1)}, \quad (3.8)$$

$$\begin{aligned} \text{Ki}_2(r) = 1 - \frac{\pi}{2} r - \frac{r^2}{2} \left[ \gamma + \ln \left( \frac{r}{2} \right) \right] \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(r/2)^{2k}}{k!(k+1)!(2k+1)} \\ + \frac{r^2}{4} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(4k+3)(r/2)^{2k}}{[(k+1)!(2k+1)]^2} + \frac{r^2}{2} \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(r/2)^{2k} H(k+1)}{k!(k+1)!(2k+1)}, \end{aligned} \quad (3.9)$$

e

$$\begin{aligned} \text{Ki}_3(r) &= \frac{\pi}{4} - r + \frac{\pi r^2}{4} + r^3 \left[ \gamma + \ln\left(\frac{r}{2}\right) \right] \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(r/2)^{2k} (2k)!}{(k!)^2 (2k+3)!} \\ &\quad - r^3 \sum_{k=0}^{\infty} \frac{(r/2)^{2k} (2k)!}{(k!)^2 (2k+3)!} (H(k+1) - H(2k+1) + H(2k+4)), \end{aligned} \quad (3.10)$$

onde  $H(k+1) = 1 + \frac{1}{2} + \frac{1}{3} + \dots + \frac{1}{k}$  e  $\gamma$  é constante de Euler-Mascheroni.

Os integrandos das equações (3.4), (3.5) e (3.6) são singulares quando  $x = 1$ , pois seus denominadores tornam-se iguais a 0 e seu numerador igual a  $e^{-r}$ . Tal singularidade pode gerar ruídos quando se busca uma aproximação precisa para tais funções. Assim, visando a melhor aproximação para as funções, bem como uma melhora na eficiência computacional, a seguir são apresentadas alternativas para minimizar os efeitos numericamente espúrios.

Uma estratégia clássica para remover essa singularidade é escrever

$$\text{Ki}_1(r) = \int_0^1 \frac{e^{-\frac{r}{x}} - e^{-r}}{\sqrt{1-x^2}} dx + e^{-r} \int_0^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx. \quad (3.11)$$

Assim, a segunda integral pode ser integrada analiticamente e a primeira é melhor comportada quando  $x$  tende a 1, visto que  $\frac{e^{-\frac{r}{x}} - e^{-r}}{\sqrt{1-x^2}}$  converge para zero. Porém, quando  $x = 0$  o integrando  $\frac{e^{-\frac{r}{x}}}{\sqrt{1-x^2}}$  é melhor comportado que  $\frac{e^{-\frac{r}{x}} - e^{-r}}{\sqrt{1-x^2}}$ , pois o segundo pode ser influenciado com o cancelamento catastrófico advindo dos erros de arredondamento. Portanto, antes de aplicar a técnica descrita na equação (3.11), o intervalo é separado em duas partes, como segue:

$$\text{Ki}_1(r) = \int_0^{1-\delta} \frac{e^{-\frac{r}{x}}}{\sqrt{1-x^2}} dx + \int_{1-\delta}^1 \frac{e^{-\frac{r}{x}} - e^{-r}}{\sqrt{1-x^2}} dx, \quad (3.12)$$

onde  $\delta = \frac{1}{1+r}$ . A técnica descrita na equação (3.11) é aplicada na segunda integral da equação (3.12) para obter

$$\text{Ki}_1(r) = \int_0^{1-\delta} \frac{e^{-\frac{r}{x}}}{\sqrt{1-x^2}} dx + \int_{1-\delta}^1 \frac{e^{-\frac{r}{x}} - e^{-r}}{\sqrt{1-x^2}} dx + e^{-r} \int_{1-\delta}^1 \frac{1}{\sqrt{1-x^2}} dx. \quad (3.13)$$

O tratamento do último termo da equação (3.13) é feito analiticamente.

Logo,

$$\text{Ki}_1(r) = \int_0^{1-\delta} \frac{e^{-\frac{r}{x}}}{\sqrt{1-x^2}} dx + \int_{1-\delta}^1 \frac{e^{-\frac{r}{x}} - e^{-r}}{\sqrt{1-x^2}} dx + e^{-r} \left( \frac{\pi}{2} - \arcsin(1-\delta) \right). \quad (3.14)$$

De modo a verificar se tal alteração apresenta uma melhora na eficiência computacional para o cálculo da função, foi implementado algoritmo em C++, sendo as integrais resolvidas com as rotinas da biblioteca científica GNU [27]. Para o cálculo das integrais foi utilizada a função *gsl\_integration\_qags*, a qual aplica a regra de integração de 21 pontos de Gauss-Kronrod adaptativamente até que a tolerância seja obtida.

Tal algoritmo realiza o cálculo de  $\text{Ki}_1$  através das equações (3.4) e (3.14) com diferentes tolerâncias e compara com resultados obtidos pela equação (3.14) com tolerância de  $10^{-14}$ , os quais foram tomados como valores referência da função. O pseudocódigo é descrito abaixo.

1. Particiona o intervalo  $[0, 6\sqrt{2}]$  em 100000 subintervalos de igual comprimento.
2. Calcula os valores referência de  $\text{Ki}_1$  em cada extremo dos subintervalos do item 1.
3. Calcula  $\text{Ki}_1$  através das equações (3.4) e (3.14) em cada extremo dos intervalos, mas com diferentes tolerâncias.
4. Calcula o maior erro relativo entre os valores calculados anteriormente e os valores de referência para cada uma das funções, para as diferentes tolerâncias.

A Tabela 3.1 apresenta os maiores erros relativos obtidos entre cada umas das equações e o valor referência para a função  $Ki_1$  para diferentes tolerâncias. Bem como o tempo computacional gasto para calcular todos os 300 mil pontos.

Tabela 3.1: Maior erro relativo na comparação entre as diferentes representações e o valor referência para Bickley-Naylor de primeira ordem em diferentes tolerâncias.

Tolerância	$Ki_1$ Equação (3.4)	$Ki_1$ Equação (3.14)	Tempo total (s)
1e-1	4.02879e-02	4.64584e-05	6,501
1e-2	4.02879e-02	4.64584e-05	6,675
1e-3	4.02879e-02	4.63843e-05	6,836
1e-4	2.84792e-02	2.43972e-06	7,122
1e-5	3.13473e-06	2.43972e-06	7,311
1e-6	6.32346e-07	2.43972e-06	7,596
1e-7	6.59473e-08	8.62490e-07	7,961
1e-8	1.15506e-08	1.07801e-07	8,218
1e-9	4.37866e-09	4.09476e-11	8,334
1e-10	3.05244e-10	3.10661e-11	8,442
1e-11	3.99688e-11	3.09351e-11	8,673

Pode-se observar na tabela que para a grande maioria das tolerâncias a equação (3.14) apresenta menor erro relativo que a equação (3.4). Também é possível ver que mesmo utilizando baixa tolerância a equação (3.14) apresenta uma aproximação muito melhor para o valor referência. Quando exige-se uma tolerância alta, como  $10^{-11}$ , ambas equações produzem resultados da mesma ordem, porém a segunda representação é obtida com um menor custo computacional, visto que as integrais envolvidas são numericamente melhor comportadas.

Analogamente ao feito para a Bickley-Naylor de primeira ordem, pode-se manipular a equação da Bickley-Naylor de segunda ordem de forma a remover sua singularidade. Logo, primeiramente, separa-se o intervalo de integração da equação (3.5) e em seguida soma-se e subtrai-se  $xe^{-r}$ .

Matematicamente tem-se que

$$\text{Ki}_2(r) = \int_0^1 \frac{xe^{-r/x}}{\sqrt{1-x^2}} dx = \int_0^{1-\delta} \frac{xe^{-r/x}}{\sqrt{1-x^2}} dx + \int_{1-\delta}^1 \frac{xe^{-r/x} + xe^{-r} - xe^{-r}}{\sqrt{1-x^2}} dx \quad (3.15a)$$

$$= \int_0^{1-\delta} \frac{xe^{-r/x}}{\sqrt{1-x^2}} dx + \int_{1-\delta}^1 \frac{xe^{-r/x} - xe^{-r}}{\sqrt{1-x^2}} dx + e^{-r} \int_{1-\delta}^1 \frac{x}{\sqrt{1-x^2}} dx \quad (3.15b)$$

$$= \int_0^{1-\delta} \frac{xe^{-r/x}}{\sqrt{1-x^2}} dx + \int_{1-\delta}^1 \frac{xe^{-r/x} - xe^{-r}}{\sqrt{1-x^2}} dx + e^{-r} \sqrt{-(\delta-x)^2} \delta \quad (3.15c)$$

onde  $\delta = \frac{1}{1+r}$ .

De forma a comparar computacionalmente as equações (3.5) e (3.15c), foi implementado algoritmo tal qual o caso anterior. A Tabela 3.2 apresenta a comparação das equações conforme é alterada a tolerância da função, bem como descrito no pseudocódigo e o tempo total gasto.

Tabela 3.2: Maior erro relativo na comparação entre as diferentes representações e o valor referência para Bickley-Naylor de segunda ordem em diferentes tolerâncias.

Tolerância	Ki <sub>2</sub> Equação (3.5)	Ki <sub>2</sub> Equação (3.15c)	Tempo total (s)
1e-1	4.22127e-02	2.55625e-06	5,783
1e-2	4.22127e-02	2.55625e-06	5,951
1e-3	4.22127e-02	2.55625e-06	6,107
1e-4	2.98387e-02	2.55625e-06	6,360
1e-5	3.74768e-06	2.55625e-06	6,563
1e-6	1.68741e-07	2.55625e-06	6,878
1e-7	9.05634e-08	9.03658e-07	7,183
1e-8	2.23627e-08	1.12944e-07	7,424
1e-9	2.11619e-08	8.51206e-11	7,492
1e-10	2.11619e-08	6.06947e-12	7,601
1e-11	2.11609e-08	1.33825e-12	7,869

Novamente para a grande maioria das tolerâncias estudadas a equação modificada apresenta menor erro do que a formulação inicial, bem como que para pequenas tolerâncias esta já apresenta erros da ordem de  $10^{-6}$ . Observa-se também que para as três últimas tolerâncias calculadas o erro relativo pela equação (3.5) manteve-se praticamente estável, enquanto que para a equação (3.15c) o erro diminuiu.

Aplicando os mesmos procedimentos para  $Ki_3$ , equação (3.6), separando a integral e removendo a singularidade, somando e subtraindo  $x^2e^{-r}$ , pode-se reescrever a função como

$$Ki_3(r) = \int_0^1 \frac{x^2e^{-r/x}}{\sqrt{1-x^2}}dx = \int_0^{1-\delta} \frac{x^2e^{-r/x}}{\sqrt{1-x^2}}dx + \int_{1-\delta}^1 \frac{x^2e^{-r/x} + x^2e^{-r} - x^2e^{-r}}{\sqrt{1-x^2}}dx \quad (3.16)$$

$$= \int_0^{1-\delta} \frac{x^2e^{-r/x}}{\sqrt{1-x^2}}dx + \int_{1-\delta}^1 \frac{x^2e^{-r/x} - x^2e^{-r}}{\sqrt{1-x^2}}dx + e^{-r} \int_{1-\delta}^1 \frac{x^2}{\sqrt{1-x^2}}dx \quad (3.17)$$

$$= \int_0^{1-\delta} \frac{x^2e^{-r/x}}{\sqrt{1-x^2}}dx + \int_{1-\delta}^1 \frac{x^2e^{-r/x} - x^2e^{-r}}{\sqrt{1-x^2}}dx + e^{-r} \left( \frac{\pi}{4} + \frac{(1-\delta)}{2} \sqrt{-(\delta-2)\delta} - \frac{\arcsin(1-\delta)}{2} \right) \quad (3.18)$$

onde  $\delta = \frac{1}{1+r}$ .

De forma a comparar computacionalmente as Equações (3.6) e (3.18), foi implementado algoritmo tal qual o caso anterior. A Tabela 3.3 apresenta a comparação das equações conforme é alterada a tolerância da função, bem como descrito no pseudocódigo anteriormente e o tempo total.

Tabela 3.3: Maior erro relativo na comparação entre as diferentes representações e o valor referência para Bickley-Naylor de terceira ordem em diferentes tolerâncias.

Tolerância	$Ki_3$ Equação (3.6)	$Ki_3$ Equação (3.18)	Tempo total (s)
1e-1	4.40694e-02	2.66865e-06	6,370
1e-2	4.40694e-02	2.66865e-06	6,540
1e-3	4.40694e-02	2.66865e-06	6,758
1e-4	4.40694e-02	2.66865e-06	6,966
1e-5	9.94825e-09	2.66865e-06	7,170
1e-6	9.94825e-09	2.66865e-06	7,457
1e-7	9.94825e-09	9.43363e-07	7,765
1e-8	7.85791e-10	1.17904e-07	7,978
1e-9	2.00904e-10	4.22314e-12	8,077
1e-10	1.95429e-10	3.07427e-12	8,200
1e-11	1.95056e-10	1.74171e-12	8,555

Na tabela observa-se que na grande maioria das tolerâncias a equação (3.18) apresenta um erro relativo menor que (3.6), entretanto, para tolerâncias na faixa de  $10^{-5}$  a  $10^{-8}$ , esta última apresenta erro bem inferior ao apresentado pela primeira.

Com base nos resultados apresentados, pode-se concluir que em geral as funções modificadas apresentam menor erro relativo que as funções originais, principalmente quando a tolerância não está na faixa entre  $10^{-5}$  a  $10^{-9}$ , quando nesta faixa a função original tende a ter menor erro. Observou-se também que para a menor tolerância estudada,  $10^{-1}$ , a função modificada apresenta erro da ordem de  $10^{-6}$  e quando esta está na faixa de  $10^{-11}$  erro é da ordem  $10^{-12}$ , o qual é próximo ao  $\epsilon$  de máquina.

## 3.2 Interpolações das funções de Bickley-Naylor

Conforme descrito nos capítulos anteriores, todos os núcleos são dependentes das funções de Bickley-Naylor, assim, estas serão calculadas centenas de milhares de vezes. Por isso, uma estratégia é tabelar as funções para uma malha refinada e, assim, fazer apenas a busca de valores em vez de um novo cálculo. Entretanto, as funções serão integradas por rotinas auto adaptativas, sendo difícil prover uma malha que contemple todos os pontos necessários, assim, uma forma de contornar tal problema é com o uso de interpolações.

Visando estudar o erro gerado pela interpolação polinomial, bem como, desenvolver estratégias para atenuar os erros, primeiramente observa-se que as três representações por séries dadas nas equação (3.7), (3.9) e (3.10) apresentam singularidade quando  $r = 0$ , o que acaba por dificultar as aproximações numéricas. Assim, [2] sugere que seja feita a subtração ou soma do termo que gera a singularidade ao calcular os nós de interpolação e a soma ou subtração deste após realizar a interpolação para cada um dos valores que se deseja entre os nós.

Sendo assim, de forma a verificar se tais mudanças produzem uma melhora computacional, foi implementado algoritmo em C++ com o uso da biblioteca científica GNU [27] o qual realiza o cálculo das funções de Bickley-Naylor para as três ordens utilizando a função *gsl\_integration\_qags* com tolerância de  $10^{-13}$  e utilizando as formulações dadas pelas equações (3.14), (3.15c) e (3.18). Assim, para a Bickley-Naylor de primeira ordem, deve-se subtrair  $y \ln(y)$  antes de efetuar a interpolação e somar após esta, para a de segunda ordem deve-se somar  $y^2 \ln(y)$  e para a terceira ordem subtrair  $y^3 \ln(y)$ . O pseudocódigo da implementação é:

1. Particiona o intervalo  $[0, L]$  em  $N$  subintervalos de igual comprimento.
2. Calcula Bickley-Naylor em cada extremo dos intervalos para cada uma das ordens.
3. Subtrai ou soma o termo descrito anteriormente em cada uma das imagens dos valores calculados no item 2.
4. Calcula os coeficientes de  $P_1$  e  $P_2$ , os quais são os polinômios de primeiro e segundo grau da interpolação para cada um dos subintervalos.
5. Dado ponto  $y$ , calcula  $P_1(y)$  e  $P_2(y)$  nos polinômios cujos pontos de criação são os extremos do intervalo que o contém e calcula o valor referência via função *gsl* citada anteriormente.
6. Soma o oposto do efetuado no item 3. a cada um dos extremos dos intervalos.
7. Calcula o erro relativo entre os valores obtidos no item anterior e o valor de referência.

