

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

**Simulação do problema de transporte em
domínio não homogêneo com espalhamento
anisotrópico**

por

Luana Lazzari

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

Prof. Dr. Fabio Souto de Azevedo
Orientador

Prof. Dr. Esequia Sauter
Co-orientador

Porto Alegre, janeiro de 2022

CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Lazzari, Luana

Simulação do problema de transporte em domínio não homogêneo com espalhamento anisotrópico / Luana Lazzari.—
Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2022.

123 p.: il.

Tese (doutorado)— Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2022.

Orientador: Souto de Azevedo, Fabio;

Co-orientador: Sauter, Esequia

Tese: Matemática Aplicada: Análise Aplicada,
Equação de transporte, Domínio não homogêneo, Espalhamento anisotrópico, Método de Nyström

Simulação do problema de transporte em domínio não homogêneo com espalhamento anisotrópico

por

Luana Lazzari

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

Doutora em Matemática Aplicada

Linha de Pesquisa: Análise Aplicada

Orientador: Prof. Dr. Fabio Souto de Azevedo

Co-orientador: Prof. Dr. Esequia Sauter

Banca examinadora:

Prof. Dr. Richard Vasques
The Ohio State University

Prof. Dr. Rubem Mário Figueiró Vargas
PUCRS

Prof^a. Dr^a. Cibele Aparecida Ladeia
UFRGS

Tese defendida em
dezembro de 2021.

Prof. Dr. Lucas da Silva Oliveira
Coordenador

AGRADECIMENTOS

A minha família e amigos que sempre me apoiaram e incentivaram.

Aos meus orientadores, Prof. Dr. Esequia Sauter e Prof. Dr. Fabio Souto de Azevedo pela oportunidade de realização deste trabalho, orientação e ensinamentos.

A CAPES (Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior) e ao CNPQ (Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico) pelo suporte financeiro.

SUMÁRIO

LISTA DE FIGURAS	ix
LISTA DE TABELAS	x
LISTA DE SIGLAS E SÍMBOLOS	xvii
RESUMO	xix
ABSTRACT	1
1 INTRODUÇÃO	2
2 SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE COM ESPALHA- MENTO ISOTRÓPICA EM DOMÍNIO NÃO HOMOGÊNEO PELO MÉTODO DE NYSTRÖM	8
2.1 Formulação integral	9
2.2 Parâmetros contínuos	14
2.2.1 Tratamento da singularidade	14
2.2.2 Tratamento analítico da parte singular	16
2.2.3 Método de Nyström	21
2.2.4 Cálculo do fluxo escalar na malha	22
2.2.5 Interpolação	23
2.3 Parâmetros constantes por partes	24
2.3.1 Tratamento da singularidade	24
2.3.2 Tratamento analítico da parte singular	25

2.3.3	Método de Nyström	28
2.3.4	Cálculo do fluxo escalar na malha	28
2.3.5	Interpolação	29
3	SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE ISOTRÓPICA EM DOMÍNIO NÃO HOMOGÊNEO USANDO MUDANÇA DE VARIÁVEL E O MÉTODO DE NYSTRÖM	30
3.1	Mudança de variável	30
3.2	Formulação integral	31
3.3	Parâmetros contínuos	34
3.3.1	Tratamento da singularidade	34
3.3.2	Tratamento analítico da parte singular	35
3.3.3	Método de Nyström	38
3.3.4	Cálculo do fluxo escalar na malha	38
3.3.5	Interpolação	39
3.4	Parâmetros constantes por partes	40
3.4.1	Tratamento da singularidade	40
3.4.2	Tratamento analítico da parte singular	41
3.4.3	Método de Nyström	43
3.4.4	Cálculo do fluxo escalar na malha	44
3.4.5	Interpolação	44

4	RESULTADOS NUMÉRICOS DO PROBLEMA DE TRANSPORTE COM ESPALHAMENTO ISOTRÓPICO	46
4.1	Implementação numérica	46
4.2	Domínio homogêneo	47
4.3	Domínio multirregião	51
4.4	Domínio não homogêneo	61
4.5	Problema de transferência radiativa com albedo variando exponenci- almente	67
4.5.1	Resultados numéricos para as distribuições de saída	67
4.5.2	Resultados numéricos para os coeficientes A^* e B^*	75
5	SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE NÃO HOMOGÊ- NEA COM ESPALHAMENTO ANISOTRÓPICO PELO MÉTODO DE NYSTRÖM	81
5.1	Formulação integral	81
5.2	Anisotropia linear	86
5.2.1	Remoção da singularidade	89
5.2.2	Cálculo do fluxo escalar na malha	91
5.3	Anisotropia quadrática	94
5.3.1	Remoção da singularidade	97
5.3.2	Cálculo do fluxo escalar na malha	100

6	RESULTADOS NUMÉRICOS DO PROBLEMA DE TRANSPORTE COM ESPALHAMENTO ANISOTRÓPICO	103
6.1	Resultados numéricos	104
7	CONCLUSÕES	115
	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	123

LISTA DE FIGURAS

4.1	Gráfico para o fluxo escalar do problema multirregião 3.	53
-----	------------------------------------------------------------------	----

LISTA DE TABELAS

4.1	Comparação dos resultados numéricos para o fluxo escalar do problema 1, $\Phi(x)$, gerados pelas quadraturas de Gauss-Legendre em um meio homogêneo com os resultados publicados por Dalmolin <i>et al.</i> [14] e com a solução exata [45].	48
4.2	Comparação dos resultados numéricos para o fluxo escalar do problema 1, $\Phi(x)$, gerados pela regra de Boole em um meio homogêneo com os resultados publicados por Dalmolin <i>et al.</i> [14] e com a solução exata [45].	48
4.3	Tempo computacional do problema 1.	49
4.4	Comparação dos resultados numéricos para o fluxo escalar do problema 2, $\Phi(x)$, gerados pela quadratura de Gauss-Legendre em um meio homogêneo com os resultados publicados por Nunes e Barros [32]	50
4.5	Comparação dos resultados numéricos para o fluxo escalar do problema 2, $\Phi(x)$, gerados pela regra de Boole em um meio homogêneo com os resultados publicados por Nunes e Barros [32]	50
4.6	Parâmetros do problema multirregião 3	51
4.7	Parâmetros do problema multirregião 4.	52
4.8	Comparação dos resultados numéricos para o fluxo escalar do problema 3 gerados pela quadratura de Gauss-Legendre com os resultados publicados por Nunes e Barros [32] e Prolo e Rodrigues [35].	52
4.9	Comparação dos resultados numéricos para o fluxo escalar do problema 3 gerados pela regra de Boole com os resultados publicados por Nunes e Barros [32] e Prolo e Rodrigues [35].	54

4.10	Tempo computacional do problema 3	55
4.11	Parâmetros do problema multirregião 4 reescrito.	55
4.12	Comparação do fluxo escalar do problema 4 gerado pela metodologia 1 considerando quadratura de Gauss-Legendre com os resultados publicados por Garcia e Siewert [22] e Schulz [42].	56
4.13	Comparação do fluxo escalar do problema 4 gerado pela metodologia 1 considerando regra de Boole com os resultados publicados por Garcia e Siewert [22] e Schulz [42].	57
4.14	Comparação do fluxo escalar do problema 4 gerado pela metodologia 2 considerando quadratura de Gauss-Legendre com os resultados publicados por Garcia e Siewert [22] e Schulz [42].	58
4.15	Comparação do fluxo escalar do problema 4 gerado pela metodologia 2 considerando regra de Boole com os resultados publicados por Garcia e Siewert [22] e Schulz [42].	59
4.16	Tempo computacional do problema 4	60
4.17	Dados para os problemas de transporte em domínio não homogêneo.	61
4.18	Dados para os problemas de transporte em domínio não homogêneo metodologia 2.	62
4.19	Resultados numéricos do problema 5: comparação entre as soluções determinadas pelas metodologias 1 e 2.	62
4.20	Resultados numéricos do problema 6: comparação entre as soluções determinadas pelas metodologias 1 e 2.	63
4.21	Resultados numéricos do problema 7: comparação entre as soluções determinadas pelas metodologias 1 e 2.	64

4.22	Resultados numéricos do problema 8: comparação entre as soluções determinadas pelas metodologias 1 e 2.	65
4.23	Resultados numéricos do problema 9: comparação entre as soluções determinadas pelas metodologias 1 e 2.	66
4.24	Tempo computacional do problema 8 e 9.	66
4.25	Comparação dos resultados numéricos para o fluxo angular em $x = 0$ com $s = 1$ com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23]. . .	71
4.26	Comparação dos resultados numéricos para o fluxo angular do problema 10 em $x = 0$ com $s = 10$ com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23].	71
4.27	Comparação dos resultados numéricos para o fluxo angular do problema 10 em $x = 0$ com $s = 100$ com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23].	72
4.28	Comparação dos resultados numéricos para o fluxo angular do problema 10 em $x = 0$ com $s = 1000$ com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23].	72
4.29	Comparação dos resultados numéricos para o fluxo angular do problema 10 em $x = L$ com $s = 1$ com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23].	73
4.30	Comparação dos resultados numéricos para o fluxo angular do problema 10 em $x = L$ com $s = 10$ com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23].	73
4.31	Comparação dos resultados numéricos para o fluxo angular do problema 10 em $x = L$ com $s = 100$ com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23].	74

4.32	Comparação dos resultados numéricos para o fluxo angular do problema 10 em $x = L$ com $s = 1000$ com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23].	74
4.33	Comparação dos resultados numéricos para o coeficiente A^* do problema 10 em $L=0.1$ cm com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23], Machado [29] e Vargas e Vilhena [46].	76
4.34	Comparação dos resultados numéricos para o coeficiente A^* do problema 10 em $L=1.0$ cm com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23] e Machado [29].	76
4.35	Comparação dos resultados numéricos para o coeficiente A^* do problema 10 em $L=5.0$ cm com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23] e Machado [29].	77
4.36	Comparação dos resultados numéricos para o coeficiente A^* do problema 10 em $L=10.0$ cm com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23].	77
4.37	Comparação dos resultados numéricos para o coeficiente B^* do problema 10 em $L=0.1$ cm com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23], Machado [29] e Vargas e Vilhena [46].	78
4.38	Comparação dos resultados numéricos para o coeficiente B^* do problema 10 em $L=1.0$ cm com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23] e Machado [29].	78
4.39	Comparação dos resultados numéricos para o coeficiente B^* do problema 10 em $L=5.0$ cm com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23] e Machado [29].	79

4.40	Comparação dos resultados numéricos para o coeficiente B^* do problema 10 em $L=10.0$ cm com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23].	79
6.1	Comparação entre os resultados numéricos para o fluxo escalar, $2J_0$, do problema 1, com os resultados publicados por Vargas <i>et al.</i> [45] e Azevedo <i>et al.</i> [2].	105
6.2	Comparação entre os resultados numéricos para a corrente, $2J_1$, do problema 1, com os resultados publicados por Vargas <i>et al.</i> [45] e Azevedo <i>et al.</i> [2].	105
6.3	Comparação entre os resultados numéricos para o fluxo escalar, $2J_0$, do problema 2, com os resultados publicados por Vargas <i>et al.</i> [45] e Azevedo <i>et al.</i> [2].	106
6.4	Comparação entre os resultados numéricos para a corrente, $2J_1$, do problema 2, com os resultados publicados por Vargas <i>et al.</i> [45] e Azevedo <i>et al.</i> [2].	106
6.5	Comparação entre os resultados numéricos para o fluxo escalar, $2J_0$, do problema 3, com os resultados publicados por Azevedo <i>et al.</i> [2] para $\beta_1 = -0.4$	107
6.6	Comparação entre os resultados numéricos para a corrente, $2J_1$, do problema 3, com os resultados publicados por Azevedo <i>et al.</i> [2] para $\beta_1 = -0.4$	107
6.7	Comparação entre os resultados numéricos para o fluxo escalar, $2J_0$, do problema 3, com os resultados publicados por Azevedo <i>et al.</i> [2] para $\beta_1 = -0.2$	107

6.8	Comparação entre os resultados numéricos para a corrente, $2J_1$, do problema 3, com os resultados publicados por Azevedo <i>et al.</i> [2] para $\beta_1 = -0.2$	108
6.9	Comparação entre os resultados numéricos para o fluxo escalar, $2J_0$, do problema 3, com os resultados publicados por Azevedo <i>et al.</i> [2] para $\beta_1 = 0$	108
6.10	Comparação entre os resultados numéricos para a corrente, $2J_1$, do problema 3, com os resultados publicados por Azevedo <i>et al.</i> [2] para $\beta_1 = 0$	108
6.11	Comparação entre os resultados numéricos para o fluxo escalar, $2J_0$, do problema 3, com os resultados publicados por Azevedo <i>et al.</i> [2] para $\beta_1 = 0.2$	109
6.12	Comparação entre os resultados numéricos para a corrente, $2J_1$, do problema 3, com os resultados publicados por Azevedo <i>et al.</i> [2] para $\beta_1 = 0.2$	109
6.13	Comparação entre os resultados numéricos para o fluxo escalar, $2J_0$, do problema 3, com os resultados publicados por Azevedo <i>et al.</i> [2] para $\beta_1 = 0.4$	109
6.14	Comparação entre os resultados numéricos para a corrente, $2J_1$, do problema 3, com os resultados publicados por Azevedo <i>et al.</i> [2] para $\beta_1 = 0.4$	110
6.15	Comparação entre os resultados numéricos para o fluxo escalar, $2J_0$, do problema 4, com os resultados publicados por Azevedo <i>et al.</i> [2] e com o método DD para $\beta_2 = -0.8$	110

6.16	Comparação entre os resultados numéricos para a corrente, $2J_1$, do problema 4, com os resultados publicados por Azevedo <i>et al.</i> [2] e com o método DD para $\beta_2 = -0.8$	111
6.17	Comparação entre os resultados numéricos para o fluxo escalar, $2J_0$, do problema 4, com os resultados publicados por Azevedo <i>et al.</i> [2] e com o método DD para $\beta_2 = -0.4$	111
6.18	Comparação entre os resultados numéricos para a corrente, $2J_1$, do problema 4, com os resultados publicados por Azevedo <i>et al.</i> [2] e com o método DD para $\beta_2 = -0.4$	112
6.19	Comparação entre os resultados numéricos para o fluxo escalar, $2J_0$, do problema 4, com os resultados publicados por Azevedo <i>et al.</i> [2] e com o método DD para $\beta_2 = 0.4$	112
6.20	Comparação entre os resultados numéricos para a corrente, $2J_1$, do problema 4, com os resultados publicados por Azevedo <i>et al.</i> [2] e com o método DD para $\beta_2 = 0.4$	113
6.21	Comparação entre os resultados numéricos para o fluxo escalar, $2J_0$, do problema 4, com os resultados publicados por Azevedo <i>et al.</i> [2] e com o método DD para $\beta_2 = 0.8$	113
6.22	Comparação entre os resultados numéricos para a corrente, $2J_1$, do problema 4, com os resultados publicados por Azevedo <i>et al.</i> [2] e com o método DD para $\beta_2 = 0.8$	114

LISTA DE SIGLAS E SÍMBOLOS

Lista de Siglas

GFD	Spectral Green's Function
LTS_N	Aplicação do método S_N com a transformada de Laplace
P_N	Método de harmônicos esféricos
S_N	Método de ordenadas discretas
ADO	Método de Ordenadas Discretas Analítico
D	Método Degrau
DC	Método Degrau Característico
DD	Método Diamond Difference

Lista de Símbolos

$\bar{\Phi}(y)$	Fluxo escalar de partículas
$\bar{\Psi}(y, \mu)$	Fluxo angular de partículas
$\bar{\sigma}_s(y)$	Seção de choque de espalhamento [cm^{-1}]
$\bar{\sigma}_t(y)$	Seção de choque macroscópica total [cm^{-1}]
$\bar{S}(y)$	Termo fonte
$\beta_l(x)$	Constantes dos Polinômios de Legendre
μ	Cosseno do ângulo entre a direção de propagação das partículas e o eixo x

$\omega(x, \mu, \mu')$	Núcleo de espalhamento
$\Phi(x)$	Fluxo escalar de partículas
$\Psi(x, \mu)$	Fluxo angular de partículas
ρ_0	Coeficiente de reflexão
ρ_L	Coeficiente de reflexão
$\sigma_s(x)$	Seção de choque de espalhamento [cm^{-1}]
$\sigma_t(x)$	Seção de choque macroscópica total [cm^{-1}]
B_0	Função que representa a contribuição da fronteira
B_L	Função que representa a contribuição da fronteira
L	Comprimento do domínio [cm]
N	Número de pontos da malha
$P_l(\mu)$	Polinômios de Legendre
s	Constante do albedo.
$S(x)$	Termo fonte
w_j	Pesos da quadratura numérica
x	Variável espacial
y	Variável espacial
D	Domínio do problema

RESUMO

Neste trabalho solucionamos a equação de transporte unidimensional com condições de contorno semi-refletivas em um domínio não homogêneo para os casos com espalhamento isotrópico e anisotrópico. Determinamos a solução do problema com espalhamento isotrópico por meio de duas diferentes metodologias nas quais usamos o método de Nyström na discretização. Essencialmente esse método se resume no truncamento da formulação integral da equação do transporte usando uma quadratura numérica. A primeira metodologia consiste em aplicar o método de Nyström para discretizar o problema originalmente proposto, enquanto, a segunda consiste em transformá-lo em um problema mais simples através de uma mudança de variável para depois aplicar a discretização. Ambas as equações integrais envolvem operadores com singularidades que são tratadas através de técnicas analíticas e computacionais. O problema de transporte com anisotropia, para os casos linear e quadrático, é solucionado aplicando somente a segunda metodologia. Os algoritmos dessas metodologias são implementados em linguagem de programação C com o auxílio de rotinas da GNU Scientific Library. O fluxo escalar é calculado para duas diferentes quadraturas numéricas, a saber, Gauss-Legendre e regra de Boole. A fim de validar a eficiências das metodologias propostas para o problema com espalhamento isotrópico nós comparamos nossos resultados numéricos nos casos homogêneo, multirregião e não homogêneo com dados disponíveis na literatura. Além disso, produzimos novos resultados numéricos resolvendo diversos problemas não homogêneos e comparamos as soluções obtidas pelas duas abordagens propostas. No caso do problema de transporte com anisotropia, simulamos os casos com espalhamento isotrópico, linear e quadrático e comparamos nossos resultados com dados da literatura.

ABSTRACT

In this work we solve the one-dimensional transport equation with semi-reflective boundary conditions and non-homogeneous domain for isotropic and anisotropic cases. We determine the solution the isotropic problem using two different methodologies and in both we use the Nyström method for discretization. This method consists of truncating the integral formulation of the transport equation using a numerical quadrature. The first methodology consists of applying the Nyström method to discretize the problem originally proposed, while the second consists of transforming it into a more simple problem through a change of variable and then applying the discretization. Both integral equations involve operators with singularities that are treated through analytical and computational techniques. The anisotropic transport problem, for isotropic and anisotropic cases, is solved by applying only the second methodology. The algorithms are implemented in C programming language with the use of routines of GNU Scientific Library. The scalar flux is calculated for two numerical quadrature, namely Gauss-Legendre and Boole's rule. In order to validate the proposed methodologies for the isotropic problem, we compare our numerical results in homogeneous, multiregion and non-homogeneous cases with those numerical results from the literature. Furthermore, we produce new numerical results solving several non-homogeneous problems and compare our solutions obtained by the two approaches proposed in this work. In the case of the anisotropic transport problems, we simulate the cases with isotropic, linear and quadratic scattering and compare our results with those from the literature.

1 INTRODUÇÃO

A equação de transporte é uma versão linear da equação de Boltzmann desenvolvida por Ludwig Boltzmann em 1872 em seus estudos de cinética de gases [9]. Essa é uma equação integro-diferencial que descreve a distribuição de partículas, tais como nêutrons [15, 48] e fótons [12, 31] e é determinada a partir de um balanço entre a produção e a perda de partículas em um volume arbitrário, como apresentado nos trabalhos [8, 37]. A equação de transporte possui sete variáveis independentes, sendo três variáveis que determinam a posição espacial das partículas, duas que definem a direção de propagação da partícula, uma variável para a energia e uma para a evolução temporal.

As aplicações deste modelo podem ser encontradas em diferentes áreas, tais como na física de reatores [18, 26], medicina nuclear [17], transferência radiativa [29, 37, 38] e análise de blindagens [10, 20], entre muitas outras. Em virtude do número diversificado de aplicações para a equação de transporte, ela se tornou o foco do estudo de muitos pesquisadores, cujos interesses estão concentrados em desenvolver metodologias analíticas e computacionais para calcular a solução deste problema.

As metodologias para resolver numericamente a equação de transporte em diferentes geometrias e condições de contorno são classificadas em duas grandes famílias: os métodos determinísticos e probabilísticos. Dessa última família, destacamos o método de Monte Carlo [19], que é obtido a partir de uma modelagem computacional probabilística do fenômeno, tratando o problema físico diretamente. Dentre a variedade de métodos determinísticos disponíveis na literatura, cuja abordagem é solucionar modelos matemáticos aproximados da equação de transporte, podemos citar os métodos de ordenadas discretas, S_N , [12], os métodos de Harmônicos Esféricos, P_N , e os métodos integrais [28].

O método P_N consiste na expansão da dependência angular da equação em harmônicos esféricos. Esta metodologia foi primeiramente aplicada na área de transferência radiativa por Jeans [25] e, na teoria de transporte de nêutrons, este método pode ser encontrado nos trabalhos desenvolvidos por Mark [30]. O método S_N tem como base a discretização da variável angular da equação de transporte e aproximação do seu termo integral por uma quadratura numérica. Como resultado deste procedimento temos um sistema de equações diferenciais para o fluxo de partículas [13, 43]. A aplicação do método de ordenadas discretas na solução de problemas de transporte de nêutrons foi proposta por Wick [24] e na área de transferência radiativa por Chandrasekhar [12].

Os métodos LTS_N , Diamond Difference, Degrau, Degrau Característico e ADO são algumas metodologias que solucionam a formulação de ordenadas discretas. A ideia do método LTS_N é aplicar a transformada de Laplace no conjunto de equações gerado pela aproximação S_N do qual resulta em um sistema algébrico. Da solução do sistema e aplicação da transformada inversa de Laplace obtém-se fluxo angular [47]. Os métodos Diamond Difference, Degrau e Degrau Característico discretizam as variáveis espaciais das equações S_N e utilizam o tradicional esquema de iteração de fonte, para convergir para a solução do sistema de equações algébricas resultante [32]. E ainda, o método de Diamond Difference considera que o fluxo angular médio em cada nodo é a média aritmética dos fluxos angulares nas interfaces da célula espacial [5]. No método Degrau temos que o fluxo angular médio em cada nodo é aproximado pelo fluxo angular em uma das interfaces da célula e no método Degrau Característico o termo de espalhamento é inicialmente aproximado por uma constante [32, 41]. Já o método ADO consiste em representar analiticamente a solução das equações S_N através de uma expansão em termos das autofunções do problema [6, 7].

Os métodos integrais são aqueles que resolvem uma forma equivalente da equação integro-diferencial de transporte chamada de formulação integral. O

procedimento para determinar a formulação integral consiste em integrar a equação ao longo das linhas características e reescrever o problema como uma equação de Fredholm do segundo tipo. Esta metodologia nos permite tratar com exatidão a variável angular, visto que a solução da equação integral, que é o fluxo escalar, depende somente das variáveis espaciais.