O intervalo escolhido foi  $[0, 10]$ , pois para valores maiores que 10, as funções e o erro tornam-se suficientemente próximos de 0. Devido a maioria dos



problemas aqui apresentados possuem domínio com diagonais múltiplas de  $\sqrt{2}$ , os valores de  $y$  foram escolhidos como múltiplos e submúltiplos deste.

As Tabelas 3.4 e 3.5 apresentam os resultados gerados pelo algoritmo para diferentes números de subintervalos para códigos sem e com a soma e subtração de  $y \ln(y)$  para a função de primeira ordem.

Em ambas tabelas foi possível observar que quando se compara o grau dos polinômios de interpolação, na grande maioria dos resultados, polinômios de segundo grau apresentam um erro relativo menor que polinômios de primeiro grau. Além disso, observa-se que quanto mais próximo de zero, menor a diferença entre ambos, logo, para valores próximos a zero, uma aproximação linear pode ser mais eficiente devido ao custo computacional para calcular os coeficientes do polinômio de segundo grau.

Os valores em negrito representam os menores valores quando se compara elemento a elemento das Tabelas 3.4 e 3.5. É possível observar que para valores de  $y$  maiores ou iguais a  $1.5\sqrt{2}$ , para polinômio de segundo grau, e  $0.5\sqrt{2}$ , para polinômio do primeiro grau, subtrair  $y \ln(y)$  acaba por interferir negativamente na aproximação, o que pode ser observado nos valores em negrito na Tabela 3.5. Enquanto que para valores menores que estes, a subtração ocasiona a melhora da aproximação, ou seja, esta possibilita a redução do erro relativo, o que pode ser observado nos valores em negrito na Tabela 3.4.

Sendo assim, uma alternativa eficiente para a aproximação de  $Ki_1$  é realizar a interpolação por polinômio do segundo grau e subtrair  $y \ln(y)$  para valores menores ou iguais a  $1.5\sqrt{2}$ , enquanto que para valores maiores que este é recomendado não realizar operação. Quanto à escolha do  $N$ , este depende da precisão exigida, para valores maiores que os aqui apresentados o erro torna-se próximo do épsilon de máquina.

Tabela 3.4: Erros relativos entre  $Ki_1(y)$  e a aproximação linear e quadrática sem a remoção de  $y \ln(y)$

$y$	N = 100		N = 1000		N = 10000		N = 100000	
	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática
$0.000025\sqrt{2}$	2.30644e-05	2.15202e-05	1.78885e-05	1.63292e-05	1.27059e-05	1.11512e-05	7.52306e-06	6.01805e-06
$0.00005\sqrt{2}$	4.30097e-05	3.99213e-05	3.26576e-05	2.95400e-05	2.22920e-05	1.91936e-05	1.19261e-05	9.02631e-06
$0.00025\sqrt{2}$	1.78856e-04	1.63416e-04	1.27086e-04	1.11539e-04	7.52475e-05	6.01940e-05	2.34079e-05	1.33199e-05
$0.00005\sqrt{2}$	3.26576e-04	2.95699e-04	2.23012e-04	1.92021e-04	1.19311e-04	9.03012e-05	1.02527e-05	3.94257e-06
$0.00025\sqrt{2}$	1.27244e-03	1.11825e-03	7.53810e-04	6.03033e-04	2.34498e-04	1.33438e-04	5.21959e-06	8.51091e-07
$0.0005\sqrt{2}$	2.23609e-03	1.92827e-03	1.19703e-03	9.06023e-04	1.02865e-04	3.95561e-05	2.86981e-07	2.26234e-08
$0.0025\sqrt{2}$	7.63194e-03	6.11934e-03	2.37626e-03	1.35232e-03	5.28916e-05	8.62523e-06	2.08854e-07	3.16128e-09
$0.005\sqrt{2}$	1.22459e-02	9.29535e-03	1.05317e-03	4.05310e-04	2.93885e-06	2.31741e-07	1.71341e-07	1.81355e-09
$0.025\sqrt{2}$	2.59467e-02	1.48508e-02	5.77096e-04	9.46765e-05	2.28060e-06	3.46688e-08	6.43799e-08	1.48504e-10
$0.05\sqrt{2}$	1.20991e-02	4.82641e-03	3.41274e-05	2.73175e-06	1.99059e-06	2.13628e-08	5.12610e-09	4.63200e-12
$0.25\sqrt{2}$	8.86995e-03	1.76280e-03	3.61200e-05	6.40832e-07	1.01980e-06	2.74399e-09	1.08065e-08	2.94100e-12
$0.5\sqrt{2}$	6.69254e-04	7.72891e-05	3.95830e-05	6.07427e-07	1.02245e-07	1.31780e-10	6.77960e-10	8.90000e-14
$\sqrt{2}$	<b>9.46190e-04</b>	7.99536e-05	<b>1.95654e-05</b>	1.50152e-07	<b>1.34843e-07</b>	1.17805e-10	<b>9.41420e-10</b>	8.70000e-14
$1.5\sqrt{2}$	<b>1.15976e-03</b>	8.43824e-05	<b>8.09230e-06</b>	6.48018e-08	<b>1.54205e-07</b>	1.11643e-10	<b>1.14788e-09</b>	8.90000e-14
$2\sqrt{2}$	<b>1.31892e-03</b>	<b>8.69224e-05</b>	<b>1.19395e-05</b>	<b>1.03459e-07</b>	<b>1.61341e-07</b>	<b>1.02475e-10</b>	<b>1.30345e-09</b>	<b>8.90000e-14</b>
$2.5\sqrt{2}$	<b>1.42596e-03</b>	<b>8.69355e-05</b>	<b>4.03618e-05</b>	<b>3.81312e-07</b>	<b>4.29726e-07</b>	<b>4.11336e-10</b>	<b>1.41031e-09</b>	<b>9.10000e-14</b>
$3\sqrt{2}$	<b>1.48147e-03</b>	<b>8.43898e-05</b>	<b>1.18125e-05</b>	<b>7.72122e-08</b>	<b>2.97216e-07</b>	<b>2.65129e-10</b>	<b>1.46948e-09</b>	<b>2.80000e-14</b>
$3.5\sqrt{2}$	<b>1.48541e-03</b>	<b>7.94442e-05</b>	<b>1.53229e-06</b>	<b>1.14664e-08</b>	<b>1.87822e-07</b>	<b>1.57006e-10</b>	<b>1.48153e-09</b>	<b>8.80000e-14</b>
$4\sqrt{2}$	<b>3.36475e-03</b>	<b>2.84682e-04</b>	<b>2.39622e-05</b>	<b>2.02050e-07</b>	<b>9.72973e-08</b>	<b>7.64040e-11</b>	<b>3.88671e-09</b>	<b>3.46000e-13</b>
$4.5\sqrt{2}$	<b>2.64597e-03</b>	<b>2.15332e-04</b>	<b>1.37227e-05</b>	<b>7.93839e-08</b>	<b>2.32353e-08</b>	<b>1.71490e-11</b>	<b>3.10890e-09</b>	<b>2.72000e-13</b>
$5\sqrt{2}$	<b>1.99944e-03</b>	<b>1.56676e-04</b>	<b>5.39278e-06</b>	<b>3.65002e-08</b>	<b>3.58311e-08</b>	<b>2.48570e-11</b>	<b>2.41239e-09</b>	<b>2.07000e-13</b>
$5.5\sqrt{2}$	<b>1.41812e-03</b>	<b>1.07048e-04</b>	<b>1.20543e-05</b>	<b>9.33781e-08</b>	<b>8.08487e-08</b>	<b>5.26120e-11</b>	<b>1.78784e-09</b>	<b>1.44000e-13</b>
$6\sqrt{2}$	<b>8.97427e-04</b>	<b>6.52615e-05</b>	<b>3.83669e-05</b>	<b>3.34579e-07</b>	<b>1.12456e-07</b>	<b>6.84910e-11</b>	<b>1.22896e-09</b>	<b>1.00000e-13</b>

Tabela 3.5: Erros relativos entre  $Ki_1(y)$  e a aproximação linear e quadrática com a remoção de  $y \ln(y)$

$y$	N = 100		N = 1000		N = 10000		N = 100000	
	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática
$0.000025\sqrt{2}$	7.04031e-09	8.90645e-09	1.13564e-10	1.75026e-10	1.56700e-12	2.60000e-12	2.00000e-14	3.30000e-14
$0.000005\sqrt{2}$	1.40810e-08	1.78123e-08	2.27135e-10	3.49857e-10	3.13500e-12	5.17100e-12	4.00000e-14	6.20000e-14
$0.000025\sqrt{2}$	7.04189e-08	8.90338e-08	1.13587e-09	1.74149e-09	1.56510e-11	2.47050e-11	1.73000e-13	1.82000e-13
$0.00005\sqrt{2}$	1.40869e-07	1.77995e-07	2.27211e-09	3.46349e-09	3.11590e-11	4.66130e-11	7.15000e-13	3.84000e-13
$0.00025\sqrt{2}$	7.05426e-07	8.86867e-07	1.13572e-08	1.65474e-08	1.34993e-10	1.35932e-10	3.80500e-12	6.50000e-13
$0.00005\sqrt{2}$	1.41318e-06	1.76561e-06	2.26342e-08	3.12228e-08	5.44772e-10	2.79113e-10	6.08000e-13	4.60000e-14
$0.0025\sqrt{2}$	7.13198e-06	8.48874e-06	9.84260e-08	9.10761e-08	2.79788e-09	4.51034e-10	8.21400e-12	1.07000e-13
$0.005\sqrt{2}$	1.43521e-05	1.61186e-05	3.81671e-07	1.76853e-07	4.39282e-10	3.10800e-11	2.41760e-11	2.12000e-13
$0.025\sqrt{2}$	6.57662e-05	4.88211e-05	1.90540e-06	2.66427e-07	5.68387e-09	6.54680e-11	1.60194e-10	2.76000e-13
$0.05\sqrt{2}$	2.41202e-04	8.10919e-05	3.00443e-07	1.77375e-08	1.66038e-08	1.23220e-10	4.22470e-11	2.60000e-14
$0.25\sqrt{2}$	1.36494e-03	9.39307e-05	4.29420e-06	2.91556e-08	1.21062e-07	1.23785e-10	1.27955e-09	1.32000e-13
$0.5\sqrt{2}$	2.61447e-04	3.92004e-06	1.46782e-05	3.32489e-08	3.74732e-08	7.27500e-12	2.48340e-10	5.00000e-15
$1\sqrt{2}$	1.22152e-03	8.48669e-06	2.44843e-05	1.28141e-08	1.68667e-07	9.90300e-12	1.17730e-09	7.00000e-15
$1.5\sqrt{2}$	3.49014e-03	4.03983e-05	2.39208e-05	2.86985e-08	4.54660e-07	4.89820e-11	3.38405e-09	3.80000e-14
$2\sqrt{2}$	8.23899e-03	1.00223e-04	7.38678e-05	1.13700e-07	9.93888e-07	1.11603e-10	8.02917e-09	1.13000e-13
$2.5\sqrt{2}$	1.76332e-02	2.01529e-04	4.97664e-04	8.54370e-07	5.27001e-06	9.13318e-10	1.72851e-08	1.76000e-13
$3\sqrt{2}$	3.55511e-02	3.64901e-04	2.82658e-04	3.23515e-07	7.10534e-06	1.10639e-09	3.51113e-08	2.45000e-13
$3.5\sqrt{2}$	6.86684e-02	6.19825e-04	7.10732e-05	8.73218e-08	8.68762e-06	1.18915e-09	6.84959e-08	1.13100e-12
$4\sqrt{2}$	3.18310e-01	4.20335e-03	2.15136e-03	2.75734e-06	8.69489e-06	1.03607e-09	3.47212e-07	3.27500e-12
$4.5\sqrt{2}$	4.82237e-01	5.64467e-03	2.37306e-03	1.92311e-06	4.01685e-06	4.13626e-10	5.37301e-07	5.25400e-12
$5\sqrt{2}$	7.03769e-01	7.31159e-03	1.81190e-03	1.58291e-06	1.20124e-05	1.06843e-09	8.08580e-07	4.14600e-12
$5.5\sqrt{2}$	9.66670e-01	8.93937e-03	7.89104e-03	7.28611e-06	5.27099e-05	4.06456e-09	1.16543e-06	2.51690e-11
$6\sqrt{2}$	1.18793e+00	9.81265e-03	4.90716e-02	4.72656e-05	1.42974e-04	9.65572e-09	1.56230e-06	2.92950e-11

As Tabelas 3.6 e 3.7 apresentam os resultados para  $Ki_2$  gerados pelo algoritmo sem e com a soma de  $y^2 \ln(y)$ , respectivamente. Analisando as tabelas, novamente observa-se que, na grande maioria dos resultados, os polinômios de segundo grau obtiveram resultados melhores que polinômios de primeiro grau. Entretanto, diferentemente de  $Ki_1$ , que quando valores estão próximos de 0 a discrepância entre a aproximação linear e a quadrática é pequena, aqui a diferença entre ambos é significativa, principalmente quando se aumenta o número de nós. Vide Tabela 3.7 quando  $N = 100000$  e  $y = 0,0000025\sqrt{2}$ , em que a diferença entre a aproximação linear e quadrática é aproximadamente seis casas decimais.

Os valores em negrito representam o menor erro relativo comparando elemento a elemento das Tabelas 3.6 e 3.7. É possível observar que a soma do logaritmo apresenta erros menores para valores menores ou iguais a  $0,5\sqrt{2}$ , para aproximação quadrática, e  $0,05\sqrt{2}$ , para aproximação linear, destacado pelos valores em negrito na Tabela 3.7. Já para valores maiores que estes, não somar o logaritmo apresenta melhores resultados, vide valores em negrito na Tabela 3.6.

Portanto, uma aproximação eficiente para  $Ki_2$  é realizar a interpolação por polinômio quadrático juntamente com a soma do logaritmo para valores menores ou iguais a  $0,5\sqrt{2}$  e apenas a interpolação polinomial para valores maiores que este.

Os resultados para  $Ki_3$  são apresentados nas Tabelas 3.8 e 3.9. Diferentemente das outras ordens discutidas, para a função de terceira ordem a realização da operação de subtração de  $y^3 \ln(y)$  demonstrou-se ser extremamente ineficiente, visto que poucos valores apresentaram menor erro do que quando não é realizada a operação. Os valores em negrito na Tabela 3.9, representam os valores onde o erro relativo foi menor que o apresentado para o código sem a realização da subtração. Assim sendo, para a função de terceira ordem a melhor aproximação é feita sem a subtração, quando o número de intervalos é maior que 100, quando menor ou igual a este a subtração é mais efetiva.

Tabela 3.6: Erros relativos entre  $Ki_2(y)$  e a aproximação linear e quadrática sem a soma de  $\frac{y^2}{2} \ln(\frac{y}{2})$

$y$	N = 100		N = 1000		N = 10000		N = 100000	
	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática
$0.000025\sqrt{2}$	6.92913e-07	2.43631e-07	1.09887e-07	2.44459e-08	1.49794e-08	2.40671e-09	1.82529e-09	2.15512e-10
$0.000005\sqrt{2}$	1.38567e-06	4.87137e-07	2.19616e-07	4.87927e-08	2.97992e-08	4.74289e-09	3.49082e-09	3.89247e-10
$0.000025\sqrt{2}$	6.92294e-06	2.43133e-06	1.09239e-06	2.40660e-07	1.43271e-07	2.15522e-08	1.17227e-08	9.34440e-10
$0.00005\sqrt{2}$	1.38335e-05	4.85301e-06	2.17181e-06	4.74289e-07	2.73456e-07	3.89285e-08	1.73064e-08	9.17057e-10
$0.00025\sqrt{2}$	6.87401e-05	2.39447e-05	1.04056e-05	2.15608e-06	9.09581e-07	9.34903e-08	2.68791e-08	6.08326e-10
$0.0005\sqrt{2}$	1.36533e-04	4.72107e-05	1.97994e-05	3.89631e-06	1.29592e-06	9.17964e-08	2.42258e-09	2.74120e-11
$0.0025\sqrt{2}$	6.51204e-04	2.15394e-04	6.49527e-05	9.39421e-06	1.91387e-06	6.11317e-08	6.63170e-09	1.76180e-11
$0.005\sqrt{2}$	1.23532e-03	3.91032e-04	8.68050e-05	9.26527e-06	1.67823e-07	2.76805e-09	9.54271e-09	2.00740e-11
$0.025\sqrt{2}$	4.04291e-03	9.77728e-04	1.18288e-04	6.39117e-06	4.17856e-07	1.84448e-09	1.17882e-08	7.82000e-12
$0.05\sqrt{2}$	4.72348e-03	9.87131e-04	1.00207e-05	3.01476e-07	5.72745e-07	2.18895e-09	1.46814e-09	4.69000e-13
$0.25\sqrt{2}$	<b>6.00285e-03</b>	8.41828e-04	<b>2.28741e-05</b>	2.55611e-07	<b>6.45567e-07</b>	1.08565e-09	<b>6.83606e-09</b>	1.16100e-12
$0.5\sqrt{2}$	<b>5.27895e-04</b>	4.91136e-05	<b>3.09192e-05</b>	3.69726e-07	<b>7.96837e-08</b>	7.96200e-11	<b>5.28308e-10</b>	5.40000e-14
$1\sqrt{2}$	<b>8.43027e-04</b>	<b>6.45125e-05</b>	<b>1.73728e-05</b>	<b>1.19431e-07</b>	<b>1.19726e-07</b>	<b>9.36120e-11</b>	<b>8.35857e-10</b>	<b>6.80000e-14</b>
$1.5\sqrt{2}$	<b>1.08050e-03</b>	<b>7.42744e-05</b>	<b>7.53004e-06</b>	<b>5.66992e-08</b>	<b>1.43464e-07</b>	<b>9.75980e-11</b>	<b>1.06792e-09</b>	<b>8.00000e-14</b>
$2\sqrt{2}$	<b>1.25643e-03</b>	<b>7.98113e-05</b>	<b>1.13688e-05</b>	<b>9.47160e-08</b>	<b>1.53598e-07</b>	<b>9.37630e-11</b>	<b>1.24089e-09</b>	<b>8.30000e-14</b>
$2.5\sqrt{2}$	<b>1.37605e-03</b>	<b>8.17565e-05</b>	<b>3.89457e-05</b>	<b>3.58031e-07</b>	<b>4.14574e-07</b>	<b>3.86058e-10</b>	<b>1.36056e-09</b>	<b>8.60000e-14</b>
$3\sqrt{2}$	<b>1.44144e-03</b>	<b>8.05581e-05</b>	<b>1.14926e-05</b>	<b>7.36254e-08</b>	<b>2.89161e-07</b>	<b>2.52778e-10</b>	<b>1.42964e-09</b>	<b>8.40000e-14</b>
$3.5\sqrt{2}$	<b>1.45341e-03</b>	<b>7.65996e-05</b>	<b>1.49938e-06</b>	<b>1.10487e-08</b>	<b>1.83779e-07</b>	<b>1.51255e-10</b>	<b>1.44962e-09</b>	<b>7.40000e-14</b>
$4\sqrt{2}$	<b>3.30840e-03</b>	<b>2.76773e-04</b>	<b>2.35436e-05</b>	<b>1.96121e-07</b>	<b>9.55911e-08</b>	<b>7.41480e-11</b>	<b>3.81853e-09</b>	<b>3.41000e-13</b>
$4.5\sqrt{2}$	<b>2.60895e-03</b>	<b>2.10376e-04</b>	<b>1.35227e-05</b>	<b>7.74583e-08</b>	<b>2.28967e-08</b>	<b>1.67410e-11</b>	<b>3.06358e-09</b>	<b>2.68000e-13</b>
$5\sqrt{2}$	<b>1.97570e-03</b>	<b>1.53638e-04</b>	<b>5.32647e-06</b>	<b>3.57585e-08</b>	<b>3.53898e-08</b>	<b>2.43530e-11</b>	<b>2.38268e-09</b>	<b>1.97000e-13</b>
$5.5\sqrt{2}$	<b>1.40364e-03</b>	<b>1.05274e-04</b>	<b>1.19275e-05</b>	<b>9.17650e-08</b>	<b>7.99959e-08</b>	<b>5.16860e-11</b>	<b>1.76898e-09</b>	<b>1.35000e-13</b>
$6\sqrt{2}$	<b>8.89457e-04</b>	<b>6.43261e-05</b>	<b>3.80177e-05</b>	<b>3.29604e-07</b>	<b>1.11429e-07</b>	<b>6.74800e-11</b>	<b>1.21772e-09</b>	<b>1.00000e-13</b>

Tabela 3.7: Erros relativos entre  $Ki_2(y)$  e a aproximação linear e quadrática com a soma de  $\frac{y^2}{2} \ln(\frac{y}{2})$

$y$	N = 100			N = 1000			N = 10000			N = 100000		
	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática
$0.000025\sqrt{2}$	2.85945e-07	1.36205e-09	2.85564e-08	2.37700e-12	2.84651e-09	3.00000e-15	2.75561e-10	0.00000e+00	2.75561e-10	0.00000e+00	2.75561e-10	0.00000e+00
$0.000005\sqrt{2}$	5.71874e-07	2.72400e-09	5.70930e-08	4.75200e-12	5.67285e-09	7.00000e-15	5.30926e-10	0.00000e+00	5.30926e-10	0.00000e+00	5.30926e-10	0.00000e+00
$0.000025\sqrt{2}$	2.85869e-06	1.36159e-08	2.84670e-07	2.36770e-11	2.75575e-08	3.10000e-14	1.84674e-09	2.00000e-15	1.84674e-09	2.00000e-15	1.84674e-09	2.00000e-15
$0.00005\sqrt{2}$	5.71567e-06	2.72217e-08	5.67351e-07	4.71590e-11	5.30979e-08	6.20000e-14	3.05994e-09	0.00000e+00	3.05994e-09	0.00000e+00	3.05994e-09	0.00000e+00
$0.00025\sqrt{2}$	2.85102e-05	1.35700e-07	2.75717e-06	2.27859e-10	1.84766e-07	2.00000e-13	5.49879e-09	1.00000e-15	5.49879e-09	1.00000e-15	5.49879e-09	1.00000e-15
$0.0005\sqrt{2}$	5.68498e-05	2.70377e-07	5.31518e-06	4.35893e-10	3.06300e-07	8.47000e-13	5.33988e-10	0.00000e+00	5.33988e-10	0.00000e+00	5.33988e-10	0.00000e+00
$0.0025\sqrt{2}$	2.77382e-04	1.31077e-06	1.85691e-05	1.40458e-09	5.52628e-07	3.89600e-12	1.86111e-09	1.00000e-15	1.86111e-09	1.00000e-15	1.86111e-09	1.00000e-15
$0.005\sqrt{2}$	5.37390e-04	2.51778e-06	3.09387e-05	5.73530e-09	5.39325e-08	4.56000e-13	3.04744e-09	3.00000e-15	3.04744e-09	3.00000e-15	3.04744e-09	3.00000e-15
$0.025\sqrt{2}$	1.95176e-03	8.36563e-06	5.80662e-05	2.51720e-08	1.95495e-07	4.68500e-12	5.51365e-09	1.90000e-14	5.51365e-09	1.90000e-14	5.51365e-09	1.90000e-14
$0.05\sqrt{2}$	3.42758e-03	3.21685e-05	5.94782e-06	2.90746e-09	3.36023e-07	1.84520e-11	8.59140e-10	4.00000e-15	8.59140e-10	4.00000e-15	8.59140e-10	4.00000e-15
$0.25\sqrt{2}$	9.47730e-03	1.52409e-04	3.15458e-05	3.09245e-08	8.89653e-07	1.29147e-10	9.40878e-09	1.38000e-13	9.40878e-09	1.38000e-13	9.40878e-09	1.38000e-13
$0.5\sqrt{2}$	1.53543e-03	2.09685e-05	8.63337e-05	1.38514e-07	2.20513e-07	2.92090e-11	1.46140e-09	1.90000e-14	1.46140e-09	1.90000e-14	1.46140e-09	1.90000e-14
$1\sqrt{2}$	7.61677e-03	8.78506e-05	1.51639e-04	1.50238e-07	1.04451e-06	1.17157e-10	7.29032e-09	8.30000e-14	7.29032e-09	8.30000e-14	7.29032e-09	8.30000e-14
$1.5\sqrt{2}$	2.65329e-02	2.33320e-04	1.80817e-04	1.68351e-07	3.43403e-06	2.87958e-10	2.55588e-08	2.35000e-13	2.55588e-08	2.35000e-13	2.55588e-08	2.35000e-13
$2\sqrt{2}$	7.79294e-02	5.18151e-04	6.96382e-04	5.88504e-07	9.35633e-06	5.77845e-10	7.55849e-08	4.96000e-13	7.55849e-08	4.96000e-13	7.55849e-08	4.96000e-13
$2.5\sqrt{2}$	2.05697e-01	1.04848e-03	5.79960e-03	4.43368e-06	6.13089e-05	4.73655e-09	2.01048e-07	1.26500e-12	2.01048e-07	1.26500e-12	2.01048e-07	1.26500e-12
$3\sqrt{2}$	5.02872e-01	2.00254e-03	3.99461e-03	1.76827e-06	1.00387e-04	6.04472e-09	4.95992e-07	1.97200e-12	4.95992e-07	1.97200e-12	4.95992e-07	1.97200e-12
$3.5\sqrt{2}$	1.15637e+00	3.66555e-03	1.19787e-03	5.14482e-07	1.46313e-04	6.99746e-09	1.15343e-06	3.23600e-12	1.15343e-06	3.23600e-12	1.15343e-06	3.23600e-12
$4\sqrt{2}$	6.36434e+00	2.72976e-02	4.24843e-02	1.76807e-05	1.71515e-04	6.62864e-09	6.84854e-06	2.28890e-11	6.84854e-06	2.28890e-11	6.84854e-06	2.28890e-11
$4.5\sqrt{2}$	1.10925e+01	3.99577e-02	5.39789e-02	1.34430e-05	9.13633e-05	2.88312e-09	1.22203e-05	3.18600e-11	1.22203e-05	3.18600e-11	1.22203e-05	3.18600e-11
$5\sqrt{2}$	1.83783e+01	5.63361e-02	4.68959e-02	1.20604e-05	3.10778e-04	8.17653e-09	2.09182e-05	1.31025e-10	2.09182e-05	1.31025e-10	2.09182e-05	1.31025e-10
$5.5\sqrt{2}$	2.83343e+01	7.47293e-02	2.29673e-01	6.03166e-05	1.53307e-03	3.36971e-08	3.38950e-05	1.86079e-10	3.38950e-05	1.86079e-10	3.38950e-05	1.86079e-10
$6\sqrt{2}$	3.87025e+01	8.86372e-02	1.59004e+00	4.23387e-04	4.62831e-03	8.54304e-08	5.05741e-05	3.66170e-11	5.05741e-05	3.66170e-11	5.05741e-05	3.66170e-11

Tabela 3.8: Erros relativos entre  $Ki_3(y)$  e a aproximação linear e quadrática sem a remoção de  $y^3 \ln(\frac{y}{2})$

	N = 100			N = 1000			N = 10000			N = 100000		
	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática
$0.000025\sqrt{2}$	3.21634e-07	4.30856e-08	3.48512e-08	7.75064e-10	3.51641e-09	1.11470e-11	3.40971e-10	1.11470e-11	3.40971e-10	1.11470e-11	3.40971e-10	1.39000e-13
$0.00005\sqrt{2}$	6.43247e-07	8.61663e-08	6.96778e-08	1.54924e-09	7.00784e-09	2.21690e-11	6.56946e-10	2.21690e-11	6.56946e-10	2.21690e-11	6.56946e-10	2.62000e-13
$0.00025\sqrt{2}$	3.21535e-06	4.30635e-07	3.47402e-07	7.71073e-09	3.40405e-08	1.05891e-10	2.28490e-09	1.05891e-10	2.28490e-09	1.05891e-10	2.28490e-09	7.50000e-13
$0.00005\sqrt{2}$	6.42849e-06	8.60779e-07	6.92335e-07	1.53332e-08	6.55846e-08	1.99837e-10	3.78413e-09	1.99837e-10	3.78413e-09	1.99837e-10	3.78413e-09	1.62200e-12
$0.00025\sqrt{2}$	3.20541e-05	4.28431e-06	3.36296e-06	7.31962e-08	2.28084e-07	5.82806e-10	6.78891e-09	5.82806e-10	6.78891e-09	5.82806e-10	6.78891e-09	2.77500e-12
$0.0005\sqrt{2}$	6.38873e-05	8.51991e-06	6.47924e-06	1.37995e-07	3.76699e-07	1.20546e-09	6.58189e-10	1.20546e-09	6.58189e-10	1.20546e-09	6.58189e-10	1.97000e-13
$0.0025\sqrt{2}$	3.10611e-04	4.06904e-05	2.25360e-05	4.00481e-07	6.71282e-07	1.96335e-09	2.26597e-09	1.96335e-09	2.26597e-09	1.96335e-09	2.26597e-09	4.61000e-13
$0.005\sqrt{2}$	5.99173e-04	7.67752e-05	3.65614e-05	7.87231e-07	6.47330e-08	1.35651e-10	3.66054e-09	1.35651e-10	3.66054e-09	1.35651e-10	3.66054e-09	9.24000e-13
$0.025\sqrt{2}$	2.10847e-03	2.25225e-04	6.30199e-05	1.18831e-06	2.15477e-07	2.88137e-10	6.07772e-09	2.88137e-10	6.07772e-09	2.88137e-10	6.07772e-09	1.21200e-12
$0.05\sqrt{2}$	3.10219e-03	3.93305e-04	5.95807e-06	7.91154e-08	3.38315e-07	5.46135e-10	8.65947e-10	5.46135e-10	8.65947e-10	5.46135e-10	8.65947e-10	1.16000e-13
$0.25\sqrt{2}$	4.86514e-03	5.45904e-04	1.80005e-05	1.49777e-07	5.07935e-07	6.33248e-10	5.37701e-09	6.33248e-10	5.37701e-09	6.33248e-10	5.37701e-09	6.77000e-13
$0.5\sqrt{2}$	4.59028e-04	3.72937e-05	2.67520e-05	2.74070e-07	6.88652e-08	5.87810e-11	4.56555e-10	5.87810e-11	4.56555e-10	5.87810e-11	4.56555e-10	3.90000e-14
$1\sqrt{2}$	7.81246e-04	5.60262e-05	1.60670e-05	1.02836e-07	1.10723e-07	8.05590e-11	7.72994e-10	8.05590e-11	7.72994e-10	8.05590e-11	7.72994e-10	5.90000e-14
$1.5\sqrt{2}$	1.02796e-03	6.79486e-05	7.15809e-06	5.16715e-08	1.36362e-07	8.89160e-11	1.01504e-09	8.89160e-11	1.01504e-09	8.89160e-11	1.01504e-09	7.20000e-14
$2\sqrt{2}$	1.21227e-03	7.49940e-05	1.09659e-05	8.88209e-08	1.48133e-07	8.78920e-11	1.19674e-09	8.78920e-11	1.19674e-09	8.78920e-11	1.19674e-09	8.00000e-14
$2.5\sqrt{2}$	1.33917e-03	7.80521e-05	3.78995e-05	3.41426e-07	4.03385e-07	3.68036e-10	1.32382e-09	3.68036e-10	1.32382e-09	3.68036e-10	1.32382e-09	8.50000e-14
$3\sqrt{2}$	1.41086e-03	7.77056e-05	1.12483e-05	7.09608e-08	2.83008e-07	2.43603e-10	1.39921e-09	2.43603e-10	1.39921e-09	2.43603e-10	1.39921e-09	8.10000e-14
$3.5\sqrt{2}$	1.42832e-03	7.44156e-05	1.47356e-06	1.07285e-08	1.80608e-07	1.46860e-10	1.42460e-09	1.46860e-10	1.42460e-09	1.46860e-10	1.42460e-09	7.80000e-14
$4\sqrt{2}$	3.26316e-03	2.70532e-04	2.32081e-05	1.91459e-07	9.42241e-08	7.23810e-11	3.76391e-09	7.23810e-11	3.76391e-09	7.23810e-11	3.76391e-09	3.31000e-13
$4.5\sqrt{2}$	2.57872e-03	2.06387e-04	1.33596e-05	7.59132e-08	2.26205e-08	1.63940e-11	3.02662e-09	1.63940e-11	3.02662e-09	1.63940e-11	3.02662e-09	2.56000e-13
$5\sqrt{2}$	1.95603e-03	1.51152e-04	5.27159e-06	3.51530e-08	3.50246e-08	2.39360e-11	2.35809e-09	2.39360e-11	2.35809e-09	2.39360e-11	2.35809e-09	1.92000e-13
$5.5\sqrt{2}$	1.39149e-03	1.03802e-04	1.18213e-05	9.04288e-08	7.92810e-08	5.09400e-11	1.75318e-09	5.09400e-11	1.75318e-09	5.09400e-11	1.75318e-09	1.51000e-13
$6\sqrt{2}$	8.82698e-04	6.35405e-05	3.77218e-05	3.25431e-07	1.10557e-07	6.66010e-11	1.20820e-09	6.66010e-11	1.20820e-09	6.66010e-11	1.20820e-09	8.90000e-14