Dentre os métodos numéricos com os quais podemos solucionar a equação integral de transporte temos os métodos *GFD* e de Nyström. O método *GFD*, aplicado no trabalho de Azevedo *et al.* [4], consiste na discretização obtida a partir da formulação integral do problema de transporte o qual aproxima os operadores projetando-os em espaços de dimensão finita e transformando-os em matrizes [4, 40].

O método de Nyström, desenvolvido por Evert Johannes Nyström em 1930 [33], foi aplicado inicialmente na teoria de transporte de nêutrons por Tsai e Loyalka [44]. A ideia deste método consiste basicamente em aproximar os operadores integrais por uma quadratura numérica e assim obter um sistema de equações algébricas [27]. Em [16] e [27] encontramos a descrição deste método numérico aplicado na aproximação de soluções de equações integrais de Fredholm do segundo tipo.

Em trabalhos recentes, o método de Nyström foi aplicado na resolução de problemas de transporte em diferentes geometrias. O caso unidimensional da equação de transporte, considerando domínio homogêneo e condições de contorno semi-refletivas, foi resolvido por Dalmolin *et al.* [14]. Já a solução desse problema em geometria bidimensional é apresentada por Azevedo *et al.* [3] e por Sauter *et al.* [39]. O primeiro trabalho calcula a solução numérica para a equação integral do transporte com condição de contorno de vácuo, enquanto o segundo, generaliza para condições de contorno semi-refletivas. Também podemos encontrar esse método aplicado na solução do problema de transporte em geometria cilíndrica, como apresentado no trabalho de Bublitz *et al.* [11]. Visto que a formulação integral do problema de transporte envolve operadores com singularidades nos núcleos, a aplicação direta do método de Nyström não funciona. Assim, um esforço significativo nos trabalhos

citados consiste em aplicar técnicas analíticas e computacionais para contornar essa dificuldade.

Neste trabalho propomos resolver numericamente a equação de transporte de partículas unidimensional para um domínio não homogêneo e condições de contorno semi-refletivas para os casos com espalhamento isotrópico e anisotrópico. O problema com espalhamento isotrópico é solucionado por meio de duas metodologias. Na metodologia 1 iniciamos determinando a formulação integral do problema de transporte e removendo, através de técnicas analíticas e computacionais, as singularidades do operador integral e na sequência aplicamos o método de Nyström para discretizar esse operador. Este mesmo método integral é aplicado na metodologia 2 no entanto, em nossa segunda proposta de solução aplicamos inicialmente uma mudança de variável, a qual nos permite transformar nosso problema que está definido para um domínio não homogêneo em um problema equivalente mais simples. Definido este novo problema, determinamos o fluxo escalar de partículas seguindo os mesmos passos descritos na metodologia 1. A solução para o caso com espalhamento anisotrópico do problema de transporte é determinada aplicando somente a metodologia 2, visto que foi aquela com melhor desempenho. Para este problema, apresentamos especificamente a solução para os casos com espalhamento linear e quadrático.

Ao propormos diferentes metodologias para solucionar o problema de transporte com espalhamento isotrópico e anisotrópico temos, além da natural comparação com resultados obtidos na literatura, uma ferramenta adicional para validação das simulações. Embora não encontramos na literatura, até o momento, trabalhos cuja solução numérica considere a seção de choque macroscópica total variando continuamente, esse trabalho compara com sucesso resultados para funções constantes por partes, os conhecidos problemas de multirregião, e, para os casos gerais, as duas metodologias propostas aqui apresentam resultados consistentes.

O modelo de transporte que estamos considerando é para o caso unidimensional, no estado estacionário, monoenergético, com espalhamento anisotrópico e em geometria cartesiana. Definimos o problema para um domínio não homogêneo, $D = \{(x, \mu); (x, \mu) \in [0, L] \times [-1, 1]\}$, da seguinte forma,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, \mu) + \sigma_t(x) \Psi(x, \mu) = \frac{\sigma_s(x)}{2} \int_{-1}^1 \omega(x, \mu, \mu') \Psi(x, \mu') d\mu' + S(x), \quad (1.1)$$

onde $\Psi(x, \mu)$ é o fluxo angular de partículas, $0 \leq x \leq L$ é a variável espacial e μ é o cosseno do ângulo entre a direção de propagação das partículas e o eixo x . A função $S(x)$ é a fonte interna do problema, $\omega(x, \mu, \mu')$ é o núcleo de espalhamento e $\sigma_t(x)$ e $\sigma_s(x)$ representam as seções de choque macroscópica total e de espalhamento, respectivamente. Estamos considerando as seguintes condições para as seções de choque $\sigma_t(x) > \sigma_s(x)$, $\sigma_t(x) > 0$ e $\sigma_s(x) > 0$.

O núcleo de espalhamento, $\omega(x, \mu, \mu')$, é definido como

$$\omega(x, \mu, \mu') = \sum_{l=0}^M \beta_l(x) P_l(\mu) P_l(\mu'), \quad (1.2)$$

onde $P_l(\mu)$ são os polinômios de Legendre e $\beta_l(x)$ são contantes. Assumimos que β_l depende de x para que a partir da solução do problema anisotrópico seja possível resolver problemas considerando um domínio constante por partes.

Para completar a equação (1.1), foram definidas condições de contorno semi-refletivas, dadas por:

$$\Psi(0, \mu) = \rho_0(\mu) \Psi(0, -\mu) + (1 - \rho_0(\mu)) B_0(\mu), \mu > 0, \quad (1.3)$$

$$\Psi(L, \mu) = \rho_L(\mu) \Psi(L, -\mu) + (1 - \rho_L(\mu)) B_L(\mu), \mu < 0, \quad (1.4)$$

onde B_0 e B_L são as funções que representam a contribuição da fronteira, $0 \leq \rho_0 \leq 1$ e $0 \leq \rho_L \leq 1$ são os coeficientes de reflexão.

Definimos o fluxo escalar médio de partículas como sendo

$$\Phi(x) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \Psi(x, \mu') d\mu'. \quad (1.5)$$

Organizamos o trabalho da seguinte forma: no capítulo 2 descrevemos a metodologia 1 para o caso com espalhamento isotrópico, desde o cálculo da formulação integral até os detalhes da discretização e das técnicas para remoção das singularidades dos núcleos. No terceiro capítulo deste trabalho apresentamos a metodologia 2 para o caso com espalhamento isotrópico, mostrando a mudança de variável que leva o problema proposto em outro equivalente com seção de choque total constante e, assim como na metodologia 1, descrevemos todos os detalhes da discretização.

No quarto capítulo apresentamos a validação das metodologias descritas nos capítulos 2 e 3. Comparamos nossos resultados com problemas em meio homogêneo, multirregião e não homogêneo, disponíveis na literatura. Para o caso em domínio não homogêneo geral, com $\sigma_i(x)$ variando continuamente, simulamos diferentes problemas a fim de comparar os resultados das duas metodologias, visto a dificuldade de encontrar dados comparáveis na literatura.

No capítulo 5 apresentamos a solução para o problema de transporte com espalhamento anisotrópico para os casos linear e quadrático. Neste caso a solução do problema é determinada seguindo os passos da metodologia 2, os quais são detalhados no capítulo. Na sequência, capítulo 6, verificamos a eficiência da nossa metodologia, comparando nossos resultados numéricos para os casos isotrópico, linear e quadrático com dados da literatura e por fim apresentando as conclusões do nosso trabalho.

2 SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE COM ESPALHAMENTO ISOTRÓPICA EM DOMÍNIO NÃO HOMOGENEO PELO MÉTODO DE NYSTRÖM

Neste capítulo solucionamos a equação de transporte isotrópica em domínio não homogêneo com condições de contorno semi-refletivas através de uma metodologia baseada no método de Nyström, a qual denominamos como metodologia 1. Esta metodologia foi dividida em dois casos, a saber, um com parâmetros contínuos e outro com parâmetros constantes por partes, o conhecido multirregião.

Para ambos casos temos como primeiro passo a determinação da formulação integral do problema de transporte na seção 2.1. Esta formulação apresenta algumas singularidades no operador integral as quais são removidas através de técnicas analíticas. A técnica para remoção de singularidade quando o problema possui parâmetros ares contínuos está apresentada na seção 2.2 e, quando o problema possui parâmetros descontínuos, na seção 2.3. Em seguida, apresentamos para ambos os casos as discretizações dos problemas.

O problema de transporte dado em (1.1)-(1.4) tem como núcleo de espalhamento a função $\omega(x, \mu, \mu')$ dada na equação (1.2). Para determinarmos o caso com espalhamento isotrópico solucionado neste capítulo consideramos o polinômio de Legendre para $l = 0$, ou seja, $P_l(\mu) = P_l(\mu') = 1$ e $\beta_1 = 1$. Assim, o problema de transporte em domínio não homogêneo com espalhamento isotrópico é dado por

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, \mu) + \sigma_t(x) \Psi(x, \mu) = \frac{\sigma_s(x)}{2} \int_{-1}^1 \Psi(x, \mu') d\mu' + S(x), \quad (2.1)$$

o qual está sujeito as condições de contorno,

$$\Psi(0, \mu) = \rho_0(\mu) \Psi(0, -\mu) + (1 - \rho_0(\mu)) B_0(\mu), \mu > 0, \quad (2.2)$$

$$\Psi(L, \mu) = \rho_L(\mu)\Psi(L, -\mu) + (1 - \rho_L(\mu))B_L(\mu), \mu < 0. \quad (2.3)$$

2.1 Formulação integral

A formulação integral do problema de transporte, apresentado em (2.1)-(2.3), é determinada a partir do fluxo escalar médio de partículas definido na equação (1.5). Assim, considerando a equação (1.5), vamos reescrever $\Phi(x)$ como a soma do fluxo angular de partículas para $\mu > 0$ e para $\mu < 0$, ou seja,

$$\Phi(x) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \Psi(x, \mu) d\mu = \frac{1}{2} \int_0^1 [\Psi(x, -\mu) + \Psi(x, \mu)] d\mu, \quad (2.4)$$

onde as funções $\Psi(x, -\mu)$ e $\Psi(x, \mu)$ são soluções do problema dado em (2.1)-(2.3).

Por simplicidade, reescrevemos a equação de transporte definida em (2.1) da seguinte da forma

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, \mu) + \sigma_t(x) \Psi(x, \mu) = Q(x), \quad (2.5)$$

onde a função $Q(x)$ é dada por

$$Q(x) = \sigma_s(x) \Phi(x) + S(x). \quad (2.6)$$

Dividindo a equação (2.5) por μ obtemos a equação diferencial

$$\frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, \mu) + \frac{\sigma_t(x)}{\mu} \Psi(x, \mu) = \frac{Q(x)}{\mu}, \quad (2.7)$$

cuja solução é determinada aplicando o método do fator integrante. Assim, usando o fator multiplicativo $e^{\frac{1}{\mu} \int_0^x \sigma_t(k) dk}$, podemos reescrever a equação (2.7) como sendo

$$\frac{\partial}{\partial x} \left(\Psi(x, \mu) e^{\frac{1}{\mu} \int_0^x \sigma_t(k) dk} \right) = \frac{1}{\mu} e^{\frac{1}{\mu} \int_0^x \sigma_t(k) dk} Q(x), \quad (2.8)$$

a qual integramos nos intervalos $(0, x)$ e (x, L) .

Para o intervalo $(0, x)$ a integral da equação (2.8) é escrita como

$$\int_0^x \left(\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\Psi(\tau, \mu) e^{\frac{1}{\mu} \int_0^\tau \sigma_t(k) dk} \right) \right) d\tau = \int_0^x \left(\frac{1}{\mu} e^{\frac{1}{\mu} \int_0^\tau \sigma_t(k) dk} Q(\tau) \right) d\tau, \quad (2.9)$$

cuja solução para o fluxo angular de partículas é dada por

$$\Psi(x, \mu) = \Psi(0, \mu)e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^x \sigma_t(k)dk} + \frac{1}{\mu} \int_0^x e^{-\frac{1}{\mu} \int_\tau^x \sigma_t(k)dk} Q(\tau) d\tau. \quad (2.10)$$

A integral da equação (2.8) no intervalo (x, L) é dada por

$$\int_x^L \left(\frac{\partial}{\partial \tau} \left(\Psi(\tau, \mu) e^{\frac{1}{\mu} \int_0^\tau \sigma_t(k)dk} \right) \right) d\tau = \int_x^L \left(\frac{1}{\mu} e^{\frac{1}{\mu} \int_0^\tau \sigma_t(k)dk} Q(\tau) \right) d\tau, \quad (2.11)$$

a qual tem como solução

$$\Psi(x, \mu) = \Psi(L, \mu) e^{\frac{1}{\mu} \int_x^L \sigma_t(k)dk} - \frac{1}{\mu} \int_x^L e^{-\frac{1}{\mu} \int_\tau^x \sigma_t(k)dk} Q(\tau) d\tau. \quad (2.12)$$

Ambas soluções, $\Psi(x, \mu)$ e $\Psi(x, -\mu)$, são válidas para $\mu > 0$ e $\mu < 0$.

Logo, vamos considerar a equação (2.10) para valores de μ maiores que zero e equação (2.12) para valores μ menores que zero.

Considerando o fluxo angular em $x = L$ na equação (2.10) e trocando μ por $-\mu$ obtemos

$$\Psi(L, -\mu) = \Psi(0, -\mu) e^{\frac{1}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k)dk} - \frac{1}{\mu} \int_0^L e^{\frac{1}{\mu} \int_\tau^L \sigma_t(k)dk} Q(\tau) d\tau. \quad (2.13)$$

Tomando agora $x = 0$ na equação (2.12) e trocando μ por $-\mu$ temos

$$\Psi(0, -\mu) = \Psi(L, -\mu) e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k)dk} + \frac{1}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^\tau \sigma_t(k)dk} Q(\tau) d\tau. \quad (2.14)$$

Substituindo as equações (2.13) e (2.14) nas condições de contorno dadas em (2.3) e (2.2), respectivamente, obtemos

$$\begin{aligned} \Psi(0, \mu) - \rho_0(\mu) \Psi(L, -\mu) e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k)dk} &= \frac{\rho_0(\mu)}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^\tau \sigma_t(k)dk} Q(\tau) d\tau \\ &+ (1 - \rho_0(\mu)) B_0(\mu), \mu > 0 \end{aligned} \quad (2.15)$$

e

$$\begin{aligned} \Psi(L, -\mu) - \rho_L(-\mu) \Psi(0, \mu) e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k)dk} &= \frac{\rho_L(-\mu)}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu} \int_\tau^L \sigma_t(k)dk} Q(\tau) d\tau \\ &+ (1 - \rho_L(-\mu)) B_L(-\mu), \mu < 0. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Note que nesta última equação trocamos o sinal da varável μ .

Das equações (2.15) e (2.16) podemos determinar $\Psi(0, \mu)$ e $\Psi(L, -\mu)$ como solução do seguinte sistema:

$$\begin{bmatrix} 1 & -\rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}\int_0^L\sigma_t(k)dk} \\ -\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}\int_0^L\sigma_t(k)dk} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi(0, \mu) \\ \Psi(L, -\mu) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{\rho_0(\mu)}{\mu}\int_0^Le^{-\frac{1}{\mu}\int_0^\tau\sigma_t(k)dk}Q(\tau)d\tau + (1-\rho_0(\mu))B_0(\mu) \\ \frac{\rho_L(-\mu)}{\mu}\int_0^Le^{-\frac{1}{\mu}\int_\tau^L\sigma_t(k)dk}Q(\tau)d\tau + (1-\rho_L(-\mu))B_L(-\mu) \end{bmatrix}. \quad (2.17)$$

O sistema dado em (2.17) tem solução única se o determinante da matriz principal for diferente de zero, ou seja,

$$1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu}\int_0^L\sigma_t(k)dk} \neq 0. \quad (2.18)$$

Lembramos do Capítulo 1, onde a seção de choque total, a seção de choque de espalhamento e os coeficientes de reflexão do problema foram definidos com as seguintes restrições: $0 \leq \rho_0(\mu), \rho_L(\mu) \leq 1$ e $\sigma_t(k) > 0$. Assim, temos que

$$1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu}\int_0^L\sigma_t(k)dk} \geq 1 - e^{-\frac{2}{\mu}\int_0^L\sigma_t(k)dk} > 0. \quad (2.19)$$

A partir do resultado dado em (2.19) garantimos que o sistema (2.17) possui solução única e pode ser reescrito como

$$\begin{bmatrix} \Psi(0, \mu) \\ \Psi(L, -\mu) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{1}{1-\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu}\int_0^L\sigma_t(k)dk}} & \frac{\rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}\int_0^L\sigma_t(k)dk}}{1-\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu}\int_0^L\sigma_t(k)dk}} \\ \frac{\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}\int_0^L\sigma_t(k)dk}}{1-\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu}\int_0^L\sigma_t(k)dk}} & \frac{1}{1-\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu}\int_0^L\sigma_t(k)dk}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{\rho_0(\mu)}{\mu}\int_0^Le^{-\frac{1}{\mu}\int_0^\tau\sigma_t(k)dk}Q(\tau)d\tau + (1-\rho_0(\mu))B_0(\mu) \\ \frac{\rho_L(-\mu)}{\mu}\int_0^Le^{-\frac{1}{\mu}\int_\tau^L\sigma_t(k)dk}Q(\tau)d\tau + (1-\rho_L(-\mu))B_L(-\mu) \end{bmatrix}. \quad (2.20)$$

Assim, determinamos os fluxos angulares $\Psi(0, \mu)$ e $\Psi(L, -\mu)$ dados por

$$\begin{aligned} \Psi(0, \mu) = & \frac{\frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)}{\mu} e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu} \int_\tau^L \sigma_t(k) dk} Q(\tau) d\tau + (1 - \rho_0(\mu)) B_0(\mu)}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu) e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk}} \\ & + \frac{\frac{\rho_0(\mu)}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^\tau \sigma_t(k) dk} Q(\tau) d\tau + (1 - \rho_L(-\mu)) B_L(-\mu) \rho_0(\mu) e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk}}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu) e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk}} \end{aligned} \quad (2.21)$$

e

$$\begin{aligned} \Psi(L, -\mu) = & \frac{\frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)}{\mu} e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^\tau \sigma_t(k) dk} Q(\tau) d\tau + (1 - \rho_L(-\mu)) B_L(-\mu)}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu) e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk}} \\ & + \frac{\frac{\rho_L(-\mu)}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu} \int_\tau^L \sigma_t(k) dk} Q(\tau) d\tau + (1 - \rho_0(\mu)) B_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk}}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu) e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk}}. \end{aligned}$$

Substituindo o fluxo $\Psi(0, \mu)$ dado na equação (2.21) em (2.10) obtemos

$$\begin{aligned} \Psi(x, \mu) = & \frac{e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^x \sigma_t(k) dk}}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu) e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk}} \left[\frac{\rho_0(\mu)}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^\tau \sigma_t(k) dk} Q(\tau) d\tau \right. \\ & + \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)}{\mu} e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu} \int_\tau^L \sigma_t(k) dk} Q(\tau) d\tau + (1 - \rho_0(\mu)) B_0(\mu) \\ & \left. + (1 - \rho_L(-\mu)) B_L(-\mu) \rho_0(\mu) e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk} \right] + \frac{1}{\mu} \int_0^x e^{-\frac{1}{\mu} \int_\tau^x \sigma_t(k) dk} Q(\tau) d\tau \quad (2.22) \end{aligned}$$

e substituindo (2.22) na equação (2.12) após trocar μ por $-\mu$ em (2.12) obtemos

$$\begin{aligned} \Psi(x, -\mu) = & \frac{e^{-\frac{1}{\mu} \int_x^L \sigma_t(k) dk}}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu) e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk}} \left[\frac{\rho_L(-\mu)}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu} \int_\tau^L \sigma_t(k) dk} Q(\tau) d\tau \right. \\ & + \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)}{\mu} e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^\tau \sigma_t(k) dk} Q(\tau) d\tau + (1 - \rho_L(-\mu)) B_L(-\mu) \\ & \left. + (1 - \rho_0(\mu)) B_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk} \right] + \frac{1}{\mu} \int_x^L e^{-\frac{1}{\mu} \int_x^\tau \sigma_t(k) dk} Q(\tau) d\tau. \quad (2.23) \end{aligned}$$

Definidas as funções $\Psi(x, -\mu)$ e $\Psi(x, \mu)$, podemos determinar o fluxo escalar de partículas a partir da equação (2.4). Portanto $\Phi(x)$ pode ser escrito como

$$\begin{aligned}
\Phi(x) = & \int_0^1 \int_0^L \left[\frac{\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(\int_x^L \sigma_t(k)dk + \int_\tau^L \sigma_t(k)dk)} + \rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(\int_0^\tau \sigma_t(k)dk + \int_0^x \sigma_t(k)dk)}}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k)dk}\right)} \right. \\
& \left. + \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k)dk} \left(e^{-\frac{1}{\mu} \int_x^\tau \sigma_t(k)dk} + e^{-\frac{1}{\mu} \int_\tau^x \sigma_t(k)dk} \right)}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k)dk}\right)} \right] Q(\tau) d\tau d\mu \\
& + \int_0^1 \left[\frac{e^{-\frac{1}{\mu} \int_x^L \sigma_t(k)dk} \left((1 - \rho_L(-\mu))B_L(-\mu) + e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k)dk} (1 - \rho_0(\mu))B_0(\mu)\rho_L(-\mu) \right)}{2 \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k)dk}\right)} \right. \\
& \left. + \frac{e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^x \sigma_t(k)dk} \left((1 - \rho_0(\mu))B_0(\mu) + e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k)dk} (1 - \rho_L(-\mu))B_L(-\mu)\rho_0(\mu) \right)}{2 \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k)dk}\right)} \right] d\mu \\
& + \int_0^1 \int_0^L \frac{e^{-\frac{1}{\mu} |\int_x^\tau \sigma_t(k)dk|}}{2\mu} d\mu d\tau.
\end{aligned} \tag{2.24}$$

A equação para o fluxo escalar dada em (2.24) pode ser reescrita como a soma dos operadores L_g e L_b , ou seja,

$$\Phi(x) = (L_g Q)(x) + (L_b B)(x), \tag{2.25}$$

onde a função $L_g Q(x)$ é dada por

$$L_g Q(x) = \int_0^L k(x, \tau) Q(\tau) d\tau, \tag{2.26}$$

cujos núcleo $k(x, \tau)$ é escrito da forma:

$$\begin{aligned}
k(x, \tau) = & \int_0^1 \left[\frac{\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(\int_x^L \sigma_t(k)dk + \int_\tau^L \sigma_t(k)dk)} + \rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(\int_0^\tau \sigma_t(k)dk + \int_0^x \sigma_t(k)dk)}}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k)dk}\right)} \right. \\
& \left. + \frac{e^{-\frac{1}{\mu} |\int_x^\tau \sigma_t(k)dk|}}{2\mu} + \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k)dk} \left(e^{-\frac{1}{\mu} \int_x^\tau \sigma_t(k)dk} + e^{-\frac{1}{\mu} \int_\tau^x \sigma_t(k)dk} \right)}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k)dk}\right)} \right] d\mu.
\end{aligned} \tag{2.27}$$

A função $L_b B(x)$ é dada por

$$\begin{aligned}
L_b B(x) = & \int_0^1 \left[\frac{e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^x \sigma_t(k) dk} (1 - \rho_0(\mu)) B_0(\mu) + e^{-\frac{1}{\mu} \int_x^L \sigma_t(k) dk} (1 - \rho_L(-\mu)) B_L(-\mu)}{2 \left(1 - \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk} \right)} \right. \\
& + \frac{e^{-\frac{1}{\mu} (2 \int_0^L \sigma_t(k) dk - \int_0^x \sigma_t(k) dk)} (1 - \rho_0(\mu)) B_0(\mu) \rho_L(-\mu)}{2 \left(1 - \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk} \right)} \\
& \left. + \frac{e^{-\frac{1}{\mu} (\int_0^x \sigma_t(k) dk + \int_0^L \sigma_t(k) dk)} (1 - \rho_L(-\mu)) B_L(-\mu) \rho_0(\mu)}{2 \left(1 - \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk} \right)} \right] d\mu. \quad (2.28)
\end{aligned}$$

Definimos inicialmente a função $Q(x)$ como dado na equação (2.6). Vamos agora substituir esta definição em (2.25) para obter

$$\begin{aligned}
\Phi(x) &= L_g(\sigma_s(x)\Phi(x) + S(x)) + L_b B(x) \\
&= L_g(\sigma_s(x)\Phi(x)) + L_g S(x) + L_b B(x). \quad (2.29)
\end{aligned}$$

Podemos também reescrever essa equação como

$$\Phi(x) = \int_0^L \sigma_s(\tau) k(x, \tau) \Phi(\tau) d\tau + g(x), \quad (2.30)$$

onde $g(x) = L_g S(x) + L_b B(x)$.