Tabela 3.9: Erros relativos entre  $Ki_3(y)$  e a aproximação linear e quadrática com a remoção de  $y^3 \ln(\frac{y}{2})$

	N = 100			N = 1000			N = 10000			N = 100000		
	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática	Linear	Quadrática
$0.000025\sqrt{2}$	4.25288e-07	<b>3.94033e-08</b>	3.69243e-08	2.12120e-09	3.54750e-09	3.82790e-11	3.41385e-10	3.82790e-11	3.41385e-10	3.82790e-11	3.41385e-10	5.27000e-13
$0.000005\sqrt{2}$	8.50554e-07	<b>7.87992e-08</b>	7.38239e-08	4.23980e-09	7.07003e-09	7.61160e-11	6.57770e-10	7.61160e-11	6.57770e-10	7.61160e-11	6.57770e-10	9.94000e-13
$0.000025\sqrt{2}$	4.25192e-06	<b>3.93696e-07</b>	3.68132e-07	2.10955e-08	3.43509e-08	3.63244e-10	2.28847e-09	3.63244e-10	2.28847e-09	3.63244e-10	2.28847e-09	2.91400e-12
$0.00005\sqrt{2}$	8.50173e-06	<b>7.86644e-07</b>	7.33795e-07	4.19334e-08	6.62022e-08	6.84479e-10	3.79868e-09	6.84479e-10	3.79868e-09	6.84479e-10	3.79868e-09	5.99600e-12
$0.00025\sqrt{2}$	4.24236e-05	<b>3.90352e-06</b>	3.56992e-06	1.99599e-07	2.30748e-07	1.97967e-09	6.86434e-09	1.97967e-09	6.86434e-09	1.97967e-09	6.86434e-09	9.71200e-12
$0.0005\sqrt{2}$	8.46332e-05	<b>7.73376e-06</b>	6.89095e-06	3.75033e-07	3.87143e-07	3.87039e-09	6.70037e-10	3.87039e-09	6.70037e-10	3.87039e-09	6.70037e-10	6.68000e-13
$0.0025\sqrt{2}$	4.14412e-04	<b>3.58848e-05</b>	2.42993e-05	1.06420e-06	7.21903e-07	5.63751e-09	2.41581e-09	5.63751e-09	2.41581e-09	5.63751e-09	2.41581e-09	1.36900e-12
$0.005\sqrt{2}$	8.06103e-04	<b>6.53917e-05</b>	4.29378e-05	1.76131e-06	7.23674e-08	3.59333e-10	4.08159e-09	3.59333e-10	4.08159e-09	3.59333e-10	4.08159e-09	2.48200e-12
$0.025\sqrt{2}$	2.99580e-03	<b>1.45927e-04</b>	8.95792e-05	1.58543e-06	2.96783e-07	4.62079e-10	8.36956e-09	4.62079e-10	8.36956e-09	4.62079e-10	8.36956e-09	1.95800e-12
$0.05\sqrt{2}$	5.51158e-03	4.14980e-04	9.55987e-06	<b>4.90423e-08</b>	5.39008e-07	<b>4.07609e-10</b>	1.37748e-09	5.39008e-07	1.37748e-09	<b>4.07609e-10</b>	1.37748e-09	<b>8.90000e-14</b>
$0.25\sqrt{2}$	5.48021e-03	4.04403e-03	2.77684e-05	7.48459e-07	7.84460e-07	3.11248e-09	8.31995e-09	7.84460e-07	8.31995e-09	3.11248e-09	8.31995e-09	3.31000e-12
$0.5\sqrt{2}$	1.83923e-03	6.39492e-04	9.11882e-05	4.10974e-06	2.26304e-07	8.63005e-10	1.49774e-09	2.26304e-07	1.49774e-09	8.63005e-10	1.49774e-09	5.84000e-13
$1\sqrt{2}$	4.16608e-02	3.45274e-03	8.07332e-04	5.76732e-06	5.55884e-06	4.49083e-09	3.87914e-08	5.55884e-06	3.87914e-08	4.49083e-09	3.87914e-08	3.28500e-12
$1.5\sqrt{2}$	2.54260e-01	1.17084e-02	1.71479e-03	8.28829e-06	3.25192e-05	1.41442e-08	2.42019e-07	3.25192e-05	2.42019e-07	1.41442e-08	2.42019e-07	1.14010e-11
$2\sqrt{2}$	1.05271e+00	3.27204e-02	9.36703e-03	3.66127e-05	1.25620e-04	3.58477e-08	1.01480e-06	1.25620e-04	1.01480e-06	3.58477e-08	1.01480e-06	3.28370e-11
$2.5\sqrt{2}$	3.56269e+00	8.17330e-02	1.00340e-01	3.41778e-04	1.05877e-03	3.64060e-07	3.47129e-06	1.05877e-03	3.47129e-06	3.64060e-07	3.47129e-06	8.16850e-11
$3\sqrt{2}$	1.05957e+01	1.88856e-01	8.40932e-02	1.65100e-04	2.11277e-03	5.63779e-07	1.04372e-05	2.11277e-03	1.04372e-05	5.63779e-07	1.04372e-05	1.90101e-10
$3.5\sqrt{2}$	2.86654e+01	4.10259e-01	2.97158e-02	5.71712e-05	3.62722e-03	7.76535e-07	2.85912e-05	3.62722e-03	2.85912e-05	7.76535e-07	2.85912e-05	4.18268e-10
$4\sqrt{2}$	1.83658e+02	3.62100e+00	1.21282e+00	2.29701e-03	4.89161e-03	8.59705e-07	1.95307e-04	4.89161e-03	1.95307e-04	8.59705e-07	1.95307e-04	3.95823e-09
$4.5\sqrt{2}$	3.61102e+02	6.07912e+00	1.74053e+00	2.00718e-03	2.94581e-03	4.31573e-07	3.93997e-04	2.94581e-03	3.93997e-04	4.31573e-07	3.93997e-04	6.74217e-09
$5\sqrt{2}$	6.66190e+02	9.70392e+00	1.68715e+00	2.04507e-03	1.11767e-02	1.38177e-06	7.52271e-04	1.11767e-02	7.52271e-04	1.38177e-06	7.52271e-04	9.60931e-09
$5.5\sqrt{2}$	1.13180e+03	1.44130e+01	9.12004e+00	1.14817e-02	6.08401e-02	6.40916e-06	1.34511e-03	6.08401e-02	1.34511e-03	6.40916e-06	1.34511e-03	1.36541e-08
$6\sqrt{2}$	1.68906e+03	1.89608e+01	6.90756e+01	8.95850e-02	2.00907e-01	1.81091e-05	2.19530e-03	2.00907e-01	2.19530e-03	1.81091e-05	2.19530e-03	2.45077e-08



## 4 METODOLOGIA E IMPLEMENTAÇÃO COMPUTACIONAL

Este capítulo destina-se a apresentar a metodologia numérica bem como os aspectos da implementação computacional que foram utilizados no desenvolvimento deste trabalho. A discretização do problema será desenvolvida a partir da formulação integral apresentada na seção 2.1. Mas especificamente, será considerada a formulação integral da equação (2.25), isto é,

$$\Phi(\mathbf{x}) - \sigma_s(L_g\Phi)(\mathbf{x}) = (L_gQ)(\mathbf{x}) + (L_bB)(\mathbf{x}), \quad (4.1)$$

onde os operadores  $L_g$  e  $L_b$  são dados na equação (2.21).

### 4.1 Metodologia Numérica

A metodologia utilizada é, em sua essência, uma combinação do método de Nyström com um processo iterativo construído a partir da série de Neumann. Primeiramente, observa-se que embora os operadores  $L_g$  e  $L_b$  apresentados nas equações (2.21) estejam matematicamente bem definidos, estes possuem singularidades em seus núcleos quando  $\mathbf{x} = \mathbf{y}$  (veja equação (2.22) e (2.23)). Na prática, os núcleos  $k_1$  e  $k_2$  não estão definidos na diagonal  $\mathbf{x} = \mathbf{y}$ , mas isso não impede da integral estabelecida por  $L_g$  convergir. Porém, se a discretização passar perto de  $\mathbf{x} = \mathbf{y}$ , os coeficientes das matrizes ficam arbitrariamente grandes, provocando instabilidades numéricas. Logo, tendo em vista a obtenção de melhores resultados numéricos, faz-se necessário o tratamento dessas singularidades antes da discretização.

A singularidade do primeiro operador pode-se ser removida utilizando a seguinte estratégia

$$(L_gS)(\mathbf{x}) = \int_D [S(\mathbf{y}) - S(\mathbf{x})] k_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{y} + S(\mathbf{x}) \int_D k_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{y}. \quad (4.2)$$

Essa técnica foi utilizada tendo em vista que  $S(\mathbf{x})$  envolve a solução do problema e, portanto, é desconhecido. Assim, o primeiro termo do lado direito de (4.2) fica numericamente melhor comportado, visto que  $S(\mathbf{y}) - S(\mathbf{x}) = 0$  quando  $\mathbf{x} = \mathbf{y}$ . O segundo termo continua numericamente mal comportado, porém a parte singular desse termo pode ser integrada analiticamente.

Já para o  $L_b$ , faz-se necessária outra estratégia, visto que tal operador atua na fronteira de  $D$  e esta singularidade difere-se da apresentada pelo operador  $L_g$ . Como todos os seus membros são conhecidos, é possível dar um tratamento analítico para sua singularidade, assim, apresenta-se os teoremas a seguir. Estes estão demonstrados quando  $\mathbf{x}$  tende a fronteira  $L_1$  e  $\mathbf{x}$  tende ao canto  $(0, 0)$  ambos sem reflexão, a generalização para outros casos é feita de forma análoga.

**Teorema 1.** *Tem-se que*

$$\lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y}} \int_{L_1} B_1(\mathbf{y}) k_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\ell = \frac{B_1(x_1)}{2}, \quad (4.3)$$

onde  $\mathbf{x}$  é ponto interior de  $D$ ,  $\mathbf{y} \in L_1$  e  $k_2$  é dado pela equação (2.23).

*Demonstração.* Seja  $\mathbf{x} = (x_1, \delta)$ ,  $\mathbf{y} = (t, 0)$  e  $\mathbf{n} = (0, -1)$ , onde  $\delta > 0$  e  $x_1 \in (0, a)$ , resulta que  $(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} = \delta$ ,  $\|(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \times \mathbf{n}\| = -t + x_1$ ,  $|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2 = \sqrt{(x_1 - t)^2 + \delta^2}$ ,  $\sin(\alpha) = \frac{x_1 - t}{\sqrt{(x_1 - t)^2 + \delta^2}}$  e  $\cos(\alpha) = \frac{\delta}{\sqrt{(x_1 - t)^2 + \delta^2}}$ .

$$\int_{L_1} B_1(\mathbf{y}) k_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\ell = \int_{L_1} B_1(\mathbf{y}) \frac{1}{2\pi} \frac{(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^2} \text{Ki}_2(\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2) d\ell \quad (4.4a)$$

$$= \frac{\delta}{2\pi} \int_0^a B_1(t) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t \sqrt{(x_1 - t)^2 + \delta^2})}{\sqrt{(x_1 - t)^2 + \delta^2}} dt \quad (4.4b)$$

$$= I_1 + I_2 \quad (4.4c)$$

onde

$$I_1 := \frac{\delta}{2\pi} \int_0^a B_1(t) \frac{\text{Ki}_2\left(\sigma_t \sqrt{(x_1 - t)^2 + \delta^2}\right) - 1}{\sqrt{(x_1 - t)^2 + \delta^2}} dt, \quad (4.5)$$

$$I_2 := \frac{\delta}{2\pi} \int_0^a B_1(t) \frac{1}{\sqrt{(x_1 - t)^2 + \delta^2}} dt. \quad (4.6)$$

Como  $B_1$  é limitada,  $\text{Ki}_2(0) = 1$  e  $\text{Ki}_2$  é Lipschitz, segue que

$$|I_1| \leq C\delta \int_0^a \frac{|\text{Ki}_2(\sigma_t \sqrt{(x_1 - t)^2 + \delta^2}) - \text{Ki}_2(0)|}{\sqrt{(x_1 - t)^2 + \delta^2}} dt \quad (4.7a)$$

$$\leq C\delta \int_0^a \frac{|\sqrt{(x_1 - t)^2 + \delta^2}|}{\sqrt{(x_1 - t)^2 + \delta^2}} dt \quad (4.7b)$$

$$= C\delta \int_{-x_2}^{x_1-a} \frac{-1}{\sqrt{u^2 + \delta^2}} du \quad (4.7c)$$

$$\leq C\delta \int_{-a}^a \frac{1}{\sqrt{u^2 + \delta^2}} du \quad (4.7d)$$

$$= 2C\delta \sinh^{-1}\left(\frac{a}{\delta}\right) = 2C\delta \ln\left(\frac{a}{\delta} + \sqrt{1 + \frac{a^2}{\delta^2}}\right). \quad (4.7e)$$

Logo, quando  $\delta \rightarrow 0^+$ ,  $I_1 \rightarrow 0$ .

Para  $I_2$ , note que

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{-\delta}{(x_1 - t)^2 + \delta^2}, \quad (4.8)$$

assim

$$I_2 = \frac{1}{2\pi} \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} B_1(x_1 - \delta \tan \alpha) d\alpha \quad (4.9)$$

onde  $\alpha_1 := \tan^{-1}\left(\frac{x_1 - a}{\delta}\right)$  e  $\alpha_2 := \tan^{-1}\left(\frac{x_1}{\delta}\right)$ .

Portanto, quando  $\delta \rightarrow 0^+$ , resulta que

$$I_2 \rightarrow \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} B_1(x_1) d\alpha = \frac{B_1(x_1)}{2}. \quad (4.10)$$

□

Antes de apresentar o caso em que  $\mathbf{x}$  tende ao ponto  $(0, 0)$ , note que, devido à descontinuidade de  $B_1$  e  $B_2$  no ponto, existem duas maneiras de se aproximar deste, através da fronteira  $L_1$  ou através de  $L_2$ . Diante disso, optou-se por tomar a média entre as duas formas e obtêm-se o seguinte teorema.

**Teorema 2.** *Tem-se que*

$$L_b B(0, 0) = \frac{3}{8} B_1(0) + \frac{3}{8} B_2(0). \quad (4.11)$$

*Demonstração.* Os seguintes itens representam as formas de estudar o limite para o ponto  $(0, 0)$ . Os dois primeiros itens, apresentam o método utilizando a fronteira  $L_1$ , os dois últimos itens apresentam utilizando  $L_2$ .

- $\mathbf{x} = (\delta, \epsilon)$ , com  $\delta, \epsilon > 0$  e  $\epsilon$  tende à 0 e, em seguida,  $\delta$  tende à 0. Nesse caso  $\mathbf{y} \in L_1$ ;
- $\mathbf{x} \in L_2$  e  $\mathbf{x}$  tende a fronteira  $L_1$ . Nesse caso  $\mathbf{y} \in L_1$ .
- $\mathbf{x} = (\epsilon, \delta)$ , com  $\delta, \epsilon > 0$  e  $\epsilon$  tende à 0 e, em seguida,  $\delta$  tende à 0. Nesse caso  $\mathbf{y} \in L_2$ ;
- $\mathbf{x} \in L_1$  e  $\mathbf{x}$  tende a fronteira  $L_2$ . Nesse caso  $\mathbf{y} \in L_2$ ;

O primeiro item representa um ponto do domínio que tende a fronteira  $L_1$  e em seguida a fronteira  $L_2$ , já o terceiro item descreve o mesmo movimento, mas com as fronteiras alternadas. Tendo em vista que a demonstração dos dois últimos itens é análoga aos dois primeiros, será apresentado apenas as demonstrações dos primeiros.

Note que para o primeiro item, basta definir  $\mathbf{x} = (\delta, \epsilon)$ , com  $\delta, \epsilon > 0$ , utilizar o Teorema 1 e tomar o limite com  $\delta$  tendendo à 0, ou seja,

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \lim_{\substack{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y} \\ \mathbf{y} \in L_1}} \int_{L_1} B_1(\mathbf{y}) k_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) dl = \frac{B_1(0)}{2}, \quad (4.12)$$

Para o segundo item, seja  $\mathbf{x} = (0, \delta)$ ,  $\mathbf{y} = (t, 0)$  e  $\mathbf{n} = (0, -1)$  onde  $\delta > 0$  e tem-se que  $(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} = \delta$ ,  $\|\mathbf{x} - \mathbf{y}\|_2^2 = \delta^2 + t^2$ ,  $\sin(\alpha) = \frac{t}{\sqrt{\delta^2 + t^2}}$ ,  $\cos(\alpha) = \frac{\delta}{\sqrt{\delta^2 + t^2}}$ .