2.2 Parâmetros contínuos

Nesta seção, trataremos o caso onde $\sigma_t(x)$ e $\sigma_s(x)$ são funções contínuas.

2.2.1 Tratamento da singularidade

Ao determinarmos a formulação integral do problema de transporte com domínio não homogêneo, dada pela equação (2.30), encontramos como núcleo do operador integral uma função $k(x, \mu)$, apresentada na equação (2.27). Esta função possui uma singularidade na diagonal. Assim, quando $\tau = x$ temos que o terceiro

termo da função (2.27) será dado por $1/2\mu$ tornando esta função singular quando μ assumir o valor de zero. Em virtude disso não podemos aplicar o método de Nyström diretamente na equação (2.29).

Para lidar com a singularidade em $\tau = x$ vamos aplicar a técnica de subtração de singularidades na função $L_g(\sigma_s(x)\Phi(x))$ e assim o núcleo da integral (2.30) pode ser escrito como

$$k(x, \tau)\Phi(\tau)\sigma_s(\tau) = k(x, \tau)[\Phi(\tau)\sigma_s(\tau) - \Phi(x)\sigma_s(x)] + k(x, \tau)\Phi(x)\sigma_s(x). \quad (2.31)$$

Ao substituirmos (2.31) na equação (2.30) temos que o fluxo escalar assume a seguinte forma:

$$\Phi(x) = \int_0^L k(x, \tau)[\Phi(\tau)\sigma_s(\tau) - \Phi(x)\sigma_s(x)]d\tau + \Phi(x)\sigma_s(x)R(x) + g(x), \quad (2.32)$$

onde $R(x) = \int_0^L k(x, \tau)d\tau$, ou ainda

$$R(x) = \int_0^L \int_0^1 \left[\frac{\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(\int_x^L \sigma_t(k)dk + \int_\tau^L \sigma_t(k)dk)} + \rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(\int_0^\tau \sigma_t(k)dk + \int_0^x \sigma_t(k)dk)}}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k)dk}\right)} + \frac{e^{-\frac{1}{\mu}|\int_x^\tau \sigma_t(k)dk|}}{2\mu} + \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k)dk} \left(e^{-\frac{1}{\mu} \int_x^\tau \sigma_t(k)dk} + e^{-\frac{1}{\mu} \int_\tau^x \sigma_t(k)dk} \right)}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k)dk}\right)} \right] d\mu d\tau. \quad (2.33)$$

A função $R(x)$ dada na equação (2.33) é representada pela integral dupla, nas variáveis τ e μ , da função $k(x, \tau)$. Como mencionado anteriormente, o algoritmo utilizado na solução do problema de transporte não homogêneo foi implementado em linguagem de programação C. Este programa disponibiliza rotinas de integração que removem as singularidades do problema e também é possível realizar a integração dupla. No entanto, devido a complexidade da função $R(x)$ não obtivemos bons resultados ao implementar esta função diretamente no programa. Assim, foi necessário integrar analiticamente a função $R(x)$ com respeito a variável τ . A integral na variável μ é solucionada utilizando as rotinas de integração numérica da GNU Scientific Library (GSL) [21].

2.2.2 Tratamento analítico da parte singular

Nós observamos que o núcleo da equação (2.33) apresenta uma singularidade na diagonal $\tau = x$. Assim, temos o interesse de integrar analiticamente a equação com respeito a τ para remover as imprecisões da integração numérica. Com esse propósito, trocamos a ordem de integração para obter a seguinte representação para $R(x)$:

$$R(x) = \int_0^1 \int_0^L \left[\frac{\rho_L(-\mu) e^{-\frac{1}{\mu} (\int_x^L \sigma_t(k) dk + \int_\tau^L \sigma_t(k) dk)} + \rho_0(\mu) e^{-\frac{1}{\mu} (\int_0^\tau \sigma_t(k) dk + \int_0^x \sigma_t(k) dk)}}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk} \right)} + \frac{e^{-\frac{1}{\mu} |\int_x^\tau \sigma_t(k) dk|} + \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk} \left(e^{-\frac{1}{\mu} \int_x^\tau \sigma_t(k) dk} + e^{-\frac{1}{\mu} \int_\tau^x \sigma_t(k) dk} \right)}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk} \right)} \right] d\tau d\mu. \quad (2.34)$$

A integral com respeito a variável τ da função $k(x, \tau)$ que solucionaremos analiticamente é dada por

$$R_\tau(x) = \int_0^L \left[\frac{\rho_L(-\mu) e^{-\frac{1}{\mu} (\int_x^L \sigma_t(k) dk + \int_\tau^L \sigma_t(k) dk)} + \rho_0(\mu) e^{-\frac{1}{\mu} (\int_0^\tau \sigma_t(k) dk + \int_0^x \sigma_t(k) dk)}}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk} \right)} + \frac{e^{-\frac{1}{\mu} |\int_x^\tau \sigma_t(k) dk|} + \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk} \left(e^{-\frac{1}{\mu} \int_x^\tau \sigma_t(k) dk} + e^{-\frac{1}{\mu} \int_\tau^x \sigma_t(k) dk} \right)}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk} \right)} \right] d\tau. \quad (2.35)$$

Para facilitar a descrição das integrais, escrevemos:

$$R_\tau(x) = R_1(x) + R_2(x) + R_3(x) + R_4(x) + R_5(x), \quad (2.36)$$

onde

$$R_1(x) = \frac{\rho_L(-\mu) e^{-\frac{1}{\mu} (-\int_0^x \sigma_t(k) dk + 2 \int_0^L \sigma_t(k) dk)}}{2 \left(1 - \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk} \right)} \int_0^L \frac{e^{\frac{1}{\mu} \int_0^\tau \sigma_t(k) dk}}{\mu} d\tau, \quad (2.37)$$

$$R_2(x) = \frac{\rho_0(\mu) e^{-\frac{1}{\mu} (\int_0^x \sigma_t(k) dk)}}{2 \left(1 - \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk} \right)} \int_0^L \frac{e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^\tau \sigma_t(k) dk}}{\mu} d\tau, \quad (2.38)$$

$$R_3(x) = \int_0^L \frac{e^{-\frac{1}{\mu} |\int_x^\tau \sigma_t(k) dk|}}{2\mu} d\tau, \quad (2.39)$$

$$R_4(x) = \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2\int_0^L \sigma_t(k) dk - \int_0^x \sigma_t(k) dk)}}{2\left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu}\int_0^L \sigma_t(k) dk}\right)} \int_0^L \frac{e^{-\frac{1}{\mu}\int_0^\tau \sigma_t(k) dk}}{\mu} d\tau, \quad (2.40)$$

e

$$R_5(x) = \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2\int_0^L \sigma_t(k) dk + \int_0^x \sigma_t(k) dk)}}{2\left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu}\int_0^L \sigma_t(k) dk}\right)} \int_0^L \frac{e^{\frac{1}{\mu}\int_0^\tau \sigma_t(k) dk}}{\mu} d\tau. \quad (2.41)$$

Para determinar a solução da integral da função $R_1(x)$ multiplicamos seu integrando por $\frac{\sigma_t(\tau)}{\mu} \frac{\mu}{\sigma_t(\tau)}$ e assim obtemos

$$\int_0^L \frac{e^{\frac{1}{\mu}\int_0^\tau \sigma_t(k) dk}}{\mu} d\tau = \int_0^L \frac{e^{\frac{1}{\mu}\int_0^\tau \sigma_t(k) dk}}{\mu} \frac{\sigma_t(\tau)}{\mu} \frac{\mu}{\sigma_t(\tau)} d\tau, \quad (2.42)$$

cujas solução é obtida fazendo integração por partes, ou seja, $\int u dv = uv - \int v du$ onde

$$u = \frac{\mu}{\sigma_t(\tau)}, \quad du = -\frac{\mu\sigma_t'(\tau)}{\sigma_t^2(\tau)},$$

$$dv = \frac{e^{\frac{1}{\mu}\int_0^\tau \sigma_t(k) dk}}{\mu^2} \sigma_t(\tau) \quad \text{e} \quad v = \frac{e^{\frac{1}{\mu}\int_0^\tau \sigma_t(k) dk}}{\mu}. \quad (2.43)$$

Utilizando (2.43) podemos reescrever a integral (2.42) como

$$\int_0^L \frac{e^{\frac{1}{\mu}\int_0^\tau \sigma_t(k) dk}}{\mu} \frac{\sigma_t(\tau)}{\mu} \frac{\mu}{\sigma_t(\tau)} d\tau = \frac{e^{\frac{1}{\mu}\int_0^L \sigma_t(k) dk}}{\sigma_t(L)} - \frac{1}{\sigma_t(0)} + \int_0^L \frac{e^{\frac{1}{\mu}\int_0^\tau \sigma_t(k) dk}}{\sigma_t^2(\tau)} \sigma_t'(\tau) d\tau, \quad (2.44)$$

a qual apresenta a seguinte solução,

$$R_1(x) = \frac{\rho_L(-\mu)e^{\frac{1}{\mu}\int_0^x \sigma_t(k) dk}}{2\left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu}\int_0^L \sigma_t(k) dk}\right)} \left[\frac{e^{-\frac{1}{\mu}\int_0^L \sigma_t(k) dk}}{\sigma_t(L)} - \frac{e^{-\frac{2}{\mu}\int_0^L \sigma_t(k) dk}}{\sigma_t(0)} \right]$$

$$+ \frac{\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(-\int_0^x \sigma_t(k) dk + 2\int_0^L \sigma_t(k) dk)}}{2\left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu}\int_0^L \sigma_t(k) dk}\right)} \int_0^L \frac{e^{\frac{1}{\mu}\int_0^\tau \sigma_t(k) dk}}{\sigma_t^2(\tau)} \sigma_t'(\tau) d\tau. \quad (2.45)$$

O segundo termo da integral (2.35) é dado por

$$R_2(x) = \frac{\rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(\int_0^x \sigma_t(k) dk)}}{2\left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu}\int_0^L \sigma_t(k) dk}\right)} \int_0^L \frac{e^{-\frac{1}{\mu}\int_0^\tau \sigma_t(k) dk}}{\mu} d\tau. \quad (2.46)$$

Para solucionarmos o termo integral da equação (2.46) vamos utilizar a mesma estratégia aplicada na equação $R_1(x)$. Assim, reescrevemos o termo integral da equação (2.46) como

$$\int_0^L \frac{e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^\tau \sigma_t(k) dk} \sigma_t(\tau)}{\mu^2} \frac{\mu}{\sigma_t(\tau)} d\tau, \quad (2.47)$$

no qual aplicamos integração por partes com

$$\begin{aligned} u &= \frac{\mu}{\sigma_t(\tau)}, & du &= -\frac{\mu \sigma_t'(\tau)}{\sigma_t^2(\tau)}, \\ dv &= \frac{e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^\tau \sigma_t(k) dk} \sigma_t(\tau)}{\mu^2} & e \quad v &= \frac{-e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^\tau \sigma_t(k) dk}}{\mu}. \end{aligned} \quad (2.48)$$

Utilizando (2.48) reescrevemos a equação (2.47) como

$$\int_0^L \frac{e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^\tau \sigma_t(k) dk} \sigma_t(\tau) \mu}{\mu^2 \sigma_t(\tau)} d\tau = \frac{-e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk}}{\sigma_t(L)} + \frac{1}{\sigma_t(0)} - \int_0^L \frac{e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^\tau \sigma_t(k) dk} \sigma_t'(\tau)}{\sigma_t^2(\tau)} d\tau, \quad (2.49)$$

cujas soluções é dada por,

$$\begin{aligned} R_2(x) &= \frac{\rho_0(\mu) e^{-\frac{1}{\mu} \left(\int_0^x \sigma_t(k) dk \right)}}{2 \left(1 - \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk} \right)} \left[\frac{-e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk}}{\sigma_t(L)} + \frac{1}{\sigma_t(0)} \right] \\ &+ \frac{\rho_0(\mu) e^{-\frac{1}{\mu} \left(\int_0^x \sigma_t(k) dk \right)}}{2 \left(1 - \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk} \right)} \int_0^L \frac{e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^\tau \sigma_t(k) dk} \sigma_t'(\tau)}{\sigma_t^2(\tau)} d\tau. \end{aligned} \quad (2.50)$$

De forma análoga determinamos a solução para as funções $R_4(x)$ e $R_5(x)$, as quais são dadas por

$$\begin{aligned} R_4(x) &= \frac{\rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{\frac{1}{\mu} \int_0^x \sigma_t(k) dk}}{2 \left(1 - \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk} \right)} \left[\frac{-e^{-\frac{3}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk}}{\sigma_t(L)} + \frac{e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk}}{\sigma_t(0)} \right] \\ &- \frac{\rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{1}{\mu} \left(2 \int_0^L \sigma_t(k) dk - \int_0^x \sigma_t(k) dk \right)}}{2 \left(1 - \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk} \right)} \int_0^L \frac{e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^\tau \sigma_t(k) dk} \sigma_t'(\tau)}{\sigma_t^2(\tau)} d\tau \end{aligned} \quad (2.51)$$

e

$$R_5(x) = \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}\int_0^x\sigma_t(k)dk}}{2\left(1-\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu}\int_0^L\sigma_t(k)dk}\right)}\left[\frac{e^{-\frac{1}{\mu}\int_0^L\sigma_t(k)dk}}{\sigma_t(L)}-\frac{e^{-\frac{2}{\mu}\int_0^L\sigma_t(k)dk}}{\sigma_t(0)}\right]$$

$$+\frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}\left(2\int_0^L\sigma_t(k)dk+\int_0^x\sigma_t(k)dk\right)}}{2\left(1-\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu}\int_0^L\sigma_t(k)dk}\right)}\int_0^L\frac{e^{\frac{1}{\mu}\int_0^\tau\sigma_t(k)dk}\sigma_t'(\tau)}{\sigma_t^2(\tau)}d\tau. \quad (2.52)$$

Para determinarmos a soluo da funo $R_3(x)$ reescrevemos a mesma como a soma de duas integrais,

$$R_3(x) = R_{31}(x) + R_{32}(x), \quad (2.53)$$

onde,

$$R_{31}(x) = \int_0^x \frac{e^{-\frac{1}{\mu}\left(\int_0^x\sigma_t(k)dk-\int_0^\tau\sigma_t(k)dk\right)}}{2\mu}d\tau \quad (2.54)$$

e

$$R_{32}(x) = \int_x^L \frac{e^{-\frac{1}{\mu}\left(\int_0^\tau\sigma_t(k)dk-\int_0^x\sigma_t(k)dk\right)}}{2\mu}d\tau. \quad (2.55)$$

Vamos iniciar resolvendo a integral da equao (2.54). Esta equao pode ser reescrita como

$$R_{31}(x) = \int_0^x \frac{1}{2\mu}e^{-\frac{1}{\mu}\left(-\int_0^\tau\sigma_t(k)dk+\int_0^x\sigma_t(k)dk\right)}d\tau$$

$$= \frac{e^{-\frac{1}{\mu}\int_0^x\sigma_t(k)dk}}{2} \int_0^x \frac{e^{\frac{1}{\mu}\int_0^\tau\sigma_t(k)dk}}{\mu} \frac{\sigma_t(\tau)/\mu}{\sigma_t(\tau)/\mu}d\tau. \quad (2.56)$$

Resolvemos o termo integral da equao (2.56) usando integrao por partes, onde os termos da integrao so dados em (2.43). Assim, aplicando essa tcnica temos que a soluo da integral $R_{31}(x)$  dada por

$$R_{31} = \frac{1}{2\sigma_t(L)} - \frac{e^{-\frac{1}{\mu}\int_0^x\sigma_t(k)dk}}{2\sigma_t(0)} + \frac{e^{-\frac{1}{\mu}\int_0^x\sigma_t(k)dk}}{2} \int_0^x \frac{e^{\frac{1}{\mu}\int_0^s\sigma_t(k)dk}\sigma_t'(\tau)}{[\sigma_t(\tau)]^2}d\tau. \quad (2.57)$$

Solucionando a integral da equação (2.55) temos

$$\begin{aligned}
R_{32}(x) &= \frac{e^{\frac{1}{\mu} \int_0^x \sigma_t(k) dk}}{2} \int_x^L \frac{1}{\mu} e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^\tau \sigma_t(k) dk} d\tau \\
&= \frac{1}{2\sigma_t(x)} - \frac{e^{\frac{1}{\mu} (\int_0^x \sigma_t(k) dk - \int_0^L \sigma_t(k) dk)}}{2\sigma_t(L)} - \int_x^L \frac{e^{-\frac{1}{\mu} (\int_0^\tau \sigma_t(k) dk - \int_0^x \sigma_t(k) dk)} \sigma_t'(\tau)}{2[\sigma_t(\tau)]^2} d\tau,
\end{aligned} \tag{2.58}$$

na solução desta integral também aplicamos integração por partes cujos termos são dados em (2.48).

Assim, temos que a solução do termo $R_3(x)$ é dada por

$$\begin{aligned}
R_3(x) &= \frac{1}{\sigma_t(x)} - \frac{e^{\frac{1}{\mu} (\int_0^x \sigma_t(k) dk - \int_0^L \sigma_t(k) dk)}}{2\sigma_t(L)} - \frac{e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^x \sigma_t(k) dk}}{2\sigma_t(0)} \\
&+ \frac{e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^x \sigma_t(k) dk}}{2} \int_0^x \frac{e^{\frac{1}{\mu} \int_0^\tau \sigma_t(k) dk} \sigma_t'(\tau)}{[\sigma_t(\tau)]^2} d\tau - \frac{e^{\frac{1}{\mu} \int_0^x \sigma_t(k) dk}}{2} \int_x^L \frac{e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^\tau \sigma_t(k) dk} \sigma_t'(\tau)}{[\sigma_t(\tau)]^2} d\tau.
\end{aligned} \tag{2.59}$$

Portanto, a função $R(x)$ integrada com respeito a variável τ tem como solução

$$\begin{aligned}
R(x) &= \int_0^1 \left\{ \frac{1}{\sigma_t(x)} - \frac{e^{\frac{1}{\mu} (\int_0^x \sigma_t(k) dk - \int_0^L \sigma_t(k) dk)}}{2\sigma_t(L)} - \frac{e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^x \sigma_t(k) dk}}{2\sigma_t(0)} \right. \\
&+ \frac{1}{2(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk})} \left[\rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu} (\int_0^x \sigma_t(k) dk)} \left(\frac{-e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk}}{\sigma_t(L)} + \frac{1}{\sigma_t(0)} \right) \right. \\
&+ \rho_L(-\mu)e^{\frac{1}{\mu} \int_0^x \sigma_t(k) dk} \left(\frac{e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk}}{\sigma_t(L)} - \frac{e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk}}{\sigma_t(0)} \right) \\
&+ \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{\frac{1}{\mu} \int_0^x \sigma_t(k) dk} \left(\frac{-e^{-\frac{3}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk}}{\sigma_t(L)} + \frac{e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk}}{\sigma_t(0)} \right) \\
&+ \left. \left. \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^x \sigma_t(k) dk} \left(\frac{e^{-\frac{1}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk}}{\sigma_t(L)} - \frac{e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk}}{\sigma_t(0)} \right) \right] \right\} d\mu \\
&+ \int_0^1 \int_0^L \left\{ \frac{1}{2(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_t(k) dk})} \left[-\frac{\rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu} (\int_0^x \sigma_t(k) dk + \int_0^\tau \sigma_t(k) dk)} \sigma_t'(\tau)}{\sigma_t^2(\tau)} \right. \right.
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(-\int_0^x \sigma_t(k)dk + 2\int_0^L \sigma_t(k)dk - \int_0^\tau \sigma_t(k)dk)}\sigma_t'(\tau)}{\sigma_t^2(\tau)} \\
& - \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2\int_0^L \sigma_t(k)dk - \int_0^x \sigma_t(k)dk + \int_0^\tau \sigma_t(k)dk)}\sigma_t'(\tau)}{\sigma_t^2(\tau)} \\
& + \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2\int_0^L \sigma_t(k)dk + \int_0^x \sigma_t(k)dk - \int_0^\tau \sigma_t(k)dk)}\sigma_t'(\tau)}{\sigma_t^2(\tau)} \Big] d\tau \\
& + \frac{e^{-\frac{1}{\mu}\int_0^x \sigma_t(k)dk}}{2} \int_0^x \frac{e^{\frac{1}{\mu}\int_0^\tau \sigma_t(k)dk}\sigma_t'(\tau)}{[\sigma_t(\tau)]^2} d\tau \\
& - \frac{e^{\frac{1}{\mu}\int_0^x \sigma_t(k)dk}}{2} \int_x^L \frac{e^{-\frac{1}{\mu}\int_0^\tau \sigma_t(k)dk}\sigma_t'(\tau)}{[\sigma_t(\tau)]^2} d\tau \Big\} d\mu. \tag{2.60}
\end{aligned}$$

Como podemos observar na equação (2.60), em alguns termos da função $R(x)$ ainda temos integração dupla. No entanto, como removemos a variável μ do denominador dos integrandos é possível obter bons resultados numéricos com a implementação das mesmas.

2.2.3 Método de Nyström

O método de Nyström foi criado por Evert Johannes Nyström em 1930 [33] e consiste na aproximação baseada na integração numérica do operador integral [1]. Assim, a partir da escolha de um esquema de quadratura podemos aproximar o operador integral da seguinte forma:

$$\int_a^b y(s)ds = \sum_{j=1}^N w_j y(s_j), \tag{2.61}$$

onde o conjunto $\{w(s_j)\}$ que são os pesos do esquema de quadratura enquanto os N pontos $\{s_j\}$ são as abscissas [34]. Nesta seção aplicaremos esta metodologia na forma integral da equação de transporte em domínio não homogêneo obtida na seção anterior.