Então

$$\int_{L_1} B_1(\mathbf{y}) k_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\ell = \frac{\delta}{2\pi} \int_0^a B_1(\mathbf{y}) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t \sqrt{\delta^2 + t^2})}{\delta^2 + t^2} dt = I_1 + I_2 \quad (4.13)$$

onde

$$I_1 = \frac{\delta}{2\pi} \int_0^a B_1(\mathbf{y}) \frac{1}{\delta^2 + t^2} dt \quad (4.14)$$

$$I_2 = \frac{\delta}{2\pi} \int_0^a B_1(\mathbf{y}) \frac{\text{Ki}_2(\sigma_t \sqrt{\delta^2 + t^2}) - 1}{\delta^2 + t^2} dt \quad (4.15)$$

De forma análoga ao teorema anterior,  $I_2 \rightarrow 0$  quando  $\delta \rightarrow 0^+$ . Para  $I_1$ , note que  $\frac{d\alpha}{dt} = \frac{\delta}{\delta^2 + t^2}$ , logo,

$$I_1 = \frac{1}{2\pi} \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} B_1(\delta \tan \alpha) d\alpha \quad (4.16)$$

onde

$$\alpha_1 := \tan^{-1}(0) \quad \text{e} \quad \alpha_2 := \tan^{-1}\left(\frac{b}{\delta}\right). \quad (4.17)$$

Seque que

$$I_1 \rightarrow \frac{1}{2\pi} \int_0^{\pi/2} B_1(0) d\alpha = \frac{1}{4} B_1(0) \quad (4.18)$$

quando  $\delta \rightarrow 0^+$ .

Portanto, somando todas as contribuições e tomando a média, obtêm-se que

$$L_b B(0, 0) = \underbrace{\frac{1}{4} B_1(0) + \frac{1}{8} B_1(0)}_{L_1} + \underbrace{\frac{1}{4} B_2(0) + \frac{1}{8} B_2(0)}_{L_2} = \frac{3}{8} B_1(0) + \frac{3}{8} B_2(0). \quad (4.19)$$

□

Após a remoção das singularidades aplica-se o método de Nyström [38] na equação (4.2), que consiste em aplicar uma quadratura numérica de forma a obter a expressão

$$(L_g S)(\mathbf{x}_{ij}) \approx \sum_{(k,l) \neq (i,j)} \mathbf{w}_{kl} [S(\mathbf{x}_{kl}) - S(\mathbf{x}_{ij})] k_1(\mathbf{x}_{ij}, \mathbf{x}_{kl}) + S(\mathbf{x}_{ij}) K_{ij}, \quad (4.20)$$

onde  $x_{kl}$  e  $w_{kl}$ , com  $1 \leq k \leq N_x$  e  $1 \leq l \leq N_y$ , são os nós e pesos da quadratura, respectivamente, e

$$K_{ij} = \int_D k_1(\mathbf{x}_{ij}, \mathbf{y}) d\mathbf{y}. \quad (4.21)$$

A função  $(L_b B)$ , também pode ser descrita na malha, de forma que

$$(L_b B)(\mathbf{x}_{ij}) = \int_{\partial D} B(\mathbf{y}) k_2(\mathbf{x}_{ij}, \mathbf{y}) d\ell. \quad (4.22)$$

A partir da equação (2.25), uma aproximação para o fluxo escalar em uma malha é obtida através da solução do sistema linear

$$(1 - L_g^{\sigma_s}) \Phi(\mathbf{x}_{ij}) = (L_g Q)(\mathbf{x}_{ij}) + (L_b B)(\mathbf{x}_{ij}). \quad (4.23)$$

Devido a discretização de  $(L_g S)(\mathbf{x}_{ij})$  produzir grandes matrizes, da ordem de  $N_x^2 N_y^2$ , onde  $N_x$  é o tamanho da malha no eixo  $x$  e  $N_y$  no eixo  $y$ , foi utilizado processo iterativo obtido a partir da série de Neumann para resolver o sistema linear (4.23). Logo,

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{x}_{ij}) &= \sum_{n=0}^{\infty} \sigma_s^n L_g^n (L_g Q + L_b B) \\ &\approx \sum_{n=0}^M \sigma_s^n L_{ij}^n + \frac{\sigma_s^{M+1} \sigma_c}{1 - \sigma_s \sigma_c} L_{ij}^M, \end{aligned} \quad (4.24)$$

onde

$$L_{ij}^0 = \int_D (Q(\mathbf{y}) - Q(\mathbf{x}_{ij})) k_1(\mathbf{x}_{ij}, \mathbf{y}) d\mathbf{y} + Q(\mathbf{x}_{ij}) K_{ij} + \int_{\partial D} B(\mathbf{y}) k_2(\mathbf{x}_{ij}, \mathbf{y}) d\ell \quad (4.25a)$$

$$L_{ij}^{n+1} = \sum_{(k,l) \neq (i,j)} \mathbf{w}_{kl} [L_{kl}^n - L_{ij}^n] k_1(\mathbf{x}_{ij}, \mathbf{x}_{kl}) + L_{ij}^n K_{ij}, \quad n \geq 0 \quad (4.25b)$$

e  $\sigma_c$  é aproximado pelo quociente de Rayleigh [46]

$$\sigma_c \approx \frac{\langle L_{ij}^{M-1}, L_{ij}^M \rangle}{\langle L_{ij}^{M-1}, L_{ij}^{M-1} \rangle}, \quad (4.26)$$

onde  $\langle \mathbf{u}, \mathbf{v} \rangle$  é o produto interno de funções em  $L^2$ .

O processo iterativo descrito acima apresenta a aproximação para o fluxo escalar em uma malha de pontos  $\mathbf{x}_{ij}$ . Para pontos fora da malha pode-se aproximar seu fluxo, através de uma interpolação obtida a partir da própria equação que descreve o fluxo, equação (4.23).

Aplicando uma quadratura numérica, bem como feito em (4.20), em  $L_g^{\sigma_s} \Phi$  da equação (4.23), resulta que

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{x}) - \sum_{(k,l) \neq \mathbf{x}} \mathbf{w}_{kl} \sigma_s [\Phi(\mathbf{x}_{kl}) - \Phi(\mathbf{x})] k_1(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{kl}) - \sigma_s \Phi(\mathbf{x}) \int_D k_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{y} \\ = (L_g Q)(\mathbf{x}) + (L_b B)(\mathbf{x}) \end{aligned} \quad (4.27)$$

Isolando  $\Phi(\mathbf{x})$  do lado esquerdo da equação, resulta que

$$\begin{aligned} \Phi(\mathbf{x}) = \frac{\sum_{\mathbf{x}_{kl} \neq \mathbf{x}} \mathbf{w}_{kl} \sigma_s k_1(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{kl}) \Phi_{kl} + \int_D k_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) Q(\mathbf{y}) d\mathbf{y} + \int_{\partial D} k_2(\mathbf{x}, \mathbf{y}) B(\mathbf{y}) d\ell}{1 + \sum_{\mathbf{x}_{k,l} \neq \mathbf{x}} \mathbf{w}_{kl} \sigma_s k_1(\mathbf{x}, \mathbf{x}_{kl}) - \sigma_s \int_D k_1(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\mathbf{y}} \end{aligned} \quad (4.28)$$

Note que, embora os termos  $k_1$  e  $(L_b B)$  apresentem somatórios com índices infinitos é necessário computar um número finito destes, pois tais termos representam as contribuições do domínio e da fronteiras refletidos e após um longo percurso suas contribuições tornam-se insignificantes. Portanto, é necessário computar um número finito de termos, sendo que a quantidade de termos é inerente a cada problema. A definição de ambos os termos para um número finito de reflexões pode ser encontrada em [41].

Para a corrente, a partir da equação (2.63c) pode-se remover as singularidades dos núcleos  $k_{j1}$  e  $k_{j2}$  e discretizar  $J_n$  em uma malha, semelhante ao

tratamento dado ao fluxo escalar. O mesmo processo de remoção das singularidades de  $L_b B$  foi aplicado para  $J_b B$ , os teoremas estão detalhados no Apêndice A.

## 4.2 Implementação computacional

O algoritmo implementado consiste essencialmente em computar as somas descritas em (4.24) utilizando as definições em (4.25). Este é formado por mais de 25 parâmetros de entrada, sendo que aproximadamente 10 destes são externos ao problema e servem para dar maior precisão à rotina (tolerância da Bickley-Naylor, tamanhos de malhas e outros). Tal código foi implementado na linguagem C++ e, com vistas a melhorar sua eficiência, utilizou-se de ferramentas adicionais como GNU Scientific Library [27], Cubature [1] e Open Multi-Processing [14].

GNU Scientific Library é uma biblioteca numérica com uma ampla gama de funções em diversas áreas como álgebra linear, cálculo numérico e estatística. Tal biblioteca foi utilizada nas rotinas de integração, as quais utilizam Gauss-Kronrod 21 pontos tanto para o cálculo da contribuição da fronteira em (4.25a) quanto para as funções de Bickley-Naylor, as quais estão presentes tanto nos núcleos do fluxo escalar quanto nos núcleos da corrente de partículas, equações (2.48), (2.51)-(2.54) e (2.70)-(2.74).

Cubature é uma rotina de quadraturas multidimensionais adaptativas desenvolvidas pelo grupo de pesquisa físicas Ab-Initio no Massachusetts Institute of Technology. Ela é formada por diversas rotinas de integração multidimensional e foi programada de forma que o integrando possa ser avaliado para diversos pontos de uma só vez, permitindo assim, rápida e eficiente paralelização. Tal rotina foi usada para o cálculo de  $K_{ij}$ , equação (4.21) e dos termos  $(L_g Q)$ ,  $(J_g \Phi)$  e  $(J_g Q)$ .

Open Multi-Processing (OpenMP) é uma interface de programação de aplicativo (API) para a programação multi-processo de memória compartilhada, ou



seja, com ela é possível distribuir as tarefas entre os múltiplos *threads* de um ou mais processadores desde que estes compartilhem a mesma memória RAM. A interface foi utilizada ao longo de todo código, não sendo utilizada apenas nas tarefas onde são necessárias atividades de forma seriada, como leitura e escrita em disco.

Cabe ressaltar que algumas partes do código já haviam sido paralelizadas pelos autores utilizando a classe *thread*. Tal classe permite realizar paralelizações do código, mas apresenta muitas limitações quando comparada com OpenMP, visto que esta última é uma API destinada somente à paralelização. Foram realizados testes de forma a comparar ambas as ferramentas e observou-se que, em critério de redução do tempo de processamento, OpenMP demonstrou-se mais eficiente. Além da substituição pela API, outras partes que rodavam de forma seriada foram paralelizadas e pode-se afirmar que o código funciona em paralelo em quase toda sua totalidade.

O código é subdividido em três partes, pré-processamento, processamento e pós-processamento. O pseudocódigo é descrito a seguir.

1) Pré-processamento:

- (a) Tabela as funções de Bickley-Naylor;
- (b) Tabela o núcleo  $k_1$  sem remover sua singularidade;
- (c) Tabela o núcleo  $k_1$  removendo sua singularidade;
- (d) Tabela o núcleo  $k_{j1}$  em duas matrizes, uma para cada componente do vetor corrente.

2) Processamento:

- (a) Tabela  $\int_D k_1(\mathbf{x}_{ij}, \mathbf{y}) d\mathbf{y}$ ,  $\int_D Q(\mathbf{y}) k_1(\mathbf{x}_{ij}, \mathbf{y}) d\mathbf{y}$  e  $\int_{\partial D} B(\mathbf{y}) k_2(\mathbf{x}_{ij}, \mathbf{y}) d\ell$  utilizando as tabelas do item 1a) e 1c), acrescentando os termos removidos em 1c);

(b) Aplica o processo iterativo usando as tabelas dos item 1b) e 2a).

3) Pós-processamento:

(a) Interpola  $\Phi$  para determinados valores através da equação (4.28);

(b) Calcula  $J_n$ , equação (2.63), utilizando os itens 1d) e 3a).

De modo a tornar a rotina mais eficiente, todos os itens do pré-processamento e processamento criam arquivos em disco. Assim, sempre que a rotina for utilizada ela é capaz de identificar os arquivos existentes, lê-los e manipulá-los, sem a necessidade de calculá-los novamente.

## 5 RESULTADOS

Este capítulo apresenta os resultados obtidos com relação ao tempo computacional entre a rotina criada e utilizada por Sauter *et al.* [41] e os obtidos após a paralelização utilizando OpenMP e alterações no código. Cabe ressaltar que os resultados obtidos para o fluxo escalar não sofreram alterações após as mudanças no código, para uma discussão mais detalhada sobre este deve-se consultar o referido artigo.

A primeira seção descreve os tempos e dificuldades computacionais enfrentadas em cada uma das partes do pseudocódigo, excluindo-se o item 1d) e 3b) que calculam dados relacionados à corrente de partículas. Tal exclusão deve-se pelo fato de que estes não estavam implementados no algoritmo do artigo supracitado, portanto não poderiam ser otimizados.

Na segunda seção são apresentados os resultados produzidos pela rotina referente à corrente de partículas para diversas condições.

Todos os tempos aqui apresentados, referem-se ao tempo de parede e foram obtidos tomando a média dos tempos de, pelo menos, três repetições. O computador utilizado possui processador Intel Core i7 - 4820K 3.7 GHz (4 núcleos físicos e 8 threads) e 64GB de memória RAM e para medição foi utilizada a função *omp\_get\_wtime*.

Os problemas resolvidos aqui são listados abaixo, dentre eles, os cinco primeiros são para validação dos resultados, pois já foram descritos na literatura [41] e os dois últimos são resultados novos. Para todos os problemas  $\sigma_t = 1$ .

**Problema 1:**  $a = b = 1$  cm,  $\sigma_s = 1$  cm<sup>-1</sup>,  $\rho_1 = \rho_3 = 1$ ,  $\rho_2 = 0.4$ ,  $\rho_4 = 0.8$ ,  $B_1 = B_2 = B_3 = B_4 = 0$  e  $Q(x_1, x_2) = \exp(-x_1)$ .

**Problema 2:**  $a = b = 1$  cm,  $\sigma_s = 1$  cm<sup>-1</sup>,  $\rho_2 = \rho_4 = 1$ ,  $\rho_1 = 0.4$ ,  $\rho_3 = 0.8$ ,  $B_2 = B_4 = 0$ ,  $B_1 = 0.5$ ,  $B_3 = 1$  e  $Q(x_1, x_2) = \exp(-x_2)$ .

**Problema 3:**  $a = b = 4$  cm,  $\sigma_s = 0.9$  cm<sup>-1</sup>,  $\rho_1 = \rho_3 = 1$ ,  $\rho_2 = \rho_4 = 0.5$ ,  $B_1 = B_3 = 0$ ,  $B_2 = B_4 = 0.5$  e  $Q(x_1, x_2) = 1$  se  $x_1 \leq 1$  e 0 caso contrário.

**Problema 4:**  $a = b = 20$  cm,  $\sigma_s = 0.8$  cm<sup>-1</sup>,  $\rho_1 = \rho_2 = \rho_3 = 1$ ,  $\rho_4 = 0$ ,  $B_1 = B_2 = B_3 = B_4 = 0$  e  $Q(x_1, x_2) = 1$  se  $x_1 \leq 1$  e 0 caso contrário.

**Problema 5:**  $a = 2$  cm,  $b = 4$  cm,  $\sigma_s = 0.5$  cm<sup>-1</sup>,  $\rho_1 = 0.2$ ,  $\rho_2 = 0.4$ ,  $\rho_3 = 0.6$ ,  $\rho_4 = 0.8$ ,  $B_1 = 0.9$ ,  $B_2 = 0.7$ ,  $B_3 = 0.5$ ,  $B_4 = 0.3$ , e  $Q(x_1, x_2) = 1$  se  $x_1 \geq 1.5$  e  $x_2 \leq 3.5$  e 0 caso contrário.

**Problema 6:**  $a = b = 1$  cm,  $\sigma_s = 1$  cm<sup>-1</sup>,  $\rho_1 = \rho_3 = 1$ ,  $\rho_2 = 0.4$ ,  $\rho_4 = 0.8$ ,  $B_1 = B_4 = 1$ ,  $B_2 = 0.5$ ,  $B_3 = 0$  e  $Q(x_1, x_2) = 1$  se  $0.4 \leq x_1, x_2 \leq 0.6$  e 0 caso contrário.