Aplicando o método de Nyström na equação (2.32) obtemos a aproximação da equação integral do transporte dada por

$$\Phi(x) \approx \sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq x}}^N w(\tau_j) k(x, \tau_j) [\Phi(\tau_j) \sigma_s(\tau_j) - \Phi(x) \sigma_s(x)] + \Phi(x) \sigma_s(x) R(x) + g(x). \quad (2.62)$$

2.2.4 Cálculo do fluxo escalar na malha

Para determinarmos o fluxo escalar de partículas em cada ponto i da malha, com $i = 1, \dots, N$, vamos avaliar a equação (2.62) nos pontos da quadratura e assim obtemos

$$\Phi(x_i) \approx \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N w(\tau_j) k(x_i, \tau_j) [\Phi(\tau_j) \sigma_s(\tau_j) - \Phi(x_i) \sigma_s(x_i)] + \Phi(x_i) \sigma_s(x) R(x_i) + g(x_i). \quad (2.63)$$

Para simplificar a notação reescrevemos a equação anterior considerando os vetores $\Phi(x_i)$, $g(x_i)$ e $R(x_i)$, como sendo Φ_i , g_i e R_i , a matriz $k(x_i, \tau_j)$ definida por $k_{i,j}$, a função $\sigma_s(x_i) = \sigma_{si}$ e os pesos da quadratura $w(\tau_j) = w_j$. Assim, temos que

$$\Phi_i \approx \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N w_j k_{ij} [\Phi_j \sigma_{sj} - \Phi_i \sigma_{si}] + \Phi_i \sigma_{si} R_i + g_i, \quad i = 1, \dots, N. \quad (2.64)$$

A partir da equação (2.64) podemos escrever seguinte sistema para o fluxo escalar,

$$\begin{bmatrix} (1 - \sigma_{s1} R_1 + \sigma_{s1} c_1) & -\sigma_{s2} w_2 k_{12} & \cdots & -\sigma_{sN} w_N k_{1N} \\ -\sigma_{s1} w_1 k_{21} & (1 - \sigma_{s2} R_2 + \sigma_{s2} c_2) & \cdots & -\sigma_{sN} w_N k_{2N} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ -\sigma_{s1} w_1 k_{N1} & -\sigma_{s2} w_2 k_{N2} & \cdots & (1 - \sigma_{sN} R_N + \sigma_{sN} c_N) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \vdots \\ \Phi_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_N \end{bmatrix}, \quad (2.65)$$

onde $c_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N w_j k_{ij}$, $i = 1, 2, 3, \dots, N$.

Note que se assumirmos que a seção de choque de espalhamento é nula, ou seja, $\sigma_s = 0$, temos que a matriz principal do sistema (2.65) é a matriz identidade e portanto teremos uma sistema com solução única. Podemos ainda estender a inversibilidade dessa matriz em torno de uma vizinhança de $\sigma_s = 0$. Os experimentos numéricos apontaram que essa matriz é inversível sempre que $\sigma_s < \sigma_t$.

2.2.5 Interpolação

A discretização dada na equação (2.62) tem como resultado uma aproximação para o fluxo escalar nos pontos da malha. Ocorre que, as malhas produzidas pelas quadraturas de Gauss-Legendre e Boole, quadraturas que serão consideradas nas simulações, são distintas, fazendo necessário calcular interpolações para comparar os resultados para o fluxo escalar.

Para determinarmos a interpolação vamos iniciar reescrevendo os somatório da equação (2.62) como,

$$\begin{aligned} \Phi(x) \approx \sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq x}}^N w(\tau_j)k(x, \tau_j)\Phi(\tau_j)\sigma_s(\tau_j) - \sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq x}}^N w(\tau_j)k(x, \tau_j)\Phi(x)\sigma_s(x) \\ + \Phi(x)\sigma_s(x)R(x) + g(x). \end{aligned} \quad (2.66)$$

Passando para o lado esquerdo da igualdade os termos com a função $\Phi(x)$ temos

$$\begin{aligned} \Phi(x) \left(1 + \sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq x}}^N w(\tau_j)k(x, \tau_j)\sigma_s(x) - \sigma_s(x)R(x) \right) \\ \approx \sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq x}}^N w(\tau_j)k(x, \tau_j)\Phi(\tau_j)\sigma_s(\tau_j) + g(x), \end{aligned} \quad (2.67)$$

por fim isolamos a função $\Phi(x)$ na equação (2.67) e obtemos a interpolação,

$$\Phi(x) \approx \frac{\sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq x}}^N w(\tau_j)k(x, \tau_j)\Phi(\tau_j)\sigma_s(\tau_j) + g(x)}{1 + \sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq x}}^N w(\tau_j)k(x, \tau_j)\sigma_s(x) - \sigma_s(x)R(x)}. \quad (2.68)$$

2.3 Parâmetros constantes por partes

2.3.1 Tratamento da singularidade

Para um domínio multirregião temos que as funções $\sigma_t(x)$ e $\sigma_s(x)$ são funções constantes por partes, ou seja,

$$\sigma_s(x) = \begin{cases} \sigma_{s1}, & 0 = x_1 \leq x < x_2 \\ \sigma_{s2}, & x_2 \leq x < x_3 \\ \vdots & \\ \sigma_{sN}, & x_N \leq x < x_{M+1} = L \end{cases}$$

e

$$\sigma_t(x) = \begin{cases} \sigma_{t1}, & 0 = x_1 \leq x < x_2 \\ \sigma_{t2}, & x_2 \leq \tau < x_3 \\ \vdots & \\ \sigma_{tN}, & x_N \leq x < x_{M+1} = L \end{cases}$$

Para esse domínio também aplicamos a técnica de subtração de singularidades na função $L_g(\sigma_s(x)\Phi(x))$ a fim de remover a singularidade do núcleo do operador integral da função $k(x, \mu)$, apresentada na equação (2.27). No entanto para este caso a função $\sigma_s(\tau)$ não é considerada na subtração, como mostramos a seguir,

$$k(x, \tau)\Phi(\tau)\sigma_s(\tau) = k(x, \tau)\sigma_s(\tau)[\Phi(\tau) - \Phi(x)] + k(x, \tau)\Phi(x)\sigma_s(\tau). \quad (2.69)$$

Ao substituírmos (2.69) na equação (2.30) temos que o fluxo escalar assume a seguinte forma:

$$\Phi(x) = \int_0^L k(x, \tau)\sigma_s(\tau)[\Phi(\tau) - \Phi(x)]d\tau + \Phi(x)R(x) + g(x), \quad (2.70)$$

onde $R(x) = \int_0^L \sigma_s(\tau)k(x, \tau)d\tau$. Observe que para este caso temos no integrando da função $R(x)$ a função $\sigma_s(\tau)$.

Assim como no caso contínuo nós solucionamos analiticamente a integral com respeito a variável τ da função $R(x)$. Este processo facilitou na implementação do algoritmo e também melhorou os resultados numéricos.

2.3.2 Tratamento analítico da parte singular

O núcleo da função $R(x)$ apresenta uma singularidade quando $\tau = x$, a remoção dessa singularidade é feita resolvendo analiticamente a integral na variável τ em cada intervalo do problema multirregião. Assim, reescrevemos a função $R(x)$ como

$$\begin{aligned} R(x) &= \sum_{i=1}^N \int_{x_i}^{x_{i+1}} \sigma_{s_i} \int_0^1 \left[\frac{\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(\int_x^L \sigma_{t_i} dk + \int_\tau^L \sigma_{t_i} dk)} + \rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(\int_0^\tau \sigma_{t_i} dk + \int_0^x \sigma_{t_i} dk)}}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_{t_i} dk}\right)} \right. \\ &+ \left. \frac{e^{-\frac{1}{\mu}|\int_x^\tau \sigma_{t_i} dk|}}{2\mu} + \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_{t_i} dk} \left(e^{-\frac{1}{\mu} \int_x^\tau \sigma_{t_i} dk} + e^{-\frac{1}{\mu} \int_\tau^x \sigma_{t_i} dk} \right)}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_{t_i} dk}\right)} \right] d\mu d\tau \\ &= \int_0^1 \sum_{i=1}^N \sigma_{s_i} R_\tau^i(x) d\mu, \end{aligned} \quad (2.71)$$

sendo

$$\begin{aligned} R_\tau^i(x) &= \int_{x_i}^{x_{i+1}} \left[\frac{\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(\int_x^L \sigma_{t_i} dk + \int_\tau^L \sigma_{t_i} dk)} + \rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(\int_0^\tau \sigma_{t_i} dk + \int_0^x \sigma_{t_i} dk)}}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_{t_i} dk}\right)} \right. \\ &+ \left. \frac{e^{-\frac{1}{\mu}|\int_x^\tau \sigma_{t_i} dk|}}{2\mu} + \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_{t_i} dk} \left(e^{-\frac{1}{\mu} \int_x^\tau \sigma_{t_i} dk} + e^{-\frac{1}{\mu} \int_\tau^x \sigma_{t_i} dk} \right)}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu} \int_0^L \sigma_{t_i} dk}\right)} \right] d\tau. \end{aligned} \quad (2.72)$$

Para facilitar na solução vamos reescrever a função R_τ^i como

$$R_\tau^i = R_1^i(x) + R_2^i(x) + R_3^i(x) + R_4^i(x) + R_5^i(x). \quad (2.73)$$

Supondo $x_p < x < x_{p+1}$ temos

$$\begin{aligned} R_1^i(x) &= \frac{\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(-\int_0^x \sigma_{t_i} dk + 2\int_0^L \sigma_{t_i} dk)}}{2\left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu}\int_0^L \sigma_{t_i} dk}\right)} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{e^{\frac{1}{\mu}\int_0^\tau \sigma_{t_i} dk}}{\mu} d\tau \\ &= A_1(x) \frac{e^{-\frac{1}{\mu}(-\sum_{n=1}^{i-1} \sigma_{t_n}(x_{n+1}-x_n))} \left(e^{-\frac{1}{\mu}\sigma_{t_i}(x_i-x_{i+1})} - 1\right)}{\sigma_{t_i}}, \end{aligned} \quad (2.74)$$

onde

$$A_1(x) = \frac{\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(-\sum_{j=1}^{p-1} \sigma_{t_j}(x_{j+1}-x_j) - \sigma_{t_p}(x-x_p) + 2\sum_{j=1}^N \sigma_{t_j}(x_{j+1}-x_j))}}{2\left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu}(\sum_{j=1}^N \sigma_{t_j}(x_{j+1}-x_j))}\right)}. \quad (2.75)$$

Para a função $R_2^i(x)$ temos

$$\begin{aligned} R_2^i(x) &= \frac{\rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(\int_0^x \sigma_{t_i} dk)}}{2\left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu}\int_0^L \sigma_{t_i} dk}\right)} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{e^{-\frac{1}{\mu}\int_0^\tau \sigma_{t_i} dk}}{\mu} d\tau \\ &= A_2(x) \frac{e^{-\frac{1}{\mu}(\sum_{n=1}^{i-1} \sigma_{t_n}(x_{n+1}-x_n))} \left(-e^{-\frac{1}{\mu}\sigma_{t_i}(x_{i+1}-x_i)} + 1\right)}{\sigma_{t_i}} \end{aligned} \quad (2.76)$$

onde

$$A_2(x) = \frac{\rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(\sum_{j=1}^{p-1} \sigma_{t_j}(x_{j+1}-x_j) + \sigma_{t_p}(x-x_p))}}{2\left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu}(\sum_{j=1}^N \sigma_{t_j}(x_{j+1}-x_j))}\right)} \quad (2.77)$$

Para a função $R_3^i(x)$, dada por

$$R_3^i(x) = \int_{a_i}^{b_i} \frac{e^{-\frac{1}{\mu}|\int_x^\tau \sigma_{t_i} dk|}}{2\mu} d\tau, \quad (2.78)$$

temos três situações:

Se $a_i \leq x \leq b_i$ então,

$$\begin{aligned} R_3^i(x) &= \int_{a_i}^{b_i} \frac{e^{-\frac{1}{\mu}|\int_x^\tau \sigma_{t_i} dk|}}{2\mu} d\tau \\ &= \int_{a_i}^x \frac{e^{-\frac{1}{\mu}(\int_0^x \sigma_{t_i} dk - \int_0^\tau \sigma_{t_i} dk)}}{2\mu} d\tau + \int_x^{b_i} \frac{e^{-\frac{1}{\mu}(\int_0^\tau \sigma_{t_i} dk - \int_0^x \sigma_{t_i} dk)}}{2\mu} d\tau \\ &= \frac{1}{2\sigma_{t_i}} \left(2 - e^{-\frac{1}{\mu}\sigma_{t_i}(-a_i+x)} - e^{-\frac{1}{\mu}\sigma_{t_i}(b_i-x)}\right). \end{aligned} \quad (2.79)$$

Se $x < a_i$ então,

$$\begin{aligned}
R_3^i(\mu) &= \int_{a_i}^{b_i} \frac{e^{-\frac{1}{\mu}|\int_x^{\tau} \sigma_{t_i} dk|}}{2\mu} d\tau. \\
&= \int_{a_i}^{b_i} \frac{e^{-\frac{1}{\mu}(\int_0^{\tau} \sigma_{t_i} dk - \int_0^x \sigma_{t_i} dk)}}{2\mu} d\tau \\
&= \frac{1}{2\sigma_{t_i}} \left(e^{-\frac{1}{\mu}\sigma_{t_i}(a_i-x)} - e^{-\frac{1}{\mu}\sigma_{t_i}(b_i-x)} \right). \tag{2.80}
\end{aligned}$$

Se $x > b_i$ então,

$$\begin{aligned}
R_3^i(x) &= \int_{a_i}^{b_i} \frac{e^{-\frac{1}{\mu}|\int_x^{\tau} \sigma_{t_i} dk|}}{2\mu} d\tau \\
&= \int_{a_i}^{b_i} \frac{e^{-\frac{1}{\mu}(\int_0^x \sigma_{t_i} dk - \int_0^{\tau} \sigma_{t_i} dk)}}{2\mu} d\tau \\
&= \frac{1}{2\sigma_{t_i}} \left(e^{-\frac{1}{\mu}\sigma_{t_i}(-b_i+x)} - e^{-\frac{1}{\mu}\sigma_{t_i}(-a_i+x)} \right). \tag{2.81}
\end{aligned}$$

Assim temos que a função $R_3^i(x)$ é dada por

$$R_3^i(\mu) = \begin{cases} \frac{1}{2\sigma_{t_i}} \left(e^{-\frac{1}{\mu}\sigma_{t_i}(a_i-x)} - e^{-\frac{1}{\mu}\sigma_{t_i}(b_i-x)} \right) & \text{se } x < a_i \\ \frac{1}{2\sigma_{t_i}} \left(2 - e^{-\frac{1}{\mu}\sigma_{t_i}(x-a_i)} - e^{-\frac{1}{\mu}\sigma_{t_i}(b_i-x)} \right) & \text{se } a_i \leq x \leq b_i \\ \frac{1}{2\sigma_{t_i}} \left(e^{-\frac{1}{\mu}\sigma_{t_i}(x-b_i)} - e^{-\frac{1}{\mu}\sigma_{t_i}(x-a_i)} \right) & \text{se } x > b_i. \end{cases}$$

A função $R_4^i(x)$ tem como solução

$$\begin{aligned}
R_4^i(x) &= \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2\int_0^L \sigma_{t_i} dk - \int_0^x \sigma_{t_i} dk)}}{2 \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu}\int_0^L \sigma_{t_i} dk} \right)} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{e^{-\frac{1}{\mu}\int_0^{\tau} \sigma_{t_i} dk}}{\mu} d\tau \\
&= A_4(x) \frac{e^{-\frac{1}{\mu}(\sum_{n=1}^{i+1} \sigma_{t_n}(x_{n+1}-x_n))} \left(1 - e^{-\frac{1}{\mu}\sigma_{t_i}(x_{i+1}-x_i)} \right)}{\sigma_{t_i}}, \tag{2.82}
\end{aligned}$$

onde

$$A_4(x) = \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2\sum_{j=1}^N \sigma_{t_j}(x_{j+1}-x_j) - \sum_{j=1}^{p-1} \sigma_{t_j}(x_{j+1}-x_j) - \sigma_{t_p}(x-x_p))}}{2 \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu}(\sum_{j=1}^N \sigma_{t_j}(x_{j+1}-x_j))} \right)}. \tag{2.83}$$

E por fim

$$\begin{aligned}
R_5^i(x) &= \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2\int_0^L\sigma_{t_i}dk+\int_0^x\sigma_{t_i}dk)}}{2\left(1-\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu}\int_0^L\sigma_{t_i}dk}\right)}\int_{x_i}^{x_{i+1}}\frac{e^{\frac{1}{\mu}\int_0^\tau\sigma_{t_i}dk}}{\mu}d\tau \\
&= A_5(x)\frac{e^{-\frac{1}{\mu}(\sum_{n=1}^{i+1}\sigma_{t_n}(x_{n+1}-x_n))}\left(e^{-\frac{1}{\mu}\sigma_{t_i}(x_{i+1}-x_i)}-1\right)}{\sigma_{t_i}}, \tag{2.84}
\end{aligned}$$

onde

$$A_5(x) = \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2\sum_{j=1}^N\sigma_{t_j}(x_{j+1}-x_j)+\sum_{j=1}^{p-1}\sigma_{t_j}(x_{j+1}-x_j)+\sigma_{t_p}(x-x_p))}}{2\left(1-\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2}{\mu}(\sum_{j=1}^N\sigma_{t_j}(x_{j+1}-x_j))}\right)}. \tag{2.85}$$

2.3.3 Método de Nyström

Com a remoção da singularidade do operador integral podemos agora aplicar o método de Nyström na equação (2.70) e com isso obter a aproximação da equação integral do transporte dada por

$$\Phi(x) \approx \sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq x}}^N w(\tau_j)\sigma_s(\tau_j)k(x, \tau_j)[\Phi(\tau_j) - \Phi(x)] + \Phi(x)R(x) + g(x), \tag{2.86}$$

onde $\{w(\tau_j)\}$ que são os pesos do esquema de quadratura e $\{\tau_j\}$ são as abscissas.

2.3.4 Cálculo do fluxo escalar na malha

O fluxo escalar de partículas em cada ponto i da malha, com $i = 1, \dots, N$, é obtido avaliando a equação (2.62) nos pontos da quadratura, ou seja,

$$\Phi_i \approx \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N w_j k_{ij} \sigma_{sj} [\Phi_j - \Phi_i] + \Phi_i R_i + g_i, \quad i = 1, \dots, N, \tag{2.87}$$

onde os vetores $\Phi(x_i)$, $g(x_i)$ e $R(x_i)$ foram escritos como Φ_i , g_i e R_i , a matriz $k(x_i, \tau_j)$ definida por $k_{i,j}$, a função $\sigma_s(x_i) = \sigma_{s_i}$ e os pesos da quadratura por $w(\tau_j) = w_j$.

A partir da equação (2.64) podemos escrever seguinte sistema para o fluxo escalar,

$$\begin{bmatrix} (1-R_1+c_1) & -\sigma_{s2}w_2k_{12} & \cdots & -\sigma_{sN}w_Nk_{1N} \\ -\sigma_{s1}w_1k_{21} & (1-R_2+c_2) & \cdots & -\sigma_{sN}w_Nk_{2N} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ -\sigma_{s1}w_1k_{N1} & -\sigma_{s2}w_2k_{N2} & \cdots & (1-R_N+c_N) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Phi_1 \\ \Phi_2 \\ \vdots \\ \Phi_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} g_1 \\ g_2 \\ \vdots \\ g_N \end{bmatrix}, \quad (2.88)$$

onde $c_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N w_j k_{ij} \sigma_{s_j}$, $i = 1, 2, 3, \dots, N$.

Assim como no caso contínuo se assumirmos que a seção de choque de espalhamento é nula, ou seja, $\sigma_s = 0$, temos que a matriz principal do sistema (2.88) é a matriz identidade e portanto teremos uma sistema com solução única. Podemos ainda estender a inversibilidade dessa matriz em torno de uma vizinhança de $\sigma_s = 0$.

2.3.5 Interpolação

Para compararmos os resultados do fluxo escalar gerados pela aplicação das quadraturas de Gauss-Legendre e Boole foi necessário determinar a interpolação da discretização dada em (2.86), uma vez que as malhas produzidas por essas quadraturas são distintas.

Determinamos a interpolação reescrevendo a equação (2.86) como,

$$\Phi(x) \approx \sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq x}}^N w(\tau_j) \sigma_s(\tau_j) k(x, \tau_j) \Phi(\tau_j) + \Phi(x) \left(R(x) - \sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq x}}^N w(\tau_j) \sigma_s(\tau_j) k(x, \tau_j) \right) + g(x) \quad (2.89)$$

e isolando a função $\Phi(x)$ na equação (2.89), ou seja,

$$\Phi(x) \approx \frac{\sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq x}}^N w(\tau_j) k(x, \tau_j) \Phi(\tau_j) \sigma_s(\tau_j) + g(x)}{1 + \sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq x}}^N w(\tau_j) k(x, \tau_j) \sigma_s(\tau_j) - R(x)}. \quad (2.90)$$

3 SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE ISOTRÓPICA EM DOMÍNIO NÃO HOMOGÊNEO USANDO MUDANÇA DE VARIÁVEL E O MÉTODO DE NYSTRÖM

Neste capítulo apresentamos uma segunda metodologia de solução para a equação de transporte isotrópica em domínio não homogêneo com condições de contorno semi-refletivas, denominada metodologia 2. Nesta metodologia iniciamos fazendo uma mudança de variável, descrita na seção 3.1, a fim transformar o problema em domínio não homogêneo em um problema equivalente onde somente a seção de choque de espalhamento varia e a seção de choque total é constante.

A partir desse novo problema determinamos, na seção 3.2, sua formulação integral cujas singularidades são removidas por meio de técnicas analíticas e usando diferentes estratégias conforme o caso considerado: parâmetros contínuos, na seção 3.3, ou multirregião, na seção 3.4. Por fim, para cada caso, apresentamos a discretização do operador integral.

3.1 Mudança de variável

A metodologia de solução para o problema de transporte com espalhamento isotrópico em domínio não homogêneo, (2.1)-(2.3), proposta aqui, tem como base uma mudança na variável espacial do problema, que é dada em termos da seção de choque macroscópica total, ou seja,

$$y(x) = \int_0^x \sigma_t(\tau) d\tau. \quad (3.1)$$

A função $\sigma_t(x)$, apresentada na equação (3.1), é uma função estritamente positiva, assim temos que $y(x)$ dada na equação (3.1) é uma função crescente e portanto bijetora. Por $y(x)$ ser uma função bijetora podemos aplicar a mudança de variável proposta em (3.1) no problema (2.1)-(2.3) para obter um problema mais simples e ao final determinarmos as soluções para o problema original em domínio não homogêneo.

Considerando a mudança de variável (3.1) no termo da derivada com respeito a variável x da equação (2.1) temos

$$\frac{\partial}{\partial x}\Psi(x(y), \mu) = \frac{\partial}{\partial y}\Psi(x(y), \mu) \frac{\partial y}{\partial x} = \sigma_t(x(y)) \frac{\partial}{\partial y}\Psi(x(y), \mu). \quad (3.2)$$

Pela mudança de variável (3.1) temos que a equação de transporte (2.1) é reescrita da forma

$$\mu \sigma_t(x(y)) \frac{\partial}{\partial y}\Psi(x(y), \mu) + \Psi(x(y), \mu) = \frac{\sigma_s(x(y))}{2} \int_{-1}^1 \Psi(x(y), \mu') d\mu' + S(x(y)) \quad (3.3)$$

e dividindo a equação (3.3) pela função $\sigma_t(x(y))$ obtemos

$$\mu \frac{\partial}{\partial y}\Psi(x(y), \mu) + \Psi(x(y), \mu) = \frac{\sigma_s(x(y))}{2\sigma_t(x(y))} \int_{-1}^1 \Psi(x(y), \mu') d\mu' + \frac{S(x(y))}{\sigma_t(x(y))}. \quad (3.4)$$

Para simplificar a notação tomamos as funções, $\Psi(x(y), \mu) = \bar{\Psi}(y, \mu)$, $\sigma_s(x(y)) = \bar{\sigma}_s(y)$, $\sigma_t(x(y)) = \bar{\sigma}_t(y)$ e $S(x(y)) = \bar{S}(y)$ e reescrevemos (3.4) como

$$\mu \frac{\partial}{\partial y}\bar{\Psi}(y, \mu) + \bar{\Psi}(y, \mu) = \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{2\bar{\sigma}_t(y)} \int_{-1}^1 \bar{\Psi}(y, \mu') d\mu' + \frac{\bar{S}(y)}{\bar{\sigma}_t(y)}. \quad (3.5)$$

Assim, considerando a mudança de variável (3.1) obtemos um novo problema de transporte dado pela equação (3.5) e condições de contorno (2.2) e (2.3).

3.2 Formulação integral

A forma integral da equação do transporte, dada em (3.5), é determinada a partir da definição para o fluxo escalar médio que é dada por

$$\bar{\Phi}(y) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \bar{\Psi}(y, \mu) d\mu = \frac{1}{2} \int_0^1 [\bar{\Psi}(y, -\mu) + \bar{\Psi}(y, \mu)] d\mu, \quad (3.6)$$

onde os fluxos angulares $\bar{\Psi}(y, \mu)$ e $\bar{\Psi}(y, -\mu)$ são solução da equação (3.5) com condições de contorno (2.2) e (2.3).

Considere a equação (3.5) escrita da forma

$$\mu \frac{\partial}{\partial y} \bar{\Psi}(y, \mu) + \bar{\Psi}(y, \mu) = \bar{Q}(y), \quad (3.7)$$

onde $\bar{Q}(y) = \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_i(y)} \bar{\Phi}(y) + \frac{\bar{S}(y)}{\bar{\sigma}_i(y)}$ e $\bar{\Phi}(y) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \bar{\Psi}(y, \mu) d\mu$.

Dividindo a equação (3.7) por μ obtemos a equação diferencial

$$\frac{\partial \bar{\Psi}(y, \mu)}{\partial y} + \frac{\bar{\Psi}(y, \mu)}{\mu} = \frac{\bar{Q}(y)}{\mu}. \quad (3.8)$$

Determinarmos os fluxos angulares $\bar{\Psi}(y, -\mu)$ e $\bar{\Psi}(y, \mu)$ solucionando a equação diferencial (3.8) com o método de fator integrante. Na sequência, seguindo os mesmos passos descritos no Capítulo 2 determinamos o fluxo angular para $\mu > 0$ e $\mu < 0$.

O fluxo angular de partículas $\bar{\Psi}(y, \mu)$ é dado por

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}(y, \mu) = & \frac{1}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}} \left[\frac{\rho_0(\mu)}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu}(y+\tau)} \bar{Q}(\tau) d\tau \right. \\ & + \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau+y)} \bar{Q}(\tau) d\tau + (1 - \rho_0(\mu))B_0(\mu)e^{-\frac{y}{\mu}} \\ & \left. + (1 - \rho_L(-\mu))B_L(-\mu)\rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(y+L)} \right] + \frac{1}{\mu} \int_0^y e^{-\frac{1}{\mu}(y-\tau)} \bar{Q}(\tau) d\tau \end{aligned} \quad (3.9)$$

e o fluxo $\bar{\Psi}(y, -\mu)$ é escrito da forma

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}(y, -\mu) = & \frac{1}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}} \left[\frac{\rho_L(-\mu)}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau-y)} \bar{Q}(\tau) d\tau \right. \\ & + \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu}(2L+\tau-y)} \bar{Q}(\tau) d\tau + (1 - \rho_L(-\mu))B_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(L-y)} \\ & \left. + (1 - \rho_0(\mu))B_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(-y+2L)} \right] + \frac{1}{\mu} \int_y^L e^{-\frac{1}{\mu}(\tau-y)} \bar{Q}(\tau) d\tau. \end{aligned} \quad (3.10)$$

Substituindo as equações para o fluxo angular (3.9) e (3.10) na equação (3.6) obtemos o fluxo escalar que é dado por

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}(y) = & \int_0^1 \int_0^L \left[\frac{\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau-y)} + \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L+\tau-y)} + \rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(y+\tau)}}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \right. \\ & \left. + \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau+y)}}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \right] \bar{Q}(\tau) d\tau d\mu + \int_0^1 \int_0^L \frac{e^{-\frac{1}{\mu}|\tau-y|} \bar{Q}(\tau)}{2\mu} d\tau d\mu \\ & + \int_0^1 \left[\frac{(1 - \rho_L(-\mu))B_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(L-y)} + (1 - \rho_0(\mu))B_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y)}}{2(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}})} \right. \\ & \left. + \frac{(1 - \rho_0(\mu)B_0(\mu))e^{-\frac{y}{\mu}} + (1 - \rho_L(-\mu))B_L(-\mu)\rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(y+L)}}{2(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}})} \right] d\mu. \end{aligned} \quad (3.11)$$

Reescrevemos a equação para o fluxo escalar (3.11) como a soma dos operadores L_g e L_b , assim temos

$$\bar{\Phi}(y) = (L_g \bar{Q})(y) + (L_b \bar{B})(y), \quad (3.12)$$

onde a função $L_g \bar{Q}(y)$ é dado por

$$L_g \bar{Q}(y) = \int_0^L \bar{k}(y, \tau) \bar{Q}(\tau) d\tau, \quad (3.13)$$

com núcleo $\bar{k}(y, \tau)$ dado por

$$\begin{aligned} \bar{k}(y, \tau) = & \frac{1}{2} \int_0^1 \left[\frac{\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau-y)} + \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L+\tau-y)}}{\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \right. \\ & \left. + \frac{\rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(y+\tau)} + \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau+y)}}{\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} + \frac{e^{-\frac{1}{\mu}|\tau-y|}}{\mu} \right] d\mu. \end{aligned} \quad (3.14)$$

A função $L_b \bar{B}(y)$ é definida como:

$$\begin{aligned} L_b \bar{B}(y) = & \int_0^1 \left[\frac{(1 - \rho_L(-\mu))B_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(L-y)} + (1 - \rho_0(\mu))B_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y)}}{2(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}})} \right. \\ & \left. + \frac{(1 - \rho_0(\mu)B_0(\mu))e^{-\frac{y}{\mu}} + (1 - \rho_L(-\mu))B_L(-\mu)\rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(y+L)}}{2(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}})} \right] d\mu. \end{aligned} \quad (3.15)$$

Definimos no início deste capítulo a função $\bar{Q}(y) = \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)}\bar{\Phi}(y) + \frac{\bar{S}(y)}{\bar{\sigma}_t(y)}$.

Substituindo esta função na equação (3.12) obtemos

$$\bar{\Phi}(y) = L_g \left(\frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)}\bar{\Phi}(y) \right) + L_g \left(\frac{\bar{S}(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} \right) + L_b\bar{B}(y), \quad (3.16)$$

a qual pode ser reescrita como

$$\bar{\Phi}(y) = \int_0^L \frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)}\bar{k}(y, \tau)\bar{\Phi}(\tau)d\tau + \bar{g}(y), \quad (3.17)$$

onde $\bar{g}(y) = L_g \left(\frac{\bar{S}(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} \right) + L_b\bar{B}(y)$.

3.3 Parâmetros contínuos

Nesta seção, trataremos o caso onde $\sigma_t(x)$ e $\sigma_s(x)$ são funções contínuas.

3.3.1 Tratamento da singularidade

A formulação integral da equação de transporte em domínio homogêneo determinada com a mudança de variável, equação (3.17), possui em seu núcleo uma singularidade na diagonal, $\tau = y$. Assim, não podemos aplicar o método de Nyström diretamente na equação para o fluxo escalar, dada em (3.17), sem antes removermos esta singularidade.

Para tratar a singularidade $\tau = y$, apresentada no núcleo do operador $\bar{k}(y, \tau)$, vamos aplicar a técnica de subtração de singularidade [34], ou seja,

$$\begin{aligned} \frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)}\bar{k}(y, \tau)\bar{\Phi}(\tau) &= \frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)}\bar{k}(y, \tau)\bar{\Phi}(\tau) + \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)}\bar{k}(y, \tau)\bar{\Phi}(y) - \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)}\bar{k}(y, \tau)\bar{\Phi}(y) \\ &= \bar{k}(y, \tau) \left(\frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)}\bar{\Phi}(\tau) - \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)}\bar{\Phi}(y) \right) + \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)}\bar{k}(y, \tau)\bar{\Phi}(y) \end{aligned} \quad (3.18)$$

e assim reescrevemos a equação (3.17) da forma

$$\bar{\Phi}(x) = \int_0^L \bar{k}(y, \tau) \left(\frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)}\bar{\Phi}(\tau) - \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)}\bar{\Phi}(y) \right) d\tau + \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)}\bar{\Phi}(y)\bar{R}(y) + \bar{g}(y), \quad (3.19)$$

onde $\bar{R}(y) = \int_0^L \bar{k}(y, \tau) d\tau$, ou ainda

$$\bar{R}(y) = \int_0^L \int_0^1 \left[\frac{\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau-y)} + \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L+\tau-y)}}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} + \frac{\rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(y+\tau)} + \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau+y)}}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} + \frac{e^{-\frac{1}{\mu}|\tau-y|}}{2\mu} \right] d\mu d\tau. \quad (3.20)$$

Para facilitar na implementação do algoritmo da função $\bar{R}(y)$ vamos solucionar analiticamente a integral com respeito a variável τ . Esta manipulação foi necessária para obtermos bons resultados numéricos para essa função, já que apesar da possibilidade de implementação da integral dupla e solução das integrais usando rotinas numéricas disponíveis na linguagem de programação C, os resultados obtidos não foram bons. Portanto, para garantir uma boa aproximação solucionamos analiticamente a integral com respeito a variável τ e para a integral em μ utilizamos rotinas de integração numérica da GNU Scientific Library.

3.3.2 Tratamento analítico da parte singular

A função $\bar{R}(y)$ é composta de duas integrais, uma na variável τ e outra na variável μ e seu integrando é dado pela função $\bar{k}(y, \tau)$. Como mencionado anteriormente, esta função possui uma singularidade na diagonal. Assim, quando $\tau = y$ temos que o último termo da função (3.20) será dado por $1/2\mu$ tornando esta função singular quando μ assumir o valor de zero. Portanto, para lidar com essa singularidade trocamos a ordem de integração da função $\bar{R}(y)$ e resolvemos a integral na variável τ analiticamente.

Trocando a ordem de integração da equação (3.20) obtemos a seguinte representação para a função $\bar{R}(y)$:

$$\begin{aligned} \bar{R}(y) = \int_0^1 \int_0^L & \left[\frac{\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau-y)} + \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L+\tau-y)}}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \right. \\ & \left. + \frac{\rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(y+\tau)} + \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau+y)} + \frac{e^{-\frac{1}{\mu}|\tau-y|}}{2\mu}}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \right] d\tau d\mu. \end{aligned} \quad (3.21)$$

A integral com respeito a variável τ da função $\bar{k}(y, \tau)$ que solucionaremos analiticamente é dada por

$$\begin{aligned} \bar{R}_\tau(y) = \frac{1}{2} \int_0^L & \left[\frac{\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau-y)} + \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L+\tau-y)}}{\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \right. \\ & \left. + \frac{\rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(y+\tau)} + \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau+y)} + \frac{e^{-\frac{1}{\mu}|\tau-y|}}{\mu}}{\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \right] d\tau. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Para facilitar a descrição das integrais, escrevemos:

$$\bar{R}_\tau(y) = \bar{R}_1(y) + \bar{R}_2(y) + \bar{R}_3(y) + \bar{R}_4(y) + \bar{R}_5(y). \quad (3.23)$$

Descrevemos a seguir a solução de cada termo da função $\bar{R}_\tau(y)$.

A solução para a função $\bar{R}_1(y)$ é dado por,

$$\begin{aligned} \bar{R}_1(y) &= \frac{\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y)}}{2 \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \int_0^L \frac{e^{\frac{1}{\mu}\tau}}{\mu} d\tau \\ &= \frac{\rho_L(-\mu)}{2 \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \left[e^{-\frac{1}{\mu}(L-y)} - e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y)} \right]. \end{aligned} \quad (3.24)$$

A função $\bar{R}_2(y)$ tem como solução

$$\begin{aligned} \bar{R}_2(y) &= \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y)}}{2 \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \int_0^L \frac{e^{-\frac{1}{\mu}\tau}}{\mu} d\tau \\ &= \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)}{2 \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \left[-e^{-\frac{1}{\mu}(3L-y)} + e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y)} \right]. \end{aligned} \quad (3.25)$$

Resolvendo a função $\bar{R}_3(y)$, obtemos

$$\begin{aligned}\bar{R}_3(y) &= \frac{1}{2} \int_0^L \frac{\rho_0(\mu) e^{-\frac{1}{\mu}(y+\tau)}}{\mu \left(1 - \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} d\tau \\ &= \frac{\rho_0(\mu)}{2 \left(1 - \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \left[-e^{-\frac{1}{\mu}(y+L)} + e^{-\frac{1}{\mu}(y)}\right].\end{aligned}\quad (3.26)$$

Integrando com respeito a variável τ a função $\bar{R}_4(y)$ temos

$$\begin{aligned}\bar{R}_4(y) &= \int_0^L \frac{\rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau+y)}}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} d\tau \\ &= \frac{\rho_0(\mu) \rho_L(-\mu)}{2 \left(1 - \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \left[e^{-\frac{1}{\mu}(L+y)} - e^{-\frac{1}{\mu}(2L+y)}\right].\end{aligned}\quad (3.27)$$

A função $\bar{R}_5(y)$ é reescrita inicialmente como a soma de duas integrais cujos intervalos de integração são $(0, y)$ e (y, L) . Solucionando cada uma dessas integrais obtemos a seguinte solução

$$\begin{aligned}\bar{R}_5(y) &= \int_0^L \frac{e^{-\frac{1}{\mu}|\tau-y|}}{2\mu} d\tau \\ &= \int_0^y \frac{e^{-\frac{1}{\mu}(-\tau+y)}}{2\mu} + \int_y^L \frac{e^{-\frac{1}{\mu}(\tau-y)}}{2\mu} d\tau \\ &= \frac{1}{2} \left(2 - e^{-\frac{y}{\mu}} - e^{-\frac{1}{\mu}(-y+L)}\right).\end{aligned}\quad (3.28)$$

A partir da solução para cada termo da função $\bar{R}(y)$ temos a solução analítica para a integral com respeito a variável τ dada por

$$\begin{aligned}\bar{R}(y) &= \int_0^1 \left\{ \frac{1}{2 \left(1 - \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \left[\rho_L(-\mu) \left(e^{-\frac{1}{\mu}(L-y)} - e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y)}\right) \right. \right. \\ &\quad + \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) \left(-e^{-\frac{1}{\mu}(3L-y)} + e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y)}\right) + \rho_0(\mu) \left(-e^{-\frac{1}{\mu}(y+L)} + e^{-\frac{1}{\mu}(y)}\right) \\ &\quad \left. \left. + \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) \left(e^{-\frac{1}{\mu}(L+y)} - e^{-\frac{1}{\mu}(2L+y)}\right) \right] + \frac{1}{2} \left(2 - e^{-\frac{y}{\mu}} - e^{-\frac{1}{\mu}(-y+L)}\right) \right\} d\mu.\end{aligned}\quad (3.29)$$

3.3.3 Método de Nyström

Nesta seção vamos aproximar o operador integral, dado na equação (3.19), utilizando o método de Nyström. A ideia deste método foi descrita no capítulo anterior e a aproximação para termo integral apresentada na equação (2.61).

Aplicando o método de Nyström no termo integral da equação (3.19) obtemos a seguinte aproximação:

$$\bar{\Phi}(y) \approx \sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq y}}^N w(\tau_j) \bar{k}(y, \tau_j) \left[\bar{\Phi}(\tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau_j)}{\bar{\sigma}_t(\tau_j)} - \bar{\Phi}(y) \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} \right] + \bar{\Phi}(y) \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} \bar{R}(y) + \bar{g}(y), \quad (3.30)$$

onde $\{w(\tau_j)\}_{j=1}^N$ são os pesos da quadratura numérica e $\{\tau_j\}_{j=1}^N$ são as abscissas.

3.3.4 Cálculo do fluxo escalar na malha

Avaliando a equação para o fluxo escalar dada em (3.30) em cada ponto i da malha com $i = 1, \dots, N$ obtemos

$$\bar{\Phi}(y_i) \approx \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N w(\tau_j) \bar{k}(y_i, \tau_j) \left[\bar{\Phi}(\tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau_j)}{\bar{\sigma}_t(\tau_j)} - \bar{\Phi}(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} \right] + \bar{\Phi}(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} \bar{R}(y_i) + \bar{g}(y_i). \quad (3.31)$$

Para simplificar a notação reescrevemos a equação (3.31) da forma

$$\bar{\Phi}_i \approx \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N w_j \bar{k}_{ij} \left[\bar{\Phi}_j \frac{\bar{\sigma}_{sj}}{\bar{\sigma}_{tj}} - \bar{\Phi}_i \frac{\bar{\sigma}_{si}}{\bar{\sigma}_{ti}} \right] + \bar{\Phi}_i \frac{\bar{\sigma}_{si}}{\bar{\sigma}_{ti}} \bar{R}_i + \bar{g}_i, \quad i = 1, \dots, N, \quad (3.32)$$

onde $\bar{\Phi}(y_i) = \bar{\Phi}_i$, $\bar{\sigma}_s(y_i) = \bar{\sigma}_{si}$, $\bar{k}(y_i, \tau_j) = \bar{k}_{ij}$, $\bar{R}(y_i) = \bar{R}_i$, $\bar{g}(y_i) = \bar{g}_i$ e $w(\tau_j) = w_j$.

A partir da equação (3.32) podemos determinar um sistema para o fluxo escalar:

$$\begin{bmatrix} (1 - \frac{\bar{\sigma}_{s1}}{\bar{\sigma}_{t1}} \bar{R}_1 + \frac{\bar{\sigma}_{s1}}{\bar{\sigma}_{t1}} \bar{c}_1) & -\frac{\bar{\sigma}_{s2}}{\bar{\sigma}_{t2}} w_2 k_{12} & \cdots & -\frac{\bar{\sigma}_{sN}}{\bar{\sigma}_{tN}} w_N k_{1N} \\ -\frac{\bar{\sigma}_{s1}}{\bar{\sigma}_{t1}} w_1 k_{21} & (1 - \frac{\bar{\sigma}_{s2}}{\bar{\sigma}_{t2}} \bar{R}_2 + \frac{\bar{\sigma}_{s2}}{\bar{\sigma}_{t2}} \bar{c}_2) & \cdots & -\frac{\bar{\sigma}_{sN}}{\bar{\sigma}_{tN}} w_N k_{2N} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ -\frac{\bar{\sigma}_{s1}}{\bar{\sigma}_{t1}} w_1 k_{N1} & -\frac{\bar{\sigma}_{s2}}{\bar{\sigma}_{t2}} w_2 k_{N2} & \cdots & (1 - \frac{\bar{\sigma}_{sN}}{\bar{\sigma}_{tN}} \bar{R}_N + \frac{\bar{\sigma}_{sN}}{\bar{\sigma}_{tN}} \bar{c}_N) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\Phi}_1 \\ \bar{\Phi}_2 \\ \vdots \\ \bar{\Phi}_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{g}_1 \\ \bar{g}_2 \\ \vdots \\ \bar{g}_N \end{bmatrix}, \quad (3.33)$$

onde $\bar{c}_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N w_j k_{ij}$, $i = 1, 2, 3, \dots, N$.

Observe que se tomarmos a seção de choque de espalhamento nula, ou seja, $\bar{\sigma}_s = 0$, a matriz principal do sistema dado em (3.33) é uma matriz identidade e assim teremos o sistema com solução única. Podemos ainda estender a inversibilidade dessa matriz em torno de uma vizinhança de $\bar{\sigma}_s = 0$.

3.3.5 Interpolação

A discretização obtida em (3.30) é uma aproximação para o fluxo escalar nos pontos da malha. Ocorre que, as malhas produzidas pelas quadraturas usadas nas simulações, quadratura de Gauss-Legendre e regra Boole, são distintas, fazendo necessário calcular interpolações para comparar os resultados para o fluxo escalar.

A interpolação da equação (3.30) é determinada isolando a função $\Phi(x)$, para tal iniciamos reescrevendo essa equação como,

$$\begin{aligned} \bar{\Phi}(y) \approx \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N w(\tau_j) \bar{k}(y, \tau_j) \bar{\Phi}(\tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau_j)}{\bar{\sigma}_t(\tau_j)} - \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N w(\tau_j) \bar{k}(y, \tau_j) \bar{\Phi}(y) \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} \\ + \bar{\Phi}(y) \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} \bar{R}(y) + \bar{g}(y), \end{aligned} \quad (3.34)$$

e na sequência isolamos a função $\Phi(y)$ na equação (3.34) para obtemos a interpolação,

$$\bar{\Phi}(y) \approx \frac{\sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq y}}^N w(\tau_j) \bar{k}(y, \tau_j) \bar{\Phi}(\tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau_j)}{\bar{\sigma}_t(\tau_j)} + \bar{g}(y)}{1 + \sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq y}}^N w(\tau_j) \bar{k}(y, \tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} - \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} \bar{R}(y)}. \quad (3.35)$$

3.4 Parâmetros constantes por partes

3.4.1 Tratamento da singularidade

Para um domínio multirregião temos que as funções $\bar{\sigma}_t(y)$ e $\bar{\sigma}_s(y)$ são funções constantes por partes, ou seja,

$$\bar{\sigma}_s(y) = \begin{cases} \bar{\sigma}_{s1}, & 0 = y_1 \leq y < y_2 \\ \bar{\sigma}_{s2}, & y_2 \leq y < y_3 \\ \vdots & \\ \bar{\sigma}_{sN}, & y_N \leq y < y_{M+1} = L, \end{cases}$$

e

$$\bar{\sigma}_t(y) = \begin{cases} \bar{\sigma}_{t1}, & 0 = y_1 \leq y < y_2 \\ \bar{\sigma}_{t2}, & y_2 \leq \tau < y_3 \\ \vdots & \\ \bar{\sigma}_{tN}, & y_N \leq y < y_{M+1} = L. \end{cases}$$

Neste caso a remoção das singularidades do núcleo do operador integral, apresentado na equação (3.17), também é feita através da técnica de subtração de singularidade. No entanto, para o domínio multirregião não consideramos $\frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)}$ na subtração, como mostramos a seguir,

$$\frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} \bar{k}(y, \tau) \bar{\Phi}(\tau) = \frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} \bar{k}(y, \tau) [\bar{\Phi}(\tau) - \bar{\Phi}(y)] + \frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} \bar{k}(y, \tau) \bar{\Phi}(y). \quad (3.36)$$

Logo reescrevemos a equação (3.17) da forma

$$\bar{\Phi}(y) = \int_0^L \frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} \bar{k}(y, \tau) [\bar{\Phi}(\tau) - \bar{\Phi}(y)] d\tau + \bar{\Phi}(y) \bar{R}(y) + \bar{g}(y), \quad (3.37)$$

onde $\bar{R}(y) = \int_0^L \frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} \bar{k}(y, \tau) d\tau$.