**Problema 7:**  $a = b = 4$  cm,  $\sigma_s = 0.5$  cm<sup>-1</sup>,  $\rho_1 = \rho_4 = 0.8$ ,  $\rho_2 = \rho_3 = 0.5$ ,  $B_1 = B_2 = B_3 = B_4 = 0.5$ , e  $Q(x_1, x_2) = 1$  se  $x_1 \leq 0.5$  e  $x_2 \leq 3.5$  e se  $x_1 \geq 3.5$  e  $x_2 \leq 3.5$  0 caso contrário.

## 5.1 Tempo computacional

Dentre todos os parâmetros de entrada que visam dar maior precisão à rotina, dois destes influenciam diretamente o tempo computacional total, são eles: o número de termos da série de Neumann e a quantidade de reflexões calculadas. O primeiro, representa a quantidade de termos necessários para que a série convirja para o número de casas desejadas, sendo que a convergência é mais rápida quando  $\sigma_s/\sigma_c$  é mais próximo de 1. O segundo é necessário devido a impossibilidade de calcular infinitos termos tanto no núcleo  $k_1$  quanto na função  $(L_b B)$  e, também, tendo em vista que o termo de absorção reduz o alcance da partícula, o que é

fisicamente consistente, pois as partículas se extinguem depois de percorrer algum livre caminho e, matematicamente, advém do fato das funções de Bickley-Naylor ficarem insignificantes quando o argumento é grande.

A quantidade de termos da série de Neumann depende da velocidade de convergência do problema e a quantidade reflexões depende do tamanho do domínio. Isto se deve ao fato que todos os núcleos são dependentes das funções de Bickley-Naylor, e estas atingem o epsilon de máquina para valores maiores que quarenta. Portanto, calcular reflexões que estão distantes do domínio principal acabam por não influenciar no resultado final. Para cada problema a quantidade de termos e reflexões são os seguintes:

**Problema 1:** 25 termos Neumann e 25 reflexões.

**Problema 2:** 25 termos Neumann e 25 reflexões.

**Problema 3:** 80 termos Neumann e 10 reflexões.

**Problema 4:** 150 termos Neumann e 3 reflexões.

**Problema 5:** 40 termos Neumann e 10 reflexões.

**Problema 6:** 25 termos Neumann e 25 reflexões.

**Problema 7:** 40 termos Neumann e 10 reflexões.

Seguindo os itens descritos no pseudocódigo apresentado na seção 4.2, o item 1a) tabela as funções de Bickley-Naylor dos graus de um a três para aproximadamente 400 mil valores, sendo 200 mil para  $K_{i1}$  e 100 mil para  $K_{i2}$  e  $K_{i3}$ . O cálculo de tais funções foi feito seguindo os métodos descritos no capítulo 3 que apresentaram maior precisão possível. Além disso, com vista a obter maior precisão computacional, foi utilizada tolerância de  $10^{-13}$  para integração de tais funções, o que aumenta o tempo de cálculo da sub-rotina de integração.

A média dos tempos foi inferior a 2 segundos para o cálculo de todos os valores, sendo que antes das alterações este tempo era inferior a 1 segundo. O aumento do tempo foi devido a implementação da construção de  $K_{i_3}$ , que não estava implementada.

Como é possível observar na construção dos termos da série (ver equação (4.25b)), o núcleo  $k_1$  é utilizado de duas formas distintas, primeiramente é calculado sobre diversos pontos - excluindo valores para o qual tal termo possui singularidade - fato que pode ser observado no primeiro termo da referida equação. E, em segundo quando este é integrado sobre todo o domínio, até mesmo sobre sua singularidade, observado no segundo termo da equação.

Devido a esta distinção foram construídas duas tabelas para  $k_1$ , uma que não contempla os pontos em que  $\mathbf{x} = \mathbf{y}$  e outra em que é utilizada a técnica de remoção de singularidades, respectivamente, itens 1b) e 1c) do pseudocódigo.

Os tempos computacionais obtidos antes e após as alterações do item 1b) para diferentes tamanhos do Problema 1 são apresentados na Tabela 5.1.

Tabela 5.1: Média dos tempos de construção do núcleo  $k_1$  sem remoção da singularidade para diferentes tamanhos de malha no Problema 1.

$N_x$	$N_y$	Antes alterações (s)	Após alterações (s)	Redução do tempo (%)
33	33	0.48064	0.4352080	9.4
65	65	1.8305	1.7032133	6.9
129	129	6.9816	6.76911	3.0
257	257	27.7805	26.82805	3.4
513	513	110.3985	107.7685	2.4
1025	1025	440.2050	422.7860	4.9

Embora esta parte do código já tenha sido paralelizada pelos autores [41], a partir da adequação desta, foi possível utilizar OpenMP e obter um ganho entre 2% e 10% a depender do tamanho da malha utilizada. O ganho mais significativo foi na menor malha 33 x 33 e o menor ganho foi em 513 x 513.

Ainda que a tabela apresente apenas os dados de um único problema, o restante destes apresentaram redução de tempo na faixa de 1 a 10%, mesmo com tempo maior ou inferior. Por exemplo, no Problema 3 com  $N_x = N_y = 1025$  houve redução de 63 para 62 segundos (1.5%), valores bem inferiores aos do problema acima. A justificativa para tal é o fato é a quantidade de reflexões necessárias, pois estas aumentam significativamente o número de pontos calculados a cada reflexão.

A tabulação do núcleo  $k_1$  com a remoção da singularidade, item 1c) do pseudocódigo, utilizou uma malha mais fina que a apresentada na Tabela 5.1. Essa diferença entre os tamanhos é importante, pois durante a integração numérica de  $k_1$  - item 2a) - são feitas interpolações sobre seus pontos e a integração torna a demorar mais ou não atinge a tolerância desejada se esta não for suficientemente refinada.

Para a avaliação do tamanho da malha de  $k_1$  com a remoção a ser escolhida, deve-se ser levado em conta a precisão desejada na integração deste e o tamanho do domínio, assim, neste trabalho a malha considerada suficiente para obter ótimos resultados foi mil vezes o tamanho do domínio.

A Tabela 5.2 apresenta a média dos tempos para cada tamanho de malha, seu respectivo problema, a porcentagem entre o tempo antes e após as alterações e o consumo de memória RAM.

Tabela 5.2: Média dos tempos de construção da malha de  $k_1$  com remoção da singularidade para diferentes tamanhos de malhas e consumo de memória RAM.

Problema	Tamanho da malha	Antes (s)	Após(s)	Redução (%)	Consumo
1 e 2	1 mil x 1 mil	219.43	45.34595	79.3	97 MB
5	2 mil x 4 mil	332.483	60.31245	81.8	700 MB
3	4 mil x 4 mil	507.493	104.149	79.5	800 MB
4	20 mil x 20 mil	245.943	70.93072	71.2	12,8 GB

Tal item foi o que apresentou melhor resultado uma vez que utilizando a paralelização foi possível diminuir aproximadamente 80% do tempo que era gasto sem paralelização. Apesar do tempo de processamento ser pequeno, tais malhas exigiram uma grande quantidade de memória RAM, que aumentam conforme o tamanho e quantidade de reflexões, caso fosse utilizada a malha 40 mil por 40 mil, são utilizados 51,2 GB de memória.

Após a construção das tabelas do pré-processamento inicia-se o tabelamento da integral de  $k_1$  e da fonte sobre o domínio  $D$  e o cálculo da contribuição da fronteira, item 2a) do pseudocódigo. A integração sobre  $D$  foi feita utilizando a rotina Cubature com tolerância de  $10^{-10}$ , como esta permite que ambas funções sejam integradas ao mesmo tempo existe uma vantagem computacional significativa ao utilizá-la.

Cabe destacar que apenas as duas primeiras integrais estavam paralelizadas, assim, buscou-se fazer a substituição por OpenMP e paralelizar o terceiro termo. Entretanto, o este utiliza diversos *loops* sobre *struct*, os quais demonstraram-se ser um empecilho e exigiriam uma grande reformulação do código para que fosse possível sua paralelização. Logo, de modo a contornar tal problema, foram utilizadas ferramentas próprias da API que possibilitam que apenas um *thread* seja destinado para o cálculo de  $L_bB$ , enquanto o restante dedica-se as integrais sobre o domínio. E, assim que finalizada a fronteira o *thread* se junta ao restante e auxilia estes, o que possibilita que todos componentes trabalhem ininterruptamente e não fiquem ociosos.

A Tabela 5.3 apresenta a média dos tempos de cálculo do item 2a) para os diferentes problemas antes e após as alterações. Dentre todos os problemas, o que se obteve melhores resultados foi o Problema 1, o qual sofreu, em média, redução de 28% e o com o pior desempenho foi o Problema 4, para este as alterações não surtiram efeito. Excluindo-se este último, o restante obteve redução de 15 a 36%.



Tabela 5.3: Média dos tempos de cálculo do item 2a) do pseudocódigo antes e após as alterações.

	Problema 1		Problema 2		Problema 3		Problema 4		Problema 5	
$N_x$	Antes	Após	Antes	Após	Antes	Após	Antes	Após	Antes	Após
33	17 s	13 s	17 s	14 s						
65	67 s	54 s	69 s	57 s	21 s	15 s	93 s	92 s	34 s	25 s
129	277 s	215 s	285 s	231 s	83 s	56 s	362 s	366 s	143 s	100 s
257	22 min	15 min	19 min	16 min	5 min	3 min	24 min	24 min	9 min	7 min
513	94 min	59 min	80 min	65 min	21 min	15 min	105 min	97 min	36 min	26 min
1025	7.7 h	5 h	5.8 h	4.5 h	82 min	57 min	7.5 h	7.5 h		

Embora o número termos da série de Neumann - item 2b) - dependa do problema, observou-se que o tempo para computar cada um destes é inerente a este, dependendo apenas do tamanho da malha do fluxo. Tal sub-rotina já havia sido paralelizada pelos autores e veio a ser otimizada, a Tabela 5.4 apresenta a média dos tempos para cada um dos tamanhos de malha antes e após as modificações.

Tabela 5.4: Média dos tempos de cálculo dos termos da série de Neumann para diferentes tamanhos de malhas.

$N_x$	$N_y$	Antes alterações (s)	Após alterações (s)	Redução do tempo (%)
33	33	0.00300	0.00290	3.3
65	65	0.03696	0.03949	-6.8
129	129	0.56005	0.60808	-8.6
257	257	9.27843	9.61803	-3.6
513	513	171.316	158.824	7.3
1025	1025	3940.35	2560.49	35.0

As Tabelas 5.5 e 5.6 apresentam os tempos totais e a porcentagem de ganho após as alterações para os problemas 1 e 2, respectivamente.

Tabela 5.5: Tempo médio para o cálculo do Problema 1 para diferentes malhas antes e após alterações.

$N_x$	$N_y$	Antes alterações	Após alterações	Redução do tempo (%)
33	33	237 s	61 s	74.2
65	65	289 s	104 s	64.0
129	129	8.6 min	4.7 min	44.9
257	257	30.1 min	19.8 min	34.0
513	513	170.5 min	128.5 min	24.6
1025	1025	35.3 h	22.7 h	35.6

Tabela 5.6: Tempo médio para o cálculo do Problema 2 para diferentes malhas antes e após alterações.

$N_x$	$N_y$	Antes alterações	Após alterações	Redução do tempo (%)
33	33	253 s	62 s	75.9
65	65	307 s	110 s	64.0
129	129	9 min	5 min	44.3
257	257	27.7 min	21.1 min	24.0
513	513	161.9 min	133.5 min	17.5
1025	1025	33.0 h	22 h	33.6

Pôde-se observar em ambas as tabelas que a porcentagem de ganho após as alterações são decrescentes até a malha 513 e cresce após esta. Esse crescimento ocorre, pois o tempo de processamento dos itens precedentes à série de Neumann tornam-se ínfimos quando comparados com o tempo total. A Tabela 5.7 apresenta a porcentagem que é gasta em cada problema e malha para calcular a série com

relação ao tempo total. Assim, como a otimização do cálculo dos termos da série - Tabela 5.4 - apresenta uma grande melhora entre as malhas 513 e 1025 e os termos tendem a tomar mais tempo de processamento total, é esperado maior redução de tempo para malhas maiores.

Tabela 5.7: Porcentagem do tempo total que é gasto calculando os termos da série de Neumann para cada problema após alterações.

$N_x$	Problema 1	Problema 2	Problema 3	Problema 4	Problema 5
33	0.1	0.1			
65	1.0	0.9	2.6	3.3	6.5
129	5.2	5.0	23.1	16.8	37.2
257	20.0	18.8	70.3	49.0	76.7
513	52.0	49.4	92.7	80.3	93.9
1025	77.0	79.3	98.1	93.2	

As Tabelas 5.8 e 5.9 apresentam os tempos totais e a porcentagem de ganho após as alterações para os problemas 3 e 4, respectivamente. Tais problemas são os que possuem os maiores domínios e, devido à necessidade de integração de  $k_1$ , é necessária a utilização de malhas mais finas que as utilizadas para os dois primeiros problemas, logo, foram utilizadas malhas 4 mil x 4 mil e 20 mil x 20 mil.

Tabela 5.8: Tempo médio para o cálculo do Problema 3 para diferentes malhas antes e após alterações.

$N_x$	$N_y$	Antes alterações	Após alterações	Redução do tempo (%)
65	65	531 s	125 s	76.4
129	129	632 s	212 s	66.4
257	257	26.1 min	18.5 min	29.1
513	513	4.3 h	3.8 h	11.6
1025	1025	89.7 h	59.8 h	33.7

Tabela 5.9: Tempo médio para o cálculo do Problema 4 para diferentes malhas antes e após alterações.

$N_x$	$N_y$	Antes alterações	Após alterações	Redução do tempo (%)
65	65	357 s	177 s	50.3
129	129	11.5 min	9 min	22.4
257	257	51.4 min	50 min	2.7
513	513	9.2 h	8.4 h	9.5
1025	1025	175 h	112.5 h	35.7

Ambos problemas são os que possuem maior custo computacional e isso se deve, principalmente, ao elevado número de termos que necessitam ser calculados para que a série convirja, 80 e 150, respectivamente. Note que a redução de tempo para a malha 1025 em ambos problemas é maior que 35%, a mesma porcentagem que foi ganha ao otimizar cada um dos termos da série, Tabela 5.4.

Diferentemente dos problemas anteriores, o problema 5 não apresenta simetria de placa, ou seja, não existe simetria em nenhuma faixa do domínio. A Tabela 5.10 apresenta o tempo computacional para tal problema utilizando 40 termos da série.

Tabela 5.10: Tempo médio para o cálculo do Problema 5 para diferentes malhas antes e após alterações.

$N_x$	$N_y$	Antes alterações	Após alterações	Redução do tempo (%)
65	129	373.8 s	93 s	75.0
129	257	9.25 min	4.4 min	52.6
257	513	41.0 min	34.2 min	16.6
513	1025	9.8 h	7.6 h	22.0

Observou-se que o tempo total deste último problema é superior aos dois primeiros, mas ainda inferior aos problemas 3 e 4, isto deve-se, não somente ao fato da diferença entre tamanho de domínio, mas também às características do problema e da fonte interna. Diferentemente do problema 5, nos quatro primeiros as contribuições das fronteiras são ou todas ou metade delas iguais a zero, o que faz com que o cálculo de  $L_b B$  seja ínfimo quando comparado com o tempo total. Dessa forma, problemas sem simetria de placa e que envolvam grandes domínios podem consumir elevado tempo de processamento e consumo de memória.

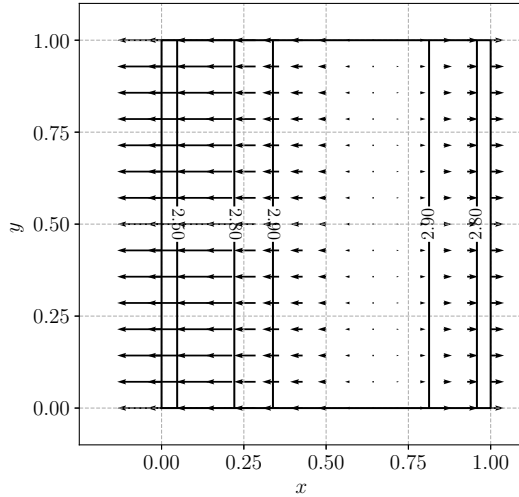
Ao final da rotina, esta apresenta o fluxo escalar para uma lista de pontos pré-determinados sendo que tal valor é calculado utilizando a interpolação dada pela equação (4.28). A fim de evitar ter de recalculiar todos os núcleos e malhas já construídos, a rotina está programada para ler os arquivos previamente criados e assim, reconstruir a malha do fluxo na memória, o que permite realizar novas interpolações sem desperdício de tempo. Tal parte do código também sofreu alterações e foi possível obter uma redução de mais de 60% de tempo.