Assim como no caso contínuo nós solucionamos analiticamente a integral com respeito a variável τ da função $\bar{R}(y)$. Este processo facilitou na implementação do algoritmo e também melhorou os resultados numéricos.

3.4.2 Tratamento analítico da parte singular

O núcleo da função $\bar{R}(y)$ apresenta uma singularidade quando $\tau = x$, a remoção dessa singularidade é feita resolvendo analiticamente a integral na variável τ em cada intervalo do problema multirregião. Assim reescrevemos a função $\bar{R}(y)$ como

$$\begin{aligned} \bar{R}(y) &= \sum_{i=1}^n \frac{\bar{\sigma}_{s_i}}{\bar{\sigma}_{t_i}} \int_{y_i}^{y_{i+1}} \int_0^1 \left[\frac{\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau-y)} + \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L+\tau-y)}}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \right. \\ &+ \left. \frac{\rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(y+\tau)} + \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau+y)} + \frac{e^{-\frac{1}{\mu}|\tau-y|}}{2\mu}}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \right] d\mu d\tau. \\ &= \int_0^1 \sum_{i=1}^n \frac{\bar{\sigma}_{s_i}}{\bar{\sigma}_{t_i}} \bar{R}_\tau^i(y) d\mu \end{aligned} \quad (3.38)$$

sendo

$$\begin{aligned} \bar{R}_\tau^i(y) &= \int_{y_i}^{y_{i+1}} \left[\frac{\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau-y)} + \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L+\tau-y)}}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \right. \\ &+ \left. \frac{\rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(y+\tau)} + \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau+y)} + \frac{e^{-\frac{1}{\mu}|\tau-y|}}{2\mu}}{2\mu \left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \right] d\tau. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Para facilitar vamos reescrever a função $\bar{R}_\tau^i(y)$ como

$$\bar{R}_\tau^i(y) = \bar{R}_1^i(y) + \bar{R}_2^i(y) + \bar{R}_3^i(y) + \bar{R}_4^i(y) + \bar{R}_5^i(y). \quad (3.40)$$

A solução para a função $\bar{R}_1^i(y)$ é dado por,

$$\begin{aligned}\bar{R}_1^i(y) &= \frac{\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y)}}{2\left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \int_{x_i}^{x_{i+1}} \frac{e^{\frac{1}{\mu}\tau}}{\mu} d\tau \\ &= \frac{\rho_L(-\mu)}{2\left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \left[e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y-y_{i+1})} - e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y-y_i)} \right]. \quad (3.41)\end{aligned}$$

A função $\bar{R}_2^i(y)$ tem como solução

$$\begin{aligned}\bar{R}_2^i(y) &= \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y)}}{2\left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \int_{y_i}^{y_{i+1}} \frac{e^{-\frac{1}{\mu}\tau}}{\mu} d\tau \\ &= \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)}{2\left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \left[e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y+y_i)} - e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y+y_{i+1})} \right]. \quad (3.42)\end{aligned}$$

Resolvendo a função $\bar{R}_3^i(y)$, obtemos

$$\begin{aligned}\bar{R}_3^i(y) &= \frac{1}{2} \int_{y_i}^{y_{i+1}} \frac{\rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(y+\tau)}}{\mu\left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} d\tau \\ &= \frac{\rho_0(\mu)}{2\left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \left[e^{-\frac{1}{\mu}(y+y_i)} - e^{-\frac{1}{\mu}(y+y_{i+1})} \right]. \quad (3.43)\end{aligned}$$

Integrando com respeito a variável τ a função $\bar{R}_4^i(y)$ temos

$$\begin{aligned}\bar{R}_4^i(y) &= \int_{y_i}^{y_{i+1}} \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau+y)}}{2\mu\left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} d\tau \\ &= \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)}{2\left(1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}\right)} \left[e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y_{i+1}+y)} - e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y_i+y)} \right]. \quad (3.44)\end{aligned}$$

A função $\bar{R}_5^i(y)$ é reescrita inicialmente como a soma de duas integrais cujos intervalos de integração são $(0, y)$ e (y, L) . Solucionando cada uma dessas integrais obtemos a seguinte solução.

Se $y_i \leq y \leq y_{i+1}$, temos:

$$\begin{aligned}
\bar{R}_5^i(y) &= \int_{y_i}^{y_{i+1}} \frac{e^{-\frac{1}{\mu}|\tau-y|}}{2\mu} d\tau \\
&= \int_{y_i}^y \frac{e^{-\frac{1}{\mu}(-\tau+y)}}{2\mu} d\tau + \int_y^{y_{i+1}} \frac{e^{-\frac{1}{\mu}(\tau-y)}}{2\mu} d\tau \\
&= \frac{1}{2} \left(2 - e^{-\frac{1}{\mu}(-y_i+y)} - e^{-\frac{1}{\mu}(y_{i+1}-y)} \right). \tag{3.45}
\end{aligned}$$

Se $y < y_i$, temos:

$$\begin{aligned}
\bar{R}_5^i(y) &= \int_{y_i}^{y_{i+1}} \frac{e^{-\frac{1}{\mu}|\tau-y|}}{2\mu} d\tau \\
&= \int_{y_i}^{y_{i+1}} \frac{e^{-\frac{1}{\mu}(\tau-y)}}{2\mu} d\tau \\
&= \frac{1}{2} \left(e^{-\frac{1}{\mu}(y_i-y)} - e^{-\frac{1}{\mu}(y_{i+1}-y)} \right). \tag{3.46}
\end{aligned}$$

Se $y > y_{i+1}$, temos:

$$\begin{aligned}
\bar{R}_5^i(y) &= \int_{y_i}^{y_{i+1}} \frac{e^{-\frac{1}{\mu}|\tau-y|}}{2\mu} d\tau \\
&= \int_{y_i}^{y_{i+1}} \frac{e^{-\frac{1}{\mu}(-\tau+y)}}{2\mu} d\tau \\
&= \frac{1}{2} \left(e^{-\frac{1}{\mu}(-y_{i+1}+y)} - e^{-\frac{1}{\mu}(-y_i+y)} \right). \tag{3.47}
\end{aligned}$$

Isto é

$$\bar{R}_5^i(y) = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(e^{-\frac{1}{\mu}(y_i-y)} - e^{-\frac{1}{\mu}(y_{i+1}-y)} \right) & \text{se } y < y_i \\ \frac{1}{2} \left(2 - e^{-\frac{1}{\mu}(y-y_i)} - e^{-\frac{1}{\mu}(y_{i+1}-y)} \right) & \text{se } y_i \leq y \leq y_{i+1} \\ \frac{1}{2} \left(e^{-\frac{1}{\mu}(y-y_{i+1})} - e^{-\frac{1}{\mu}(y-y_i)} \right) & \text{se } y > y_{i+1}. \end{cases}$$

3.4.3 Método de Nyström

Com a remoção da singularidade do operador integral é possível agora aproximar o operador integral da função (3.37) aplicando o método de Nyström.

Portanto temos,

$$\bar{\Phi}(y) \approx \sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq y}}^N w(\tau_j) \bar{k}(y, \tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau_j)}{\bar{\sigma}_t(\tau_j)} [\bar{\Phi}(\tau_j) - \bar{\Phi}(y)] + \bar{\Phi}(y) \bar{R}(y) + \bar{g}(y), \tag{3.48}$$

onde $\{w(\tau_j)\}_{j=1}^N$ que são os pesos da quadratura numérica e $\{\tau\}_{j=1}^N$ são as abscissas.

3.4.4 Cálculo do fluxo escalar na malha

Avaliando a equação para o fluxo escalar dada em (3.48) em cada ponto i da malha com $i = 1, \dots, N$ obtemos (3.48) da forma

$$\bar{\Phi}_i \approx \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N w_j \bar{k}_{ij} \frac{\bar{\sigma}_{sj}}{\bar{\sigma}_{tj}} [\bar{\Phi}_j - \bar{\Phi}_i] + \bar{\Phi}_i \bar{R}_i + \bar{g}_i, i = 1, \dots, N, \quad (3.49)$$

onde $\bar{\Phi}(y_i) = \bar{\Phi}_i$, $\bar{\sigma}_s(y_i) = \bar{\sigma}_{si}$, $\bar{k}(y_i, \tau_j) = \bar{k}_{i,j}$, $\bar{R}(y_i) = \bar{R}_i$, $\bar{g}(y_i) = \bar{g}_i$ e $w(\tau_j) = w_j$.

A partir da equação (3.49) podemos determinar um sistema para o fluxo escalar:

$$\begin{bmatrix} (1 - \bar{R}_1 + \bar{c}_1) & -w_2 k_{12} & \cdots & -w_N k_{1N} \\ -w_1 k_{21} & (1 - \bar{R}_2 + \bar{c}_2) & \cdots & -w_N k_{2N} \\ \vdots & \vdots & \cdots & \vdots \\ -w_1 k_{N1} & -w_2 k_{N2} & \cdots & (1 - \bar{R}_N + \bar{c}_N) \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\Phi}_1 \\ \bar{\Phi}_2 \\ \vdots \\ \bar{\Phi}_N \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \bar{g}_1 \\ \bar{g}_2 \\ \vdots \\ \bar{g}_N \end{bmatrix}, \quad (3.50)$$

onde $\bar{c}_i = \sum_{\substack{j=1 \\ j \neq i}}^N w_j k_{ij} \frac{\bar{\sigma}_{sj}}{\bar{\sigma}_{tj}}, i = 1, 2, 3, \dots, N$.

Observe que se tomarmos a seção de choque de espalhamento nula, ou seja, $\bar{\sigma}_s = 0$, a matriz principal do sistema dado em (3.50) é uma matriz identidade e assim teremos o sistema com solução única. Podemos ainda estender a inversibilidade dessa matriz em torno de uma vizinhança de $\bar{\sigma}_s = 0$.

3.4.5 Interpolação

Assim como no caso para parâmetros contínuos nós determinamos aqui a interpolação da equação (3.48) a fim de compararmos os resultados para o fluxo escalar, uma vez que as malhas das quadraturas de Gauss-Legendre e Boole são distintas.

Para determinarmos a interpolação vamos iniciar reescrevendo a equação (3.48) como,

$$\bar{\Phi}(y) \approx \sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq y}}^N w(\tau_j) \bar{k}(y, \tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau_j)}{\bar{\sigma}_t(\tau_j)} \bar{\Phi}(\tau_j) - \sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq y}}^N w(\tau_j) \bar{k}(y, \tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau_j)}{\bar{\sigma}_t(\tau_j)} \bar{\Phi}(y) + \bar{\Phi}(y) \bar{R}(y) + \bar{g}(y) \quad (3.51)$$

e na sequência isolar a função $\bar{\Phi}(y)$ na equação (3.51) para obtemos a interpolação,

$$\bar{\Phi}(y) \approx \frac{\sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq y}}^N w(\tau_j) \bar{k}(y, \tau_j) \bar{\Phi}(\tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau_j)}{\bar{\sigma}_t(\tau_j)} + \bar{g}(y)}{1 + \sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq y}}^N w(\tau_j) \bar{k}(y, \tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau_j)}{\bar{\sigma}_t(\tau_j)} - \bar{R}(y)}. \quad (3.52)$$

4 RESULTADOS NUMÉRICOS DO PROBLEMA DE TRANSPORTE COM ESPALHAMENTO ISOTRÓPICO

Neste capítulo validamos as metodologias dos capítulos 2 e 3, que chamaremos de metodologias 1 e 2, respectivamente, através da simulação de diferentes situações problemas para a equação de transporte isotrópica em domínio não homogêneo, cujos resultados numéricos são comparados com dados da literatura e entre as próprias metodologias. Também analisamos o desempenho das quadraturas de Gauss-Legendre e regra de Boole e em alguns casos comparamos o tempo computacional das duas metodologias. Todos os tempos aqui apresentados, referem-se ao tempo de parede e foram obtidos tomando a média dos tempos de, pelo menos, três repetições.

Na primeira seção deste capítulo descrevemos detalhes da implementação numérica dos algoritmos das metodologias 1 e 2. Na seção 4.2, validamos as metodologias para o problema de transporte em domínio homogêneo, na seção 4.3 para um domínio multirregião e por fim nas seções 4.4 e 4.5 consideramos um meio não-homogêneo.

4.1 Implementação numérica

Os resultados numéricos apresentados neste trabalho foram determinados através de algoritmos implementados em linguagem de programação C e simulados em um computador Intel Core i7. Para a solução dos sistemas lineares dados em (2.65), (2.88), (3.33) e (3.50) aplicamos o método de decomposição LU, cuja rotina utilizada está disponível em GNU Scientific Library (GSL) [21]. Desta mesma biblioteca utilizamos as rotinas de integração numéricas para a resolução dos termos

integrais do sistema. Todas as integrações foram realizadas com tolerâncias relativas e absolutas menores que 10^{-10} .

4.2 Domínio homogêneo

A fim de validar as metodologias 1 e 2 desenvolvidas nesse trabalho, iniciamos comparando nossos resultados numéricos com os dados apresentados nos trabalhos de Dalmolin *et al.* [14] e Nunes e Barros [32] para o problema de transporte em domínio homogêneo. As soluções para cada problema foram geradas aplicando as quadraturas de Gauss-Legendre e regra Boole.

Nas simulações, ambas metodologias geraram os mesmo resultados numéricos portanto, apresentamos esses dados somente uma vez. Os problemas resolvidos aqui são:

- Problema 1: Comprimento da placa $L = 1$ cm, seções de choque $\sigma_t(x) = \sigma_s(x) = 1 \text{ cm}^{-1}$, coeficientes de reflexão $\rho_0(\mu) = \rho_L(\mu) = 0$, contribuição da fronteira $B_0(\mu) = B_L(\mu) = \frac{1}{8}$ e termo fonte $S(x) = \frac{1}{8}$.
- Problema 2: Comprimento da placa $L = 50$ cm, seções de choque $\sigma_t(x) = 1 \text{ cm}^{-1}$ e $\sigma_s(x) = 0.97 \text{ cm}^{-1}$, coeficientes de reflexão $\rho_0(\mu) = \rho_L(\mu) = 0$, contribuição da fronteira $B_0(\mu) = B_L(\mu) = 2$ e termo fonte $S(x) = 0$.

No problema 1, proposto por Dalmolin *et al.* [14], a equação de transporte em domínio homogêneo também é solucionada pelo método de Nyström juntamente com a técnica de remoção de singularidades do operador integral. Neste trabalho os resultados numéricos foram comparados com as soluções determinadas por Vargas *et al.* [45], Azevedo *et al.* [4] e com a solução exata disponível em [45]. No trabalho publicado por Vargas *et al.* [45] a solução deste problema é obtida pelo método LTS_N para $N = 300$ e em Azevedo *et al.* [4] pelo método GFD .

No problema 2, consideramos os parâmetros da simulação apresentados por Nunes e Barros [32]. Neste trabalho três diferentes métodos iterativos foram aplicado na solução do sistema de equações S_N para $N = 8$: método Diamond Difference (DD), método Degrau(D) e método Degrau Característico (DC).

Nas tabelas 4.1 e 4.2 apresentamos os resultados numéricos obtidos para o problema 1 e comparamos os mesmo com os dados apresentados no trabalho de Dalmolin *et al.* [14] e com a solução exata [45].

Tabela 4.1: Comparação dos resultados numéricos para o fluxo escalar do problema 1, $\Phi(x)$, gerados pelas quadraturas de Gauss-Legendre em um meio homogêneo com os resultados publicados por Dalmolin *et al.* [14] e com a solução exata [45].

x	Exata ^[45]	Nyström ^[14]	N = 101	N = 201	N = 401	N = 801	N = 1601
0.0	0.516842	0.516842	0.516842	0.516842	0.516842	0.516842	0.516842
0.1	0.600637	0.600637	0.600635	0.600637	0.600637	0.600637	0.600637
0.2	0.647999	0.647999	0.647994	0.648000	0.647999	0.647999	0.647999
0.3	0.678718	0.678718	0.678721	0.678718	0.678718	0.678718	0.678718
0.4	0.696308	0.696308	0.696308	0.696308	0.696308	0.696308	0.696308
0.5	0.702056	0.702056	0.702056	0.702056	0.702056	0.702056	0.702056

Tabela 4.2: Comparação dos resultados numéricos para o fluxo escalar do problema 1, $\Phi(x)$, gerados pelas regra de Boole em um meio homogêneo com os resultados publicados por Dalmolin *et al.* [14] e com a solução exata [45].

x	Exata ^[45]	Nyström ^[14]	N = 101	N = 201	N = 401	N = 801	N = 1601
0.0	0.516842	0.516842	0.516830	0.516838	0.516841	0.516841	0.516842
0.1	0.600637	0.600637	0.600633	0.600636	0.600637	0.600637	0.600637
0.2	0.647999	0.647999	0.647996	0.647998	0.647999	0.647999	0.647999
0.3	0.678718	0.678718	0.678715	0.678717	0.678718	0.678718	0.678718
0.4	0.696308	0.696308	0.696305	0.696307	0.696308	0.696308	0.696308
0.5	0.702056	0.702056	0.702053	0.702055	0.702055	0.702055	0.702056

Os resultados numéricos, dados nas tabelas 4.1 e 4.2, apresentaram o mesmo comportamento da solução determinada por Dalmolin *et al.* [14], ou seja, temos a mesma solução para o mesmo número de pontos. Com relação ao desempenho dos esquemas de quadratura observamos que para a quadratura de Gauss-Legendre obtemos a solução exata para 401 pontos enquanto que na regra de Boole obtemos a mesma solução exata quando consideramos 1601 pontos. Para ambas metodologias os resultados numéricos obtidos foram idênticos no entanto, a metodologia 2 apresentou melhor desempenho computacional sendo até 8 vezes mais rápida na determinação da solução, como podemos observar na tabela 4.3.

Tabela 4.3: Tempo computacional do problema 1.

N	Quadratura de Gauss-Legendre		Regra Boole	
	Metodologia 1	Metodologia 2	Metodologia 1	Metodologia 2
101	0.9s	0.2s	1s	0.2s
201	3s	0.4s	3s	0.5s
401	11s	1s	11s	1s
801	43s	5s	42s	5s
1601	164s	19s	162s	20s

Os resultados numéricos apresentados nas tabelas 4.4 e 4.5 foram determinados considerando os parâmetros do problema 2 e comparados com a solução dada no trabalho de Nunes e Barros [32].

Tabela 4.4: Comparação dos resultados numéricos para o fluxo escalar do problema 2, $\Phi(x)$, gerados pela quadratura de Gauss-Legendre em um meio homogêneo com os resultados publicados por Nunes e Barros [32] .

x	$DD^{[32]}$	$D^{[32]}$	$DC^{[32]}$	$N=501$	$N=1001$	$N=2001$	$N=4001$	$N=8001$	$N=16001$
0.0	1.704731	1.703453	1.704683	1.704733	1.704732	1.704732	1.704732	1.704732	1.704732
25.0	0.001956	0.002012	0.001958	0.001954	0.001955	0.001955	0.001955	0.001955	0.001955
50.0	1.704731	1.703435	1.704683	1.704733	1.704732	1.704732	1.704732	1.704732	1.704732

Tabela 4.5: Comparação dos resultados numéricos para o fluxo escalar do problema 2, $\Phi(x)$, gerados pela regra de Boole em um meio homogêneo com os resultados publicados por Nunes e Barros [32] .

x	$DD^{[32]}$	$D^{[32]}$	$DC^{[32]}$	$N=501$	$N=1001$	$N=2001$	$N=4001$	$N=8001$	$N=16001$
0.0	1.704731	1.703453	1.704683	1.705322	1.704897	1.704778	1.704745	1.704735	1.704733
25.0	0.001956	0.002012	0.001958	0.001954	0.001955	0.001955	0.001955	0.001955	0.001955
50.0	1.704731	1.703435	1.704683	1.705322	1.704897	1.704778	1.704745	1.704735	1.704733

No trabalho desenvolvido por Nunes e Barros o método Diamond Difference apresentou os melhores resultados, quando comparado aos outros métodos aplicados pelos autores na solução do problema de transporte. Assim, comparando a nossa solução com o método DD percebemos que para ambas quadraturas, Gauss-Legendre e regra de Boole, os resultados numéricos apresentam uma boa ordem de precisão.

O fluxo escalar calculado pela quadratura de Gauss-Legendre apresentou cinco dígitos significativos e obtivemos a mesma precisão quando aplicamos a regra de Boole. Com relação ao desempenho das quadraturas numéricas observamos que com apenas 501 pontos obtivemos cinco dígitos corretos com a quadratura de Gauss-Legendre já para a regra de Boole esta mesma precisão foi determinada para

8001 pontos. Simulamos este problema utilizando as metodologias 1 e 2 e para ambas obtivemos os mesmos resultados numéricos. No entanto, nas simulações utilizando a metodologia 2 o custo computacional foi menor.

4.3 Domínio multirregião

Nesta seção validamos as metodologias 1 e 2 simulando dois problemas em domínio multirregião. Na primeira simulação consideramos $\sigma_t(x)$ fixo e os demais parâmetros variando de acordo com a região do problema. Os resultados numéricos desse problema podem ser encontrados nos trabalhos de Nunes e Barros [32] e Prolo e Rodrigues [35]. E a segunda simulação consiste em um problema proposto por Reed [36] onde a seção de choque macroscópica total também varia nas quatro regiões do problema.

Os problemas simulados nesta seção são:

- Problema 3: Domínio $L = 40$ cm e condições de contorno $\Psi(0, \mu) = 1$ e $\Psi(L, \mu) = 0$. As funções $\sigma_t(x)$, $\sigma_s(x)$ e $S(x)$ para cada região são apresentadas na tabela 4.6.

Tabela 4.6: Parâmetros do problema multirregião 3

Região	1	2	3
$S(x)$	0	0	1
$\sigma_t(x)$	1	1	1
$\sigma_s(x)$	0.97	0.95	0.99
Espessura	$0 \leq x \leq 15$	$15 \leq x \leq 30$	$30 \leq x \leq 40$

- Problema 4: Domínio $L = 8$ cm, condições de contorno $\Psi(0, \mu) = 1$ e $\Psi(L, \mu) = 0$ e os parâmetros para as funções $\sigma_t(x)$, $\sigma_s(x)$ e $\sigma_a(x)$ em cada região são apresentadas na tabela 4.7. Na primeira região temos uma fonte de magnitude 50.0 e na região de $5.0 \text{ cm} < x < 6.0 \text{ cm}$ uma fonte de magnitude 1.0.

Tabela 4.7: Parâmetros do problema multirregião 4.

Região	1	2	3	4
$\sigma_a(x)$	50.0	5.0	0.0	0.1
$\sigma_t(x)$	50.0	5.0	0.0	1.0
$\sigma_s(x)$	0.0	0.0	0.0	0.9
Espessura	$0 \leq x \leq 2$	$2 \leq x \leq 3$	$3 \leq x \leq 5$	$5 \leq x \leq 8$

Nas tabelas 4.8 e 4.9 apresentamos os resultados numéricos do problema 3 aplicando as quadraturas de Gauss-Legendre e regra de Boole, respectivamente. Compramos nossos resultados numéricos com os obtidos pelos métodos Diamond Difference (DD), Degrau(D) e Degrau Característico (DC), apresentados no trabalho de Nunes e Barros [32] e com o método ADO apresentado no trabalho de Prolo e Rodrigues [35].

Tabela 4.8: Comparação dos resultados numéricos para o fluxo escalar do problema 3 gerados pela quadratura de Gauss-Legendre com os resultados publicados por Nunes e Barros [32] e Prolo e Rodrigues [35].

x	$DD^{[32]}$	$D^{[32]}$	$DC^{[32]}$	$ADO^{[35]}$	$N=1001$	$N=2001$	$N=4001$	$N=8001$	$N=16001$
0.0	0.852638	0.851075	0.850716	0.852637	0.852639	0.852638	0.852638	0.852638	0.852638
20.0	0.481766	0.512658	0.504515	0.481821	0.484256	0.482214	0.482542	0.482026	0.482108
40.0	7.090416	7.126999	7.245023	7.090392	7.095029	7.091948	7.092451	7.091686	7.091813

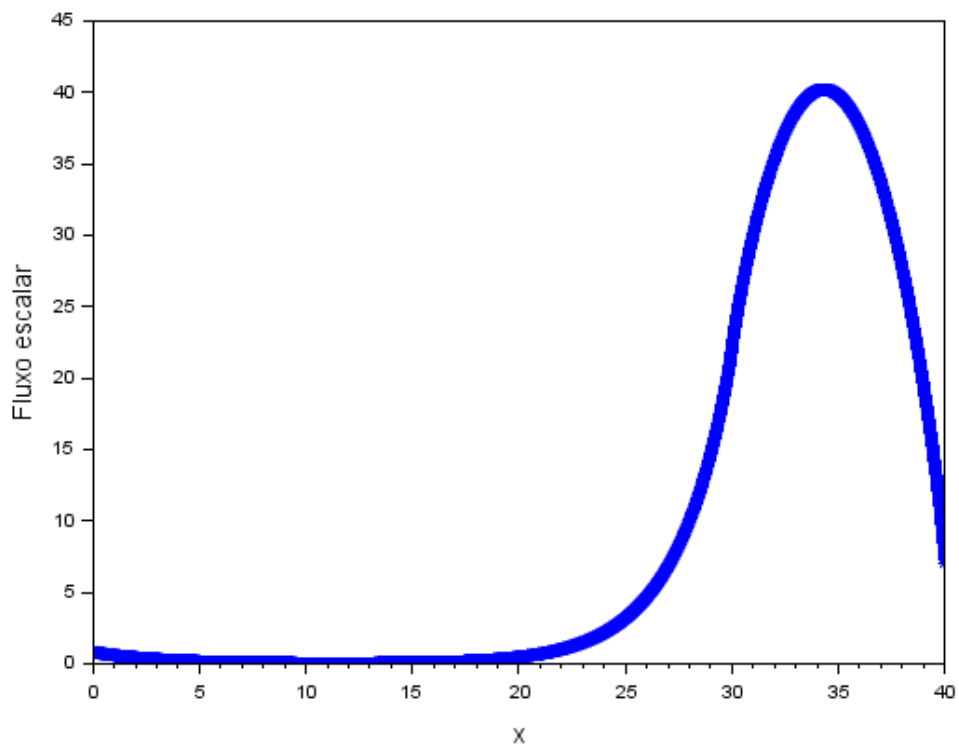


Figura 4.1: Gráfico para o fluxo escalar do problema multirregião 3.

Tabela 4.9: Comparação dos resultados numéricos para o fluxo escalar do problema 3 gerados pela regra de Boole com os resultados publicados por Nunes e Barros [32] e Prolo e Rodrigues [35].

x	$DD^{[32]}$	$D^{[32]}$	$DC^{[32]}$	$ADO^{[35]}$	$N=1001$	$N=2001$	$N=4001$	$N=8001$	$N=16001$
0.0	0.852638	0.851075	0.850716	0.852637	0.852693	0.852653	0.852642	0.852639	0.852638
20.0	0.481766	0.512658	0.504515	0.481821	0.481965	0.481968	0.481969	0.481969	0.481969
40.0	7.090416	7.126999	7.245023	7.090392	7.088971	7.090871	7.091401	7.091546	7.091586

Nossos resultados numéricos, apontados nas tabelas 4.8 e 4.9, estão na mesma ordem que os determinados por Nunes e Barros, quando comparados ao método DD, método que apresentou o melhor desempenho no trabalho [32]. Além disso, nossa solução tem o mesmo comportamento gráfico que a solução apresentada no trabalho de Prolo e Rodrigues [35]. Analisando o desempenho dos esquemas de quadratura na solução do problema multirregião observamos o mesmo comportamento do caso homogêneo. Para a quadratura de Gauss-Legendre os melhores resultados foram obtidos para 501 pontos enquanto que para regra de Boole foram necessários 8001 pontos.

Quando comparamos o desempenho das metodologias 1 e 2 observamos que, apesar das duas gerarem a mesma solução, o custo computacional da metodologia 2 é menor, o que também pode ser observado pelo tempo computacional, tabela 4.10, para cada valor de N considerado na simulação.

O segundo problema multirregião que simulamos foi proposto por Reed [36] e está definido em um placa unidimensional composta de quatro regiões cujos parâmetros estão descritos no problema 4. Este problema foi posteriormente estudado por Garcia e Siewert [22] e sua solução determinada pelo método F_N . Recentemente esse mesmo problema foi solucionado por Schulz [42] utilizando o método DD.

Tabela 4.10: Tempo computacional do problema 3

N	Quadratura de Gauss-Legendre		Regra Boole	
	Metodologia 1	Metodologia 2	Metodologia 1	Metodologia 2
501	4s	0.5s	4s	0.5s
1001	13s	2s	13s	2s
2001	52s	8s	11s	8s
4001	448s	41s	222s	40s
8001	891s	223s	879s	230s
16001	4095s	1511s	4095s	1489s

Na simulação do problema 4 a terceira região do problema foi desconsiderada, visto que a mesma é uma região de vácuo e não possui fonte externa. Assim, as regiões do problema foram reescritas da seguinte forma: $3.0 \text{ cm} < x < 4.0 \text{ cm}$ como a terceira região do problema e $4.0 \text{ cm} < x < 6.0 \text{ cm}$ como a região 4 e reorganizamos os parâmetros do problema da seguinte forma:

Tabela 4.11: Parâmetros do problema multirregião 4 reescrito.

Região	1	2	3	4
$S(x)$	50	0	1	0
$\sigma_t(x)$	50	5	1	1
$\sigma_s(x)$	0	0	0.9	0.9
Espessura	$0 \leq x \leq 2$	$2 \leq x \leq 3$	$3 \leq x \leq 4$	$4 \leq x \leq 6$

Tabela 4.12: Comparação do fluxo escalar do problema 4 gerado pela metodologia 1 considerando quadratura de Gauss-Legendre com os resultados publicados por Garcia e Siewert [22] e Schulz [42].

x	F_N	DD	N=501	N=1001	N=2001	N=4001	N=8001	N=16001
0.00	1.000	1.000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
1.00	1.000	1.000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
1.90	0.9995	0.9995	0.999506	0.999506	0.999506	0.999506	0.999506	0.999506
1.95	0.9902	0.9902	0.990160	0.990160	0.990160	0.990160	0.990160	0.990160
1.99	0.8372	0.8372	0.837236	0.837236	0.837236	0.837236	0.837236	0.837236
2.00	0.5010	0.5010	0.500992	0.500993	0.500993	0.500993	0.500993	0.500992
2.05	0.2602	0.2602	0.260192	0.260192	0.260192	0.260192	0.260192	0.260192
2.09	0.1798	0.1798	0.179791	0.179791	0.179791	0.179791	0.179791	0.179791
2.10	0.1651	0.1651	0.165099	0.165100	0.165100	0.165100	0.165100	0.165100
2.50	0.03009	0.03009	0.030091	0.030093	0.030094	0.030094	0.030094	0.030095
2.90	0.3520	0.3520	0.351950	0.351991	0.352002	0.352006	0.352007	0.352021
2.95	0.5650	0.5650	0.564908	0.564981	0.565003	0.565009	0.565011	0.565034
2.99	0.9151	0.91510	0.914885	0.915049	0.915096	0.915109	0.915113	0.915156
5.00	1.106	1.1063	1.105829	1.106210	1.106329	1.106366	1.106377	1.106424
5.10	1.441	1.4414	1.441110	1.441312	1.441344	1.441360	1.441364	1.441437
5.50	1.941	1.9410	1.940961	1.941024	1.941048	1.941055	1.941057	1.941109
6.00	1.634	1.6339	1.634003	1.633949	1.633938	1.633941	1.633946	1.634144
7.00	0.7085	0.7085	0.708500	0.708518	0.708526	0.708529	0.708530	0.708553
8.00	0.2225	0.2225	0.222494	0.222501	0.222503	0.222504	0.222505	0.222509

Tabela 4.13: Comparação do fluxo escalar do problema 4 gerado pela metodologia 1 considerando regra de Boole com os resultados publicados por Garcia e Siewert [22] e Schulz [42].

x	F_N	DD	N=501	N=1001	N=2001	N=4001	N=8001	N=16001
0.00	1.000	1.000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
1.00	1.000	1.000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
1.90	0.9995	0.9995	0.999506	0.999506	0.999506	0.999506	0.999506	0.999506
1.95	0.9902	0.9902	0.990160	0.990160	0.990160	0.990160	0.990160	0.990160
1.99	0.8372	0.8372	0.837236	0.837236	0.837236	0.837236	0.837236	0.837236
2.00	0.5010	0.5010	0.500993	0.500993	0.500993	0.500993	0.500993	0.500993
2.05	0.2602	0.2602	0.260192	0.260192	0.260192	0.260192	0.260192	0.260192
2.09	0.1798	0.1798	0.179791	0.179791	0.179791	0.179791	0.179791	0.179791
2.10	0.1651	0.1651	0.165100	0.165100	0.165100	0.165100	0.165100	0.165100
2.50	0.03009	0.03009	0.030095	0.030094	0.030094	0.030094	0.030094	0.030094
2.90	0.3520	0.3520	0.352021	0.352003	0.352007	0.352007	0.352007	0.352007
2.95	0.5650	0.5650	0.565034	0.565004	0.565011	0.565011	0.565011	0.565011
2.99	0.9151	0.9151	0.915156	0.915102	0.915113	0.915114	0.915115	0.915115
5.00	1.106	1.1063	1.105196	1.105603	1.106002	1.106193	1.106288	1.106335
5.10	1.441	1.4414	1.441686	1.441362	1.441361	1.441366	1.441365	1.441366
5.50	1.941	1.9410	1.941225	1.941042	1.941060	1.941058	1.941059	1.941059
6.00	1.634	1.6339	1.634213	1.633892	1.633959	1.633943	1.633948	1.633946
7.00	0.7085	0.7085	0.708584	0.708525	0.708530	0.708530	0.708530	0.708530
8.00	0.2225	0.2225	0.222518	0.222500	0.222505	0.222504	0.222505	0.222505

Para simularmos o problema 4 aplicando a metodologia 2 nós consideramos a mudança de variável

$$y(x) = \int_0^x \sigma_t(\tau) d\tau, \quad (4.1)$$

proposta na metodologia, nos parâmetros do problema. Considerando essa mudança de variável temos que o comprimento do domínio do problema será $L=108$ cm o qual é dividido da seguinte forma: região 1 dada no intervalo $0 \text{ cm} \leq x \leq 100 \text{ cm}$, região 2, $100 \text{ cm} \leq x \leq 105 \text{ cm}$, região 3, $105 \text{ cm} \leq x \leq 106 \text{ cm}$ e para a quarta região ,

$106 \text{ cm} \leq x \leq 108 \text{ cm}$. A função $\bar{\sigma}_s(y)$ na primeira e segunda região é igual a zero e nas demais regiões é igual a 0.9 já o termo fonte é 1 nas regiões 1 e 3 e zero nas demais.

Tabela 4.14: Comparação do fluxo escalar do problema 4 gerado pela metodologia 2 considerando quadratura de Gauss-Legendre com os resultados publicados por Garcia e Siewert [22] e Schulz [42].

x	F_N	DD	N=501	N=1001	N=2001	N=4001	N=8001	N=16001
0.00	1.000	1.000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
1.00	1.000	1.000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
1.90	0.9995	0.9995	0.999506	0.999505	0.999506	0.999506	0.999506	0.999506
1.95	0.9902	0.9902	0.990160	0.990159	0.990160	0.990159	0.990160	0.990160
1.99	0.8372	0.8372	0.837237	0.837235	0.837236	0.837235	0.837236	0.837236
2.00	0.5010	0.5010	0.500990	0.500995	0.500992	0.500994	0.500993	0.500993
2.05	0.2602	0.2602	0.260185	0.260200	0.260191	0.260197	0.260193	0.260193
2.09	0.1798	0.1798	0.179780	0.179803	0.179790	0.179799	0.179792	0.179792
2.10	0.1651	0.1651	0.165088	0.165113	0.165098	0.165108	0.165101	0.165101
2.50	0.03009	0.03009	0.029908	0.030304	0.030069	0.030221	0.030111	0.030108
2.90	0.3520	0.3520	0.349189	0.355010	0.351642	0.353859	0.352258	0.352215
2.95	0.5650	0.5650	0.561636	0.568342	0.564592	0.567155	0.565312	0.565258
2.99	0.9151	0.9151	0.914152	0.914702	0.915094	0.915367	0.915206	0.915177
5.00	1.106	1.1063	1.110530	1.098301	1.107211	1.102728	1.106006	1.106020
5.10	1.441	1.4414	1.453461	1.425680	1.443172	1.432682	1.440275	1.440442
5.50	1.941	1.9410	1.955305	1.925221	1.942776	1.932284	1.939978	1.940140
6.00	1.634	1.6339	1.644931	1.624400	1.634663	1.629035	1.633363	1.633448
7.00	0.7085	0.7085	0.711364	0.705684	0.708795	0.706999	0.708354	0.708380
8.00	0.2225	0.2225	0.223292	0.221737	0.222575	0.222085	0.222460	0.222466

Tabela 4.15: Comparação do fluxo escalar do problema 4 gerado pela metodologia 2 considerando regra de Boole com os resultados publicados por Garcia e Siewert [22] e Schulz [42].

x	F_N	DD	N=501	N=1001	N=2001	N=4001	N=8001	N=16001
0.00	1.000	1.000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
1.00	1.000	1.000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000	1.000000
1.90	0.9995	0.9995	0.999506	0.999506	0.999506	0.999506	0.999506	0.999506
1.95	0.9902	0.9902	0.990160	0.990160	0.990160	0.990159	0.990160	0.990160
1.99	0.8372	0.8372	0.837237	0.837238	0.837236	0.837235	0.837236	0.837236
2.00	0.5010	0.5010	0.500987	0.500994	0.500994	0.500994	0.500993	0.500992
2.05	0.2602	0.2602	0.260179	0.260193	0.260195	0.260197	0.260193	0.260192
2.09	0.1798	0.1798	0.179772	0.179791	0.179795	0.179799	0.179791	0.179791
2.10	0.1651	0.1651	0.165078	0.165099	0.165104	0.165108	0.165100	0.165099
2.50	0.03009	0.03009	0.029777	0.030069	0.030163	0.030221	0.030100	0.030087
2.90	0.3520	0.3520	0.347189	0.351781	0.353107	0.353859	0.352104	0.351897
2.95	0.5650	0.5650	0.558971	0.565194	0.566461	0.567155	0.565140	0.564881
2.99	0.9151	0.9151	0.912207	0.917572	0.916301	0.915367	0.915223	0.915088
5.00	1.106	1.1063	1.111896	1.112269	1.106784	1.102728	1.106423	1.106585
5.10	1.441	1.4414	1.477071	1.446442	1.438398	1.432682	1.441043	1.441883
5.50	1.941	1.9410	1.954956	1.950887	1.937182	1.932284	1.940790	1.941560
6.00	1.634	1.6339	1.611912	1.645807	1.630513	1.629035	1.633780	1.634231
7.00	0.7085	0.7085	0.708400	0.710421	0.708037	0.706999	0.708492	0.708614
8.00	0.2225	0.2225	0.220057	0.223027	0.222216	0.222085	0.222489	0.222524

Tabela 4.16: Tempo computacional do problema 4

N	Quadratura de Gauss-Legendre		Regra Boole	
	Metodologia 1	Metodologia 2	Metodologia 1	Metodologia 2
501	5.05s	1.37s	4.57s	0.94s
1001	13.66s	3.37s	12.91s	2.39s
2001	44.69s	10.85s	42.46s	8.74s
4001	171.56s	46.44s	166.19s	40.86s
8001	776.84s	244.27s	7600.67s	231.44s
16001	2274.93s	1587.23s	2349.98s	1460.82s

Apresentamos nas tabelas 4.12 - 4.15 os resultados numéricos para o problema multirregião 4 simulado com as metodologias 1 e 2 aplicando as quadraturas de Gauss-Legendre e Regra de Boole. Na região 1 do problema, que é totalmente absorvedora e com termo fonte, obtivemos a mesma solução quando aplicamos as metodologias 1 e 2 e para ambas quadraturas, em todos os casos a solução convergiu em $N = 1001$. Nas demais regiões do problema, para ambas metodologias, obtivemos a mesma precisão que os dados da literatura com diferenças no último dígito em alguns valores tabelados.

Com relação as quadraturas consideradas nas metodologias, observamos que por estarmos trabalhando em um domínio multirregião a quadratura de Boole apresenta melhor desempenho uma vez que a transição entre as regiões do domínio fazem parte da malha. Analisando o tempo computacional gasto pelas metodologias na solução do problema novamente a metodologia 2 teve um custo computacional menor no entanto, os resultados numéricos apresentados pela metodologia 1 foram melhores.

4.4 Domínio não homogêneo

Nesta seção validamos as metodologias 1 e 2 desenvolvidas com o intuito de solucionar o problema de transporte com espalhamento isotrópico em domínio não homogêneo. A fim de verificarmos a eficiência numérica das metodologias nós simulamos diferentes situações problemas onde $\sigma_t(x)$ e $\sigma_s(x)$ variam conforme uma função linear, quadrático ou exponencial.

Nas simulações consideramos dois esquemas de quadraturas, Gauss-Legendre e regra de Boole, cujas soluções geradas foram idênticas. Tomamos o número de pontos da malha variando entre $N = 501$ e $N = 8001$, intervalo suficiente para obtemos a convergência da solução. Em alguns casos também calculamos o tempo computacional a fim de ter outro parâmetro de comparação entre as metodologias.

Os problemas simulados nessa seção são os seguintes:

Tabela 4.17: Dados para os problemas de transporte em domínio não homogêneo.

Problema	Domínio	$\sigma_t(x)$	$\sigma_s(x)$	$\rho_0(\mu)$	$\rho_L(\mu)$	$B_0(\mu)$	$B_L(\mu)$	$S(x)$
5	1	$x + 1$	1	0.3	0.6	0	0	1/8
6	1	$x + 1$	x	0.3	0.6	0	0	1/8
7	1	$x + 1$	x	0.9	0.5	1/8	1/8	1
8	1	$x^2 + 1$	$x + 1$	0.3	0.5	1	1/8	x
9	1	$\exp(x)$	x	0.5	0.6	1/8	3/8	1

Quando aplicamos a metodologia 2 a mudança de variável dada em (3.1) deve ser considerada nos parâmetros das simulações. Logo, para a metodologia 2, teremos os seguintes parâmetros para os problemas em domínio não homogêneo:

Tabela 4.18: Dados para os problemas de transporte em domínio não homogêneo metodologia 2.

Problema	Domínio	$\sigma_t(x)$	$\sigma_s(x)$	$\rho_0(\mu)$	$\rho_L(\mu)$	$B_0(\mu)$	$B_L(\mu)$	$S(x)$
5	$\frac{3}{2}$	$\sqrt{1+2y}$	1	0.3	0.6	0	0	1/8
6	$\frac{3}{2}$	$\sqrt{1+2y}$	$-1 + \sqrt{1+2y}$	0.3	0.6	0	0	1/8
7	$\frac{3}{2}$	$\sqrt{1+2y}$	$-1 + \sqrt{1+2y}$	0.9	0.5	1/8	1/8	1
8	$\frac{4}{3}$	$a^2 + 1$	$a + 1$	0.3	0.5	1	1/8	a
9	$\exp(1) - 1$	$y - 1$	$\ln(y - 1)$	0.5	0.6	1/8	3/8	1

$$a = \frac{(\sqrt{9y^2+4+3y})^{\frac{1}{3}}}{2^{\frac{1}{3}}} - \frac{2^{\frac{1}{3}}}{(\sqrt{9y^2+4+3y})^{\frac{1}{3}}}.$$

Nas tabelas 4.19, 4.20 e 4.21 apresentamos os resultados numéricos para os problemas 5, 6, e 7 onde a função $\sigma_t(x)$ varia linearmente de acordo com a lei $\sigma_t(x) = x + 1$.