## 5.2 Corrente de partículas

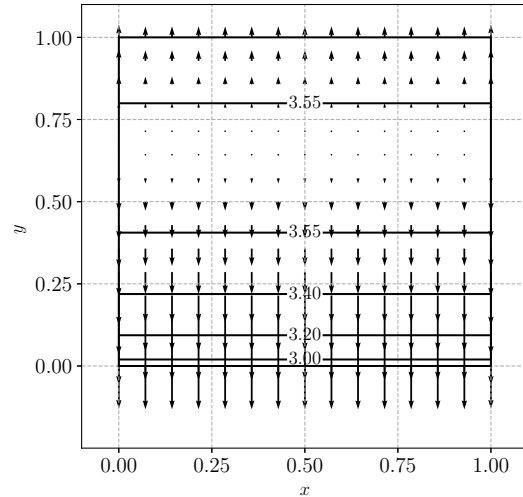
Os valores para a corrente foram feitos calculados com base na equação (2.68) com os núcleos dados pelas equações (2.70) e (2.71). Como não é necessário efetuar a computação de métodos iterativos, pois estes são utilizados apenas no cálculo do fluxo escalar, a corrente depende apenas da computação de tais núcleos.

Sendo assim - considerando que o fluxo escalar já esteja calculado para uma malha de pontos do domínio - o tempo total gasto na computação da corrente de partículas é, aproximadamente, o dobro do tempo descrito na Tabela 5.2. Isso se deve ao fato que é necessário tabular o núcleo  $k_{j1}$  para cada componente do vetor corrente. Após a tabulação deste, o cálculo das funções  $(J_g \sigma_s \Phi)$ ,  $(J_g Q)$  e  $(J_b B)$  para cada ponto da malha leva menos de um segundo.

As Figuras 5.1a e 5.1b ilustram a corrente de partículas dos problemas 1 e 2, os quais foram descritos no subcapítulo anterior. Cabe ressaltar que, em cada figura os vetores corrente estão normalizados de forma a preservar a razão entre eles.



(a) Problema 1.



(b) Problema 2.

Figura 5.1: Gráfico da corrente de partículas para os problemas 1 e 2.

Além do problema 2 ser uma rotação no sentido anti-horário do problema 1, observou-se que acrescentando as contribuições nas fronteiras  $L_1$  e  $L_3$  houve um aumento do fluxo escalar e também a preservação da simetria do problema, ou seja, o slab foi conservado tanto para o fluxo como para a corrente de partículas.

As Figuras 5.2a e 5.2b ilustram os vetores correntes produzidos pelos problemas 3 e 4, respectivamente.

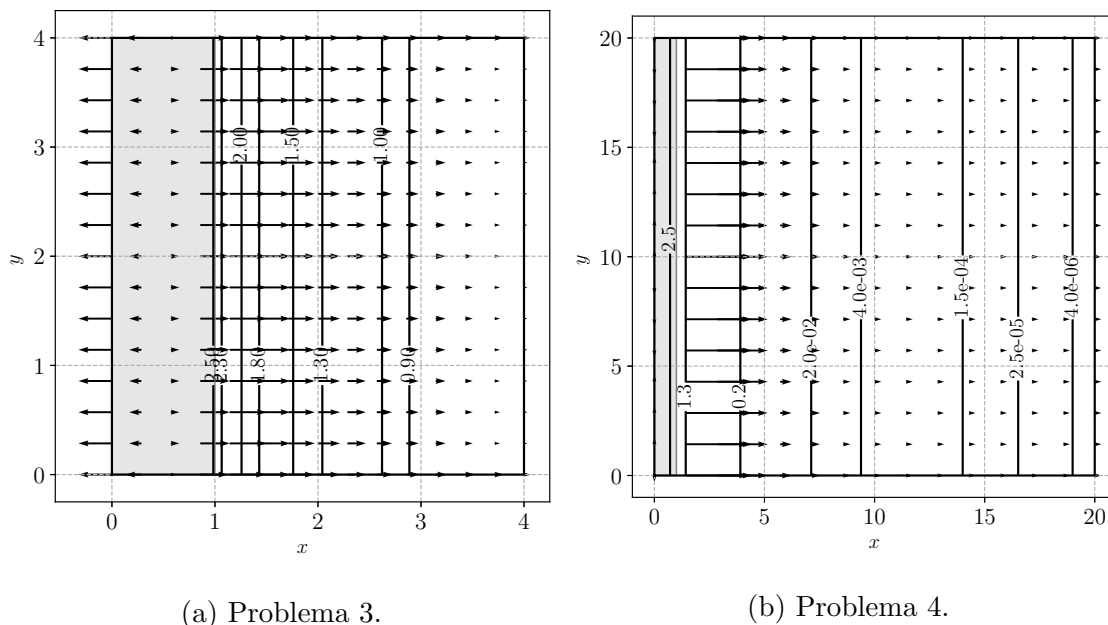


Figura 5.2: Gráfico da corrente de partículas para os problemas 3 e 4, onde a área em cinza representa a fonte  $Q(\mathbf{x})$ .

Ambos problemas já foram resolvidos numericamente para o fluxo escalar porém sem o cálculo da corrente de partículas (ver [41]). Os resultados numéricos obtidos são idênticos aos relatados e, além disso, o gráfico da corrente está consistente com tais.

A Figura 5.3 ilustra os vetores correntes produzidos pelo problema 5. É possível observar que os vetores mostram as partículas escoando da região mais densa do domínio, onde o fluxo escalar é maior que 1.05, para a região de menor intensidade, com fluxo 0.27. Além disso, observou-se que os vetores nas partes laterais que fazem fronteira com a fonte apontam para fora do domínio. Isso se deve ao fato de que a intensidade de partículas passando por esta região é maior do que a fronteira consegue refletir, sendo assim, algumas partículas tendem a escapar do domínio pela região. Já os segmentos que não fazem fronteira com a fonte apresentam vetores apontando para dentro do domínio, pois a fronteira consegue refletir tais partículas.

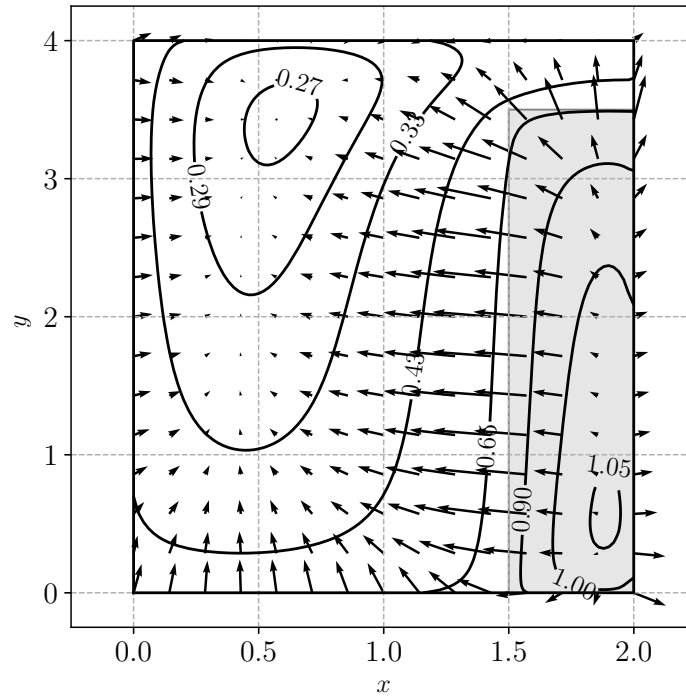


Figura 5.3: Corrente de partículas do problema 5, onde a área em cinza representa a fonte  $Q(\mathbf{x})$ .

A Figura 5.4 ilustra os vetores corrente do problema 6, que é caso onde a fonte está localizada no centro do domínio. Nesse caso, a fronteira  $L_4$  possui coeficiente de reflexão  $\rho_4 = 0.8$  e contribuição de  $B_4 = 1$ , o que faz com que as partículas sejam refletidas e se direcionem para a fronteira  $L_2$  visto que as fronteiras  $L_1$  e  $L_3$  têm coeficiente de reflexão igual a 1.



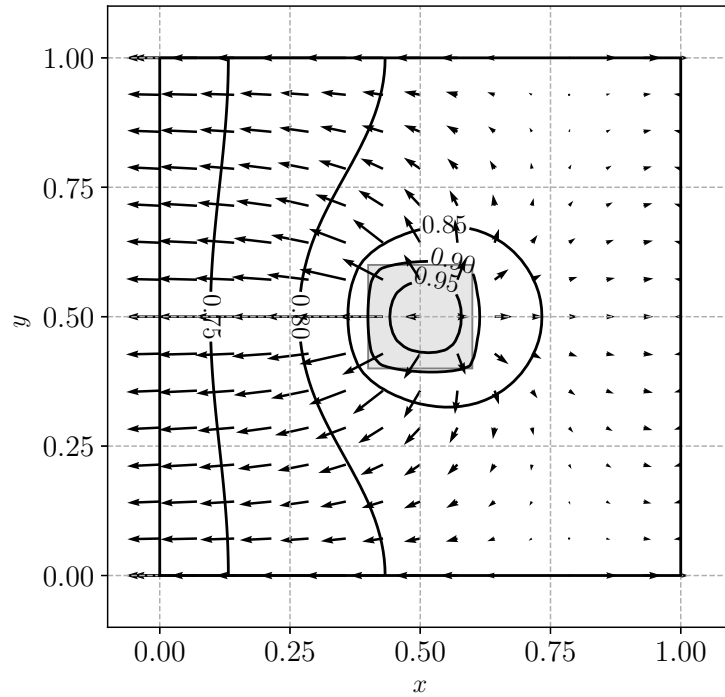


Figura 5.4: Corrente de partículas do problema 6, onde a área em cinza representa a fonte  $Q(\mathbf{x})$ .

A Figura 5.5 ilustra os vetores correntes do problema 7, este possui duas fontes internas e não possui simetria. A maior concentração de partículas está localizada na fonte a direita. O motivo é que reflexão da fronteira  $L_4$  ser maior que a fronteira  $L_2$ , o que faz com que ocorra uma maior concentração de partículas na região. O mesmo fenômeno que ocorre na fronteira no problema 5 se repete, os segmentos que estão em contato com a fonte não conseguem repelir as partículas e elas escapam através da fronteira. Já os segmentos que não estão em contato conseguem refletir as partículas para dentro do domínio.

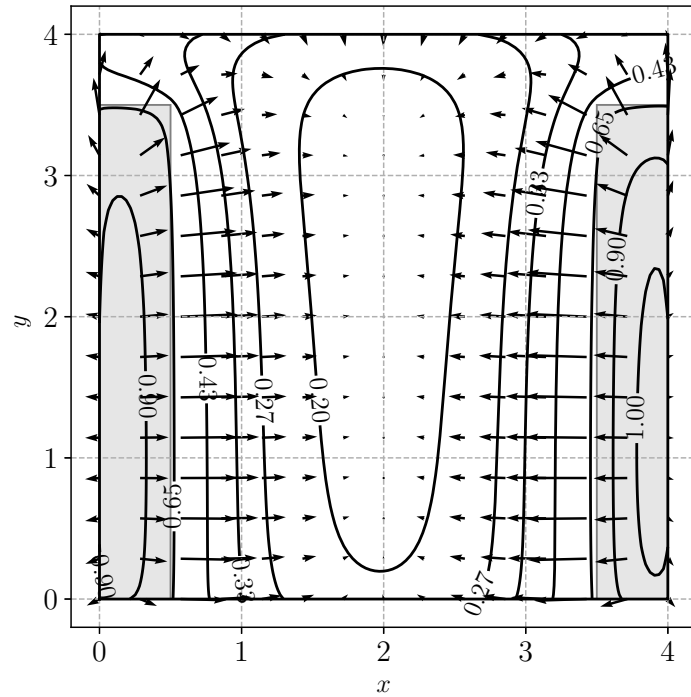


Figura 5.5: Corrente de partículas do problema 7, onde as áreas em cinza representam a fonte  $Q(\mathbf{x})$ .

Ao longo deste capítulo, foram apresentados resultados que comprovam a melhora na eficiência computacional do algoritmo após a otimização e paralelização do código com OpenMP. Além dos resultados numéricos serem iguais aos apresentados na literatura, foi implementada rotina para o estudo da corrente de partículas, a qual não foi apresentada no artigo. Também foram calculados resultados novos para dois problemas de transporte.

## 6 CONSIDERAÇÕES FINAIS

### 6.1 Contribuições deste trabalho

Neste trabalho, foi apresentado um estudo detalhado tanto na parte analítica quanto computacional do artigo [41] de Esequia *et al.* Quanto a formalização matemática, os métodos e ferramentas utilizadas pelos autores foram descritos e, além disso, houve avanço na teoria proporcionando uma nova abordagem para o cálculo da corrente de partículas em geometria X-Y com condições de fronteira constantes e espalhamento isotrópico. Além da teoria envolvida com o cálculo da corrente, foi possível realizar a implementação computacional desta e produzir novos resultados não encontrados previamente na literatura.

Quanto a parte computacional, o código utilizado pelos autores foi descrito e passou por diversas mudanças, sendo atualizado com rotinas e funções mais modernas e paralelizado com OpenMP. Com isso houve ganho de tempo computacional significativo, o que proporcionou a obtenção de resultados mais rápidos e o estudo de novos problemas.

Além destes, foi feito estudo analítico e numérico sobre as funções de Bickley-Naylor de ordem um a três e a partir deste foi possível obter novas metodologias de aproximação numéricas, o que proporcionou melhores resultados tanto para o cálculo do fluxo escalar quanto para a corrente de partículas na rotina implementada.

### 6.2 Perspectivas

O grupo de trabalho na qual este trabalho está inserido tem desenvolvido trabalhos em transporte de partículas em diferentes condições, como trans-

porte em geometria unidimensional com espalhamento isotrópico ou anisotrópico com condições de contorno semi-refletivas e em geometria cilíndrica com espalhamento isotrópico.

Pode-se estender tais trabalhos de forma a resolver novos problemas como, transporte em geometria bidimensional com espalhamento anisotrópico e fronteiras semi-refletivas ou até mesmo transporte em geometria tridimensional com espalhamento isotrópico ou anisotrópico e condições semi-refletivas.

Outra possibilidade seria otimizar o código de forma que este possa ser executado em um cluster, para isso seria necessário a utilização da API OpenMPI o que exige uma reformulação completa do código já existente.

## Referências Bibliográficas

- [1] AB-INITIO PHYSICS RESEARCH GROUP . Cubature (multi-dimensional integration), 2015.
- [2] ABRAMOWITZ, M. Handbook of Mathematical Functions, With Formulas, Graphs, and Mathematical Tables. Dover Publications, Inc., New York, NY, USA, 1974.
- [3] ALTAC, Z. Integrals Involving Bickley and Bessel Functions in Radiative Transfer, and Generalized Exponential Integral Functions. Journal of Heat Transfer 118, 3 (08 1996), 789–792.
- [4] ALTAÇ, Z., AND TEKKALMAZ, M. Nodal synthetic kernel n-skn method for solving radiative heat transfer problems in one-and two-dimensional participating medium with isotropic scattering. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 129 (2013), 214–235.
- [5] ANIKONOV, D., AND KOVTANYUK, A. Transport equation and tomography, vol. 30. Vsp, 2002.
- [6] ARRIDGE, S. R. Optical tomography in medical imaging. Inverse problems 15, 2 (1999), R41.
- [7] AZEVEDO, F., SAUTER, E., KONZEN, P., THOMPSON, M., AND BARIHELLO, L. Integral formulation and numerical simulations for the neutron transport equation in x - y geometry. Annals of Nuclear Energy 112 (02 2018), 735–747.
- [8] AZMY, Y. Comparison of three approximations to the linear-linear nodal transport method in weighted diamond-difference form. Nuclear Science and Engineering 100, 3 (1988), 190–200.

- [9] AZMY, Y., AND SARTORI, E. Nuclear computational science: a century in review. Springer, 2010.
- [10] BADRUZZAMAN, A. Computational methods in nuclear geophysics. Progress in Nuclear Energy 25, 2-3 (1991), 265–290.
- [11] BARICHELLO, L. B., PICOLATO, C. B., AND DA CUNHA, R. D. The ado-nodal method for solving two-dimensional discrete ordinates transport problems. Annals of Nuclear Energy 108 (2017), 376 – 385.
- [12] BARICHELLO, L. B., TRES, A., PICOLATO, C. B., AND AZMY, Y. Y. Recent studies on the asymptotic convergence of the spatial discretization for two-dimensional discrete ordinates solutions. J. Comput. Theor. Transp. 45 (2016), 299 – 313.
- [13] BELL, G. I., AND GLASSTONE, S. Nuclear reactor theory. Tech. rep., US Atomic Energy Commission, Washington, DC (United States), 1970.
- [14] BOARD, O. A. R. OpenMP application program interface version 5.0, 2018.
- [15] BOLTZMANN, L. Weitere studien über das wärmeleichgewicht unter gasmolekülen. In Kinetische Theorie II. Springer, 1970, pp. 115–225.
- [16] BRUNNER, T. A. Forms of approximate radiation transport. Sandia report (2002).
- [17] CACUCI, D. Handbook of Nuclear Engineering: Vol. 1: Nuclear Engineering Fundamentals; Vol. 2: Reactor Design; Vol. 3: Reactor Analysis; Vol. 4: Reactors of Generations III and IV; Vol. 5: Fuel Cycles, Decommissioning, Waste Disposal and Safeguards. No. v. 1 in Handbook of Nuclear Engineering. Springer, 2010.

- [18] CHAI, J. C., LEE, H. S., AND PATANKAR, S. V. Ray effect and false scattering in the discrete ordinates method. Numerical Heat Transfer, Part B: Fundamentals 24, 4 (1993), 373–389.
- [19] CHANDRASEKHAR, S. Radiative transfer. Oxford University Press (1950).
- [20] COHEN, I. B. Isaac Newton’s Papers and Letters on Natural Philosophy and Related Documents, second ed. Harvard University Press, Cambridge, MA, 1978.
- [21] DAVIERWALLA, D. Rational chebyshev approximations to the bickley functions. Nuclear Science and Engineering 80, 3 (1982), 461–469.
- [22] DOMÍNGUEZ, D. S., AND BARROS, R. C. The spectral green’s function linear-nodal method for one-speed x,y-geometry discrete ordinates deep penetration problems. Annals of Nuclear Energy 34, 12 (2007), 958 – 966.
- [23] D.Sc., W. B. Xxiv. some solutions of the problem of forced convection. The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science 20, 132 (1935), 322–343.
- [24] D.Sc., W. B., AND D.I.C., J. N. A. B. Xxv. a short table of the functions  $k_i n(x)$ , from  $n=1$  to  $n=16$ . The London, Edinburgh, and Dublin Philosophical Magazine and Journal of Science 20, 132 (1935), 343–347.
- [25] DUDERSTADT, J. J. Nuclear reactor analysis. Wiley, 1976.
- [26] EL NAQA, I., DEASY, J. O., AND VICIC, M. Locally adaptive denoising of monte carlo dose distributions via hybrid median filtering. In 2003 IEEE Nuclear Science Symposium. Conference Record (IEEE Cat. No. 03CH37515) (2003), vol. 4, IEEE, pp. 2703–2706.
- [27] FREE SOFTWARE FOUNDATION. GSL - GNU scientific library, 2016.

- [28] GUNAY, M., SARER, B., AND HANCERLIOGULLARI, A. Three-dimensional monte carlo calculation of gas production in structural material of apex reactor for some evaluated data files. Annals of Nuclear Energy 55 (05 2013), 292 – 296.
- [29] HUSSEIN, E. M. Computed Radiation Imaging: Physics and Mathematics of Forward and Inverse Problems. Elsevier, 2011.
- [30] KANSCHAT, G. A robust finite element discretization for radiative transfer problems with scattering. East-West J. Numer. Math 6 (1998), 265 – 272.
- [31] KLOSE, A. D., AND HIELSCHER, A. H. Optical tomography using the time-independent equation of radiative transfer part 2 inverse model. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 72, 5 (2002), 715–732.
- [32] KLOSE, A. D., NETZ, U., BEUTHAN, J., AND HIELSCHER, A. H. Optical tomography using the time-independent equation of radiative transfer - part 1: forward model. Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer 72, 5 (2002), 691–713.
- [33] LAMARSH, J. R., AND BARATTA, A. J. Introduction to nuclear engineering, vol. 3. Prentice hall Upper Saddle River, NJ, 2001.
- [34] LATHROP, K. D. Ray effects in discrete ordinates equations. Nuclear Science and Engineering 32, 3 (1968), 357–369.
- [35] McLAUGHLIN, T. D., SJODEN, G. E., AND MANALO, K. L. Detector placement optimization for cargo containers using deterministic adjoint transport examination for snm detection. International Conference on Mathematics and Computational Methods Applied to Nuclear Science 5 (2011), 8–12.



- [36] MILLER, K. A., AND CHARLTON, W. S. An inverse transport approach to radiation source location for border security. In Annual Meeting on the European Safeguards Research and Development Association. Aix-en-Provence France (2007).
- [37] MODEST, M. F. Radiative heat transfer, second ed. Academic Press, San Diego, 2003.
- [38] NYSTRÖM, E. J. Über Die Praktische Auflösung von Integralgleichungen mit Anwendungen auf Randwertaufgaben. Acta Mathematica 54, 1 (1930), 185–204.
- [39] PRABHA, R. H., AND YADAV, R. Polynomial expressions for bickley and exponential integral functions. Annals of Nuclear Energy 23, 12 (1996), 1021–1025.
- [40] REICHERT, J. T. Abordagens analíticas para problemas de transporte de radiação com dependência espectral. Tese, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-graduação em Engenharia Mecânica (2009).
- [41] SAUTER, E., AZEVEDO, F., AND KONZEN, P. Nystrom method applied to the transport equation in a semi-reflective rectangle. Journal of Computational and Theoretical Transport 47 (02 2019), 1–22.
- [42] SCHULZ, D. M. Métodos analíticos e computacionais em geofísica nuclear. Dissertação de Mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-graduação em Matemática Aplicada (2014).
- [43] TSAI, R., AND LOYALKA, S. Technical notes. numerical method for solving the integral equation of neutron transport: Iii. Nucl. Sci. Eng.; (United States) 61:4 (12 1976).

- [44] WOOD, J. Computational methods in reactor shielding. Pergamon Press, 1982.
- [45] WU, Y., SONG, J., ZHENG, H., SUN, G., HAO, L., LONG, P., HU, L., TEAM, F., ET AL. Cad-based monte carlo program for integrated simulation of nuclear system supermc. Annals of Nuclear Energy 82 (2015), 161–168.
- [46] YOSIDA, K. Functional analysis, 6th ed. Springer Verlag, 1980.

## 7 APÊNDICE A

Este apêndice apresenta os teoremas de remoção das singularidades de  $J_b B$ . Primeiramente é apresentado para a fronteira  $L_1$  e na sequência para o canto  $(0, 0)$ .

**Teorema 3.** *Tem-se que*

$$J_1(\mathbf{x}) = \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y}} \int_{L_1} B_1(\mathbf{y}) k_{j2}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\ell = 0, \quad (7.1)$$

$$J_2(\mathbf{x}) = \lim_{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y}} \int_{L_1} B_1(\mathbf{y}) k_{j2}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\ell = \pi B_1(x_1), \quad (7.2)$$

onde  $\mathbf{x}$  é ponto interior de  $D$ ,  $\mathbf{y} \in L_1$  e  $k_{j2}$  é dado pela equação (2.62).

*Demonstração.* Seja  $\mathbf{x} = (x_1, \delta)$ ,  $\mathbf{y} = (t, 0)$  e  $\mathbf{n} = (0, -1)$ , onde  $\delta > 0$  e  $x_1 \in (0, a)$ , resulta que  $(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} = \delta$ ,  $\|(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \times \mathbf{n}\| = -t + x_1$ ,  $|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2 = \sqrt{(x_1 - t)^2 + \delta^2}$ ,  $\sin(\alpha) = \frac{x_1 - t}{\sqrt{(x_1 - t)^2 + \delta^2}}$  e  $\cos(\alpha) = \frac{\delta}{\sqrt{(x_1 - t)^2 + \delta^2}}$ . Para  $J_1$ , segue que

$$J_1(\mathbf{x}) = \int_{L_1} B_1(\mathbf{y}) k_{j2}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\ell = \int_{L_1} B_1(\mathbf{y}) \frac{2(x_1 - y_1)(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^3} \text{Ki}_3(\sigma_t |\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2) d\ell \quad (7.3a)$$

$$= 2\delta \int_0^a B_1(t) \frac{(x_1 - t) \text{Ki}_3(\sigma_t \sqrt{(x_1 - t)^2 + \delta^2})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^3} dt \quad (7.3b)$$

$$= I_1 + I_2 \quad (7.3c)$$

onde

$$I_1 := 2\delta \int_0^a B_1(t)(x_1 - t) \frac{\text{Ki}_3\left(\sigma_t \sqrt{(x_1 - t)^2 + \delta^2}\right) - \frac{\pi}{4}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^3} dt, \quad (7.4)$$

$$I_2 := \frac{\pi\delta}{2} \int_0^a B_1(t)(x_1 - t) \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^3} dt. \quad (7.5)$$

Como  $B_1$  é limitada,  $\text{Ki}_3(0) = \frac{\pi}{4}$  e  $\text{Ki}_3$  é Lipschitz, segue que

$$|I_1| \leq C\delta \int_0^a \frac{(x_1 - t) |\text{Ki}_3(\sigma_t \sqrt{(x_1 - t)^2 + \delta^2}) - \text{Ki}_3(0)|}{\sqrt{(x_1 - t)^2 + \delta^2}^3} dt \quad (7.6a)$$

$$\leq C\delta \int_0^a \frac{(x_1 - t) |\sqrt{(x_1 - t)^2 + \delta^2}|}{\sqrt{(x_1 - t)^2 + \delta^2}^3} dt \quad (7.6b)$$

$$= C\delta \int_{-x_1}^{x_1-a} \frac{-u}{\sqrt{u^2 + \delta^2}^2} du \quad (7.6c)$$

$$\leq C\delta \int_{-a}^a \frac{u}{\sqrt{u^2 + \delta^2}} du \leq 2C\delta \tan^{-1} \left( \frac{a}{\delta} \right). \quad (7.6d)$$

Logo, quando  $\delta \rightarrow 0^+$ ,  $I_1 \rightarrow 0$ .

Para  $I_2$ , note que

$$\frac{d\alpha}{dt} = \frac{-\delta(x_1 - t)}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^3}, \quad (7.7)$$

assim

$$I_2 = \frac{\pi}{2} \int_{\alpha_1}^{\alpha_2} B_1(x_1 - \delta \tan \alpha) \sin(\alpha) d\alpha \quad (7.8)$$

onde  $\alpha_1 := \tan^{-1} \left( \frac{x_1}{\delta} \right)$  e  $\alpha_2 := \tan^{-1} \left( \frac{x_1 - a}{\delta} \right)$ .

Portanto, quando  $\delta \rightarrow 0^+$ , resulta que

$$I_2 \rightarrow \frac{\pi}{2} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} B_1(x_1) \sin(\alpha) d\alpha = 0. \quad (7.9)$$

Para  $J_2$  a demonstração é análoga e, para este caso, o termo  $I_2$  é dado por

$$I_2 \rightarrow \frac{\pi}{2} \int_{-\pi/2}^{\pi/2} B_1(x_1) \cos(\alpha) d\alpha = \pi B_1(x_1). \quad (7.10)$$

□

**Teorema 4.** *Tem-se que*

$$J_1(0, 0) = -\frac{\pi}{4}B_1(0) + \frac{3\pi}{4}B_2(0), \quad (7.11)$$

$$J_2(0, 0) = \frac{3\pi}{4}B_1(0) - \frac{\pi}{4}B_2(0). \quad (7.12)$$

*Demonstração.* Os seguintes itens representam as formas de estudar o limite para o ponto  $(0, 0)$ . Os dois primeiros itens, apresentam o método utilizando a fronteira  $L_1$ , os dois últimos itens apresentam utilizando  $L_2$ .

- $\mathbf{x} = (\delta, \epsilon)$ , com  $\delta, \epsilon > 0$  e  $\epsilon$  tende à 0 e, em seguida,  $\delta$  tende à 0. Nesse caso  $\mathbf{y} \in L_1$ ;
- $\mathbf{x} \in L_2$  e  $\mathbf{x}$  tende a fronteira  $L_1$ . Nesse caso  $\mathbf{y} \in L_1$ .
- $\mathbf{x} = (\epsilon, \delta)$ , com  $\delta, \epsilon > 0$  e  $\epsilon$  tende à 0 e, em seguida,  $\delta$  tende à 0. Nesse caso  $\mathbf{y} \in L_2$ ;
- $\mathbf{x} \in L_1$  e  $\mathbf{x}$  tende a fronteira  $L_2$ . Nesse caso  $\mathbf{y} \in L_2$ ;

O primeiro item representa um ponto do domínio que tende a fronteira  $L_1$  e em seguida a fronteira  $L_2$ , já o terceiro item descreve o mesmo movimento, mas com as fronteiras alternadas. Tendo em vista que a demonstração dos dois últimos itens é análoga aos dois primeiros, será apresentado apenas as demonstrações dos primeiros. Também será apresentada apenas a demonstração para a primeira componente do vetor corrente, a demonstração para a segunda componente é semelhante a esta.

Note que para o primeiro e terceiro item, basta definir  $\mathbf{x} = (\delta, \epsilon)$  e  $\mathbf{x} = (\epsilon, \delta)$ , com  $\delta, \epsilon > 0$ , utilizar o Teorema 3 e tomar o limite com  $\delta$  tendendo à 0, ou seja,

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \lim_{\substack{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y} \\ \mathbf{y} \in L_1}} \int_{L_1} B_1(\mathbf{y}) k_{j2}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\ell = 0, \quad (7.13)$$

$$\lim_{\delta \rightarrow 0} \lim_{\substack{\mathbf{x} \rightarrow \mathbf{y} \\ \mathbf{y} \in L_2}} \int_{L_2} B_2(\mathbf{y}) k_{j_2}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\ell = \pi B_2(0). \quad (7.14)$$

Para o segundo item, seja  $\mathbf{x} = (0, \delta)$ ,  $\mathbf{y} = (t, 0)$  e  $\mathbf{n} = (0, -1)$  onde  $\delta > 0$  e tem-se que  $(\mathbf{y} - \mathbf{x}) \cdot \mathbf{n} = \delta$ ,  $|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^2 = \delta^2 + t^2$ ,  $\sin(\alpha) = \frac{t}{\sqrt{\delta^2 + t^2}}$ ,  $\cos(\alpha) = \frac{\delta}{\sqrt{\delta^2 + t^2}}$ .

Então

$$\int_{L_1} B_1(\mathbf{y}) k_{j_2}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) d\ell = 2\delta \int_0^a B_1(\mathbf{y})(x_1 - y_1) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t \sqrt{\delta^2 + t^2})}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^3} dt = I_1 + I_2 \quad (7.15)$$

onde

$$I_1 = \frac{\pi\delta}{2} \int_0^a B_1(\mathbf{y})(-t) \frac{1}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^3} dt \quad (7.16)$$

$$I_2 = 2\delta \int_0^a B_1(\mathbf{y})(-t) \frac{\text{Ki}_3(\sigma_t \sqrt{\delta^2 + t^2}) - \frac{\pi}{4}}{|\mathbf{x} - \mathbf{y}|_2^3} dt \quad (7.17)$$

De forma análoga ao teorema anterior,  $I_2 \rightarrow 0$  quando  $\delta \rightarrow 0^+$ . Para  $I_1$ , note que  $\frac{d\alpha}{dt} = \frac{\delta}{\delta^2 + t^2}$ , logo,

$$I_1 = -\frac{\pi}{2} \int_0^{\frac{\pi}{2}} B_1(\delta \tan \alpha) \sin(\alpha) d\alpha = -\frac{\pi}{2} B_1(0). \quad (7.18)$$

quando  $\delta \rightarrow 0^+$ .

Portanto, repetindo o mesmo processo para o quarto item, somando todas as contribuições e tomando a média, obtêm-se que

$$J_1(0, 0) = \underbrace{0 - \frac{\pi}{4} B_1(0)}_{L_1} + \underbrace{\frac{\pi}{2} B_2(0) + \frac{\pi}{4} B_2(0)}_{L_2} = -\frac{1}{4} B_1(0) + \frac{3}{4} B_2(0). \quad (7.19)$$

□