Tabela 4.19: Resultados numéricos do problema 5: comparação entre as soluções determinadas pelas metodologias 1 e 2.

x	$N=501^a$	$N=1001^a$	$N=2001^a$	$N=4001^a$	$N=501^b$	$N=1001^b$	$N=2001^b$	$N=4001^b$
0.0	0.287286	0.287286	0.287286	0.287286	0.287286	0.287286	0.287286	0.287286
0.1	0.331989	0.331989	0.331989	0.331989	0.331989	0.331989	0.331989	0.331989
0.2	0.347312	0.347312	0.347312	0.347312	0.347312	0.347312	0.347312	0.347312
0.3	0.349979	0.349979	0.349979	0.349979	0.349979	0.349979	0.349979	0.349979
0.4	0.344387	0.344387	0.344387	0.344387	0.344388	0.344387	0.344387	0.344387
0.5	0.333111	0.333111	0.333111	0.333111	0.333112	0.333111	0.333111	0.333111
0.6	0.317920	0.317919	0.317919	0.317919	0.317920	0.317919	0.317919	0.317919
0.7	0.300046	0.300046	0.300046	0.300046	0.300046	0.300046	0.300046	0.300046
0.8	0.280219	0.280219	0.280219	0.280219	0.280220	0.280219	0.280219	0.280219
0.9	0.258342	0.258342	0.258342	0.258342	0.258342	0.258342	0.258342	0.258342
1.0	0.228825	0.228825	0.228825	0.228825	0.228825	0.228825	0.228825	0.228825

a. Metodologia 1 e b. Metodologia 2

Tabela 4.20: Resultados numéricos do problema 6: comparação entre as soluções determinadas pelas metodologias 1 e 2.

x	$N=501^a$	$N=1001^a$	$N=2001^a$	$N=4001^a$	$N=501^b$	$N=1001^b$	$N=2001^b$	$N=4001^b$
0.0	0.149586	0.149586	0.149586	0.149586	0.149586	0.149586	0.149586	0.149586
0.1	0.172635	0.172635	0.172635	0.172635	0.172635	0.172635	0.172635	0.172635
0.2	0.184556	0.184557	0.184556	0.184556	0.184557	0.184557	0.184556	0.184556
0.3	0.192535	0.192535	0.192535	0.192535	0.192535	0.192535	0.192535	0.192535
0.4	0.197873	0.197873	0.197873	0.197873	0.197873	0.197873	0.197873	0.197873
0.5	0.201019	0.201019	0.201019	0.201019	0.201019	0.201019	0.201019	0.201019
0.6	0.202053	0.202053	0.202053	0.202053	0.202053	0.202053	0.202053	0.202053
0.7	0.200778	0.200778	0.200778	0.200778	0.200778	0.200778	0.200778	0.200778
0.8	0.196635	0.196635	0.196635	0.196635	0.196635	0.196635	0.196635	0.196635
0.9	0.188274	0.188274	0.188274	0.188274	0.188274	0.188274	0.188274	0.188274
1.0	0.169018	0.169018	0.169018	0.169018	0.169018	0.169018	0.169018	0.169018

a: Metodologia 1 e b: Metodologia 2

Nos resultados numéricos apresentados nas tabelas 4.19, 4.20 e 4.21 calculamos o fluxo escalar quando $\sigma_i(x) = x + 1$ e consideramos os demais parâmetros diferentes em cada problema a fim de analisar o comportamento das metodologias na solução desses problemas. Nas três simulações observamos que ambas metodologias tiveram desempenho semelhante e para $N = 501$ já obtivemos bons resultados quando comparamos as duas metodologias.

Tabela 4.21: Resultados numéricos do problema 7: comparação entre as soluções determinadas pelas metodologias 1 e 2.

x	$N=501^a$	$N=1001^a$	$N=2001^a$	$N=4001^a$	$N=501^b$	$N=1001^b$	$N=2001^b$	$N=4001^b$
0.0	1.808297	1.808297	1.808297	1.808297	1.808297	1.808297	1.808297	1.808297
0.1	1.829798	1.829797	1.829797	1.829797	1.829798	1.829797	1.829797	1.829797
0.2	1.836774	1.836775	1.836775	1.836775	1.836776	1.836775	1.836775	1.836775
0.3	1.836192	1.836193	1.836193	1.836193	1.836194	1.836193	1.836193	1.836193
0.4	1.828564	1.828563	1.828563	1.828563	1.828562	1.828563	1.828563	1.828563
0.5	1.813071	1.813071	1.813071	1.813071	1.813070	1.813071	1.813071	1.813071
0.6	1.787865	1.787866	1.787866	1.787866	1.787866	1.787866	1.787866	1.787866
0.7	1.749707	1.749706	1.749706	1.749706	1.749706	1.749706	1.749706	1.749706
0.8	1.692779	1.692778	1.692778	1.692778	1.692778	1.692778	1.692778	1.692778
0.9	1.604706	1.604706	1.604706	1.604706	1.604706	1.604706	1.604706	1.604706
1.0	1.426584	1.426584	1.426584	1.426584	1.426584	1.426584	1.426584	1.426584

a. Metodologia 1 e b. Metodologia 2

Os resultados numéricos dos problemas 8 e 9 são apresentados nas tabelas 4.22 e 4.23 onde consideramos a seção de choque macroscópica total como sendo uma função quadrática e uma função exponencial, respectivamente. Para esses dois problemas também calculamos o tempo computacional das metodologias, tabela 4.24.

Tabela 4.22: Resultados numéricos do problema 8: comparação entre as soluções determinadas pelas metodologias 1 e 2.

x	$N=1001^a$	$N=2001^a$	$N=4001^a$	$N=8001^a$	$N=1001^b$	$N=2001^b$	$N=4001^b$	$N=8001^b$
0.0	7.007874	7.007874	7.007874	7.007874	7.007874	7.007874	7.007874	7.007874
0.1	7.900344	7.900344	7.900345	7.900345	7.900344	7.900344	7.900345	7.900345
0.2	8.635990	8.635988	8.635988	8.635988	8.635989	8.635988	8.635988	8.635988
0.3	9.261079	9.261077	9.261077	9.261076	9.261076	9.261076	9.261076	9.261076
0.4	9.737944	9.737941	9.737941	9.737941	9.737942	9.737941	9.737941	9.737941
0.5	10.026061	10.026061	10.026061	10.026061	10.026061	10.026061	10.026061	10.026061
0.6	10.090796	10.090797	10.090797	10.090797	10.090797	10.090798	10.090797	10.090797
0.7	9.906846	9.906847	9.906847	9.906847	9.906849	9.906847	9.906847	9.906847
0.8	9.457277	9.457277	9.457277	9.457277	9.457276	9.457277	9.457277	9.457277
0.9	8.719339	8.719339	8.719340	8.719340	8.719338	8.719340	8.719340	8.719340
1.0	7.471531	7.471531	7.471531	7.471531	7.471531	7.471531	7.471531	7.471531

a. Metodologia 1 e b. Metodologia 2

No problema 8, tabela 4.22, assumimos a seção de choque macroscópica total variando de acordo com a lei $\sigma_t = x^2 + 1$. Analisando o desempenho das metodologias na solução do problema temos que para metodologia 1 a solução convergiu em $N = 8001$ pontos enquanto que a metodologia 2 a solução convergiu para metade dos pontos, $N = 4001$. No problema 9, tabela 4.23, tomamos $\sigma_t = \exp(x)$. Neste caso obtivemos seis dígitos de precisão em ambas metodologias em $N = 2001$.

Tabela 4.23: Resultados numéricos do problema 9: comparação entre as soluções determinadas pelas metodologias 1 e 2.

x	$N=501^a$	$N=1001^a$	$N=2001^a$	$N=4001^a$	$N=501^b$	$N=1001^b$	$N=2001^b$	$N=4001^b$
0.0	1.390772	1.390772	1.390772	1.390772	1.390772	1.390772	1.390772	1.390772
0.1	1.497259	1.497259	1.497259	1.497259	1.497258	1.497259	1.497259	1.497259
0.2	1.539992	1.539993	1.539993	1.539993	1.539993	1.539992	1.539993	1.539993
0.3	1.554832	1.554833	1.554833	1.554833	1.554833	1.554832	1.554833	1.554833
0.4	1.548536	1.548535	1.548535	1.548535	1.548535	1.548536	1.548535	1.548535
0.5	1.524310	1.524310	1.524310	1.524310	1.524310	1.524310	1.524310	1.524310
0.6	1.484529	1.484530	1.484530	1.484530	1.484530	1.484529	1.484530	1.484530
0.7	1.431586	1.431585	1.431586	1.431586	1.431586	1.431586	1.431586	1.431586
0.8	1.368242	1.368242	1.368242	1.368242	1.368242	1.368242	1.368242	1.368242
0.9	1.297521	1.297521	1.297521	1.297521	1.297521	1.297521	1.297521	1.297521
1.0	1.214099	1.214099	1.214099	1.214099	1.214099	1.214099	1.214099	1.214099

a. Metodologia 1 e b. Metodologia 2

Tabela 4.24: Tempo computacional do problema 8 e 9.

N	Problema 8		Problema 9	
	Metodologia 1	Metodologia 2	Metodologia 1	Metodologia 2
501	90s	24s	88s	23s
1001	222s	63s	325s	57s
2001	622s	119s	1221s	159s
4001	1988s	572s	4792s	507s
8001	6850s	2059s	19042s	1833s

Na tabela 4.24 apresentamos o tempo computacional para os problemas 8 e 9 consideramos N variando em entre 501 e 8001. Para problema 8 temos que a metodologia 2 é em média 3,5 vezes mais rápida no cálculo do fluxo escalar quando comparada com a metodologia 1. No entanto quando analisando o tempo computacional considerando que a solução obtida pela metodologia 2 convergiu em

$N = 4001$ e para a metodologia 1 em $N = 8001$ essa diferença no tempo computacional se torna maior, ou seja, tempos que a metodologia 2 é 12 vezes mais rápida na determinação da solução do problema 8 que a metodologia 1.

Já no problema 8 a diferença no tempo computacional entre as metodologias, considerando o mesmo número de pontos na malha, é maior. No caso em que $N = 8001$ por exemplo, temos que a metodologia 2 é 10 vezes mais rápida no cálculo do fluxo escalar que a metodologia 1.

4.5 Problema de transferência radiativa com albedo variando exponencialmente

Nesta seção simulamos um problema de transferência radiativa com albedo variando exponencialmente apresentado por Garcia e Siewert [23]. Neste trabalho o método F_N foi aplicado para determinar as distribuições de saída de radiação, dadas por $\Psi(0, -\mu)$ e $\Psi(L, \mu)$, e no cálculo dos coeficientes A^* e B^* , os quais representam uma relação entre as quantidades de radiação emergentes nas fronteiras do meio, relativas as quantidades incidentes nesta mesma fronteira definidas por,

$$A^* = \frac{\int_0^1 I(0, -\mu)\mu d\mu}{\int_0^1 [F_1(\mu) + F_2(\mu)] \mu d\mu} \quad (4.2)$$

e

$$B^* = \frac{\int_0^1 I(\tau_0, -\mu)\mu d\mu}{\int_0^1 [F_1(\mu) + F_2(\mu)] \mu d\mu}. \quad (4.3)$$

4.5.1 Resultados numéricos para as distribuições de saída

Nas metodologias 1 e 2, apresentadas nos capítulos 2 e 3, respectivamente, determinamos o fluxo escalar de partículas para o problema de transporte. Para compararmos nossa solução com a apresentada no trabalho de Garcia e Siewert

[23] devemos determinar os fluxos de saída, $\Psi(0, -\mu)$ e $\Psi(L, \mu)$. Para tal partimos das equações 3.9 e 3.10 dadas por,

$$\begin{aligned} \Psi(y, \mu) = & \frac{1}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}} \left[\frac{\rho_0(\mu)}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu}(y+\tau)} Q(\tau) d\tau \right. \\ & + \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau+y)} Q(\tau) d\tau + (1 - \rho_0(\mu))B_0(\mu)e^{-\frac{y}{\mu}} \\ & \left. + (1 - \rho_L(-\mu))B_L(-\mu)\rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(y+L)} \right] + \frac{1}{\mu} \int_0^y e^{-\frac{1}{\mu}(y-\tau)} Q(\tau) d\tau \end{aligned} \quad (4.4)$$

e

$$\begin{aligned} \Psi(y, -\mu) = & \frac{1}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}} \left[\frac{\rho_L(-\mu)}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau-y)} Q(\tau) d\tau \right. \\ & + \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu}(2L+\tau-y)} Q(\tau) d\tau + (1 - \rho_L(-\mu))B_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(L-y)} \\ & \left. + (1 - \rho_0(\mu))B_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(-y+2L)} \right] + \frac{1}{\mu} \int_y^L e^{-\frac{1}{\mu}(\tau-y)} Q(\tau) d\tau. \end{aligned} \quad (4.5)$$

No problema de radiação apresentado no trabalho de Garcia e Siewert [23] $\sigma_t(y) = 1$, logo temos que as equação (4.4) e (4.5) apresentam a mesma forma para ambas metodologias.

Para determinarmos $\Psi(0, -\mu)$ e $\Psi(L, \mu)$ vamos considerar $y = L$ na equação (4.4) e $y = 0$ na equação (4.5),

$$\begin{aligned} \Psi(L, \mu) = & \frac{1}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}} \left[\frac{\rho_0(\mu)}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu}(L+\tau)} Q(\tau) d\tau \right. \\ & + \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu}(3L-\tau)} Q(\tau) d\tau + (1 - \rho_0(\mu))B_0(\mu)e^{-\frac{L}{\mu}} \\ & \left. + (1 - \rho_L(-\mu))B_L(-\mu)\rho_0(\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}} \right] + \frac{1}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu}(L-\tau)} Q(\tau) d\tau \end{aligned} \quad (4.6)$$

e

$$\begin{aligned}
\Psi(0, -\mu) = & \frac{1}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}} \left[\frac{\rho_L(-\mu)}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau)} Q(\tau) d\tau \right. \\
& + \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu}(2L+\tau)} Q(\tau) d\tau + (1 - \rho_L(-\mu))B_L(-\mu)e^{-\frac{L}{\mu}} \\
& \left. + (1 - \rho_0(\mu))B_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}} \right] + \frac{1}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{\tau}{\mu}} Q(\tau) d\tau. \quad (4.7)
\end{aligned}$$

Substituindo a função $Q(y)$, definida como $Q(y) = \sigma_s(y)\Phi(y) + S(y)$, nas equação (4.7) e (4.6) obtemos,

$$\begin{aligned}
\Psi(L, \mu) = & \int_0^L \left\{ \frac{1}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}} \left[\frac{\rho_0(\mu)}{\mu} e^{-\frac{1}{\mu}(L+\tau)} [\sigma_s(\tau)\Phi(\tau) + S(\tau)] \right. \right. \\
& + \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)}{\mu} e^{-\frac{1}{\mu}(3L-\tau)} [\sigma_s(\tau)\Phi(\tau) + S(\tau)] \left. \left. + \frac{1}{\mu} e^{-\frac{1}{\mu}(L-\tau)} [\sigma_s(\tau)\Phi(\tau) + S(\tau)] \right\} d\tau \\
& + \frac{1}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}} \left[(1 - \rho_0(\mu))B_0(\mu)e^{-\frac{L}{\mu}} + (1 - \rho_L(-\mu))B_L(-\mu)\rho_0(\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}} \right] \quad (4.8)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
\Psi(0, -\mu) = & \int_0^L \left\{ \frac{1}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}} \left[\frac{\rho_L(-\mu)}{\mu} e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau)} [\sigma_s(\tau)\Phi(\tau) + S(\tau)] \right. \right. \\
& + \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)}{\mu} e^{-\frac{1}{\mu}(2L+\tau)} [\sigma_s(\tau)\Phi(\tau) + S(\tau)] + \frac{1}{\mu} e^{-\frac{\tau}{\mu}} [\sigma_s(\tau)\Phi(\tau) + S(\tau)] \left. \left. \right\} d\tau \\
& + \frac{1}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}} \left[(1 - \rho_L(-\mu))B_L(-\mu)e^{-\frac{L}{\mu}} + (1 - \rho_0(\mu))B_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}} \right]. \quad (4.9)
\end{aligned}$$

Por fim, as distribuições de saída são determinadas aproximando as integrais na variável τ por uma quadratura numérica,

$$\begin{aligned}
\Psi(L, \mu) = & \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{w(\tau_j)}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}} \left[\frac{\rho_0(\mu)}{\mu} e^{-\frac{1}{\mu}(L+\tau_j)} [\sigma_s(\tau_j)\Phi(\tau_j) + S(\tau_j)] \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)}{\mu} e^{-\frac{1}{\mu}(3L-\tau_j)} [\sigma_s(\tau_j)\Phi(\tau_j) + S(\tau_j)] \right] + \frac{w(\tau_j)}{\mu} e^{-\frac{1}{\mu}(L-\tau)} [\sigma_s(\tau_j)\Phi(\tau_j) + S(\tau_j)] \right\} d\tau \\
& + \frac{1}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}} \left[(1 - \rho_0(\mu))B_0(\mu)e^{\frac{-L}{\mu}} + (1 - \rho_L(-\mu))B_L(-\mu)\rho_0(\mu)e^{\frac{-2L}{\mu}} \right]
\end{aligned} \tag{4.10}$$

e

$$\begin{aligned}
\Psi(0, -\mu) = & \sum_{j=1}^N \left\{ \frac{w(\tau_j)}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}} \left[\frac{\rho_L(-\mu)}{\mu} e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau_j)} [\sigma_s(\tau_j)\Phi(\tau_j) + S(\tau_j)] \right. \right. \\
& \left. \left. + \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)}{\mu} e^{-\frac{1}{\mu}(2L+\tau_j)} [\sigma_s(\tau_j)\Phi(\tau_j) + S(\tau_j)] + \frac{w(\tau_j)}{\mu} e^{-\frac{\tau_j}{\mu}} [\sigma_s(\tau_j)\Phi(\tau_j) + S(\tau_j)] \right\} d\tau \\
& + \frac{1}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}} \left[(1 - \rho_L(-\mu))B_L(-\mu)e^{\frac{-L}{\mu}} + (1 - \rho_0(\mu))B_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{\frac{-2L}{\mu}} \right].
\end{aligned} \tag{4.11}$$

A fim de comparar nossos resultados numéricos com os apresentados por Garcia e Siewert [23] nós simulamos o seguinte problema:

- Problema 10: $L = 5 \text{ cm}$, $\sigma_t(x) = 1 \text{ cm}^{-1}$, $\sigma_s(x) = \exp(-x/s) \text{ cm}^{-1}$, $\rho_0(\mu) = \rho_L(\mu) = B_L(\mu) = 0$, $B_0(\mu) = 1$ e $S(x) = 0$.

Nas tabelas 4.25 - 4.32 apresentamos os resultados numéricos para as distribuições de saída com s variando entre 1 e 1000 e aplicando quadratura de Gauss-Legendre. Estes mesmos problemas também foram simulados considerando regra de Boole no entanto omitimos esses resultados visto que a solução aplicando quadratura de Gauss-Legendre convergiram mais rapidamente.

Tabela 4.25: Comparação dos resultados numéricos para o fluxo angular em $x = 0$ com $s = 1$ com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23].

μ	$F_N^{[23]}$	$N = 101$	$N = 201$	$N = 401$	$N = 801$
0.1	0.53112	0.53112	0.53112	0.53112	0.53112
0.2	0.44328	0.44328	0.44328	0.44328	0.44328
0.3	0.38031	0.38031	0.38031	0.38031	0.38031
0.4	0.33296	0.33297	0.33296	0.33296	0.33296
0.5	0.29609	0.29609	0.29609	0.29609	0.29609
0.6	0.26656	0.26656	0.26656	0.26656	0.26656
0.7	0.24239	0.24239	0.24239	0.24239	0.24239
0.8	0.22223	0.22224	0.22223	0.22223	0.22223
0.9	0.20517	0.20518	0.20517	0.20517	0.20517
1.0	0.19055	0.19055	0.19055	0.19055	0.19055

Tabela 4.26: Comparação dos resultados numéricos para o fluxo angular do problema 10 em $x = 0$ com $s = 10$ com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23].

μ	$F_N^{[23]}$	$N = 101$	$N = 201$	$N = 401$	$N = 801$
0.1	0.73398	0.73398	0.73398	0.73398	0.73398
0.2	0.68632	0.68632	0.68632	0.68632	0.68632
0.3	0.64418	0.64418	0.64418	0.64418	0.64418
0.4	0.60647	0.60648	0.60647	0.60647	0.60647
0.5	0.57257	0.57257	0.57257	0.57257	0.57257
0.6	0.54197	0.54197	0.54197	0.54197	0.54197
0.7	0.51427	0.51427	0.51427	0.51427	0.51427
0.8	0.48910	0.48910	0.48910	0.48910	0.48910
0.9	0.46615	0.46615	0.46615	0.46615	0.46615
1.0	0.44517	0.44517	0.44517	0.44517	0.44517

Tabela 4.27: Comparação dos resultados numéricos para o fluxo angular do problema 10 em $x = 0$ com $s = 100$ com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23].

μ	$F_N^{[23]}$	$N = 101$	$N = 201$	$N = 401$	$N = 801$
0.1	0.85028	0.85028	0.85028	0.85028	0.85028
0.2	0.82523	0.82523	0.82523	0.82523	0.82523
0.3	0.80181	0.80181	0.80181	0.80181	0.80181
0.4	0.77946	0.77947	0.77946	0.77946	0.77946
0.5	0.75799	0.75800	0.75800	0.75799	0.75799
0.6	0.73730	0.73731	0.73730	0.73730	0.73730
0.7	0.71734	0.71734	0.71734	0.71734	0.71734
0.8	0.69805	0.69805	0.69805	0.69805	0.69805
0.9	0.67943	0.67943	0.67943	0.67943	0.67943
1.0	0.66146	0.66146	0.66146	0.66146	0.66146

Tabela 4.28: Comparação dos resultados numéricos para o fluxo angular do problema 10 em $x = 0$ com $s = 1000$ com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23].

μ	$F_N^{[23]}$	$N = 101$	$N = 201$	$N = 401$	$N = 801$
0.1	0.88319	0.88319	0.88319	0.88319	0.88319
0.2	0.86410	0.86410	0.86410	0.86410	0.86410
0.3	0.84606	0.84606	0.84606	0.84606	0.84606
0.4	0.82857	0.82857	0.82857	0.82857	0.82857
0.5	0.81143	0.81143	0.81143	0.81143	0.81143
0.6	0.79455	0.79455	0.79455	0.79455	0.79455
0.7	0.77788	0.77788	0.77788	0.77788	0.77788
0.8	0.76139	0.76140	0.76139	0.76139	0.76139
0.9	0.74510	0.74511	0.74510	0.74510	0.74510
1.0	0.72904	0.72904	0.72904	0.72904	0.72904

Tabela 4.29: Comparação dos resultados numéricos para o fluxo angular do problema 10 em $x = L$ com $s = 1$ com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23].

μ	$F_N^{[23]}$	$N = 101$	$N = 201$	$N = 401$	$N = 801$
0.1	0.69252E-5	0.69252E-5	0.69252E-5	0.69252E-5	0.69252E-5
0.2	0.96423E-5	0.96423E-5	0.96423E-5	0.96423E-5	0.96423E-5
0.3	0.16234E-4	0.16234E-4	0.16234E-4	0.16234E-4	0.16234E-4
0.4	0.43858E-4	0.43858E-4	0.43858E-4	0.43858E-4	0.43858E-4
0.5	0.16937E-3	0.16937E-3	0.16937E-3	0.16937E-3	0.16937E-3
0.6	0.57347E-3	0.57347E-3	0.57347E-3	0.57347E-3	0.57347E-3
0.7	0.15128E-2	0.15128E-2	0.15128E-2	0.15128E-2	0.15128E-2
0.8	0.32437E-2	0.32437E-2	0.32437E-2	0.32437E-2	0.32437E-2
0.9	0.59604E-2	0.59604E-2	0.59604E-2	0.59604E-2	0.59604E-2
1.0	0.97712E-2	0.97712E-2	0.97712E-2	0.97712E-2	0.97712E-2

Tabela 4.30: Comparação dos resultados numéricos para o fluxo angular do problema 10 em $x = L$ com $s = 10$ com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23].

μ	$F_N^{[23]}$	$N = 101$	$N = 201$	$N = 401$	$N = 801$
0.1	0.63702E-2	0.63701E-2	0.63702E-2	0.63702E-2	0.63702E-2
0.2	0.76183E-2	0.76182E-2	0.76182E-2	0.76183E-2	0.76183E-2
0.3	0.91482E-2	0.91482E-2	0.91482E-2	0.91482E-2	0.91482E-2
0.4	0.11119E-1	0.11118E-1	0.11119E-1	0.11119E-1	0.11119E-1
0.5	0.13725E-1	0.13725E-1	0.13725E-1	0.13725E-1	0.13725E-1
0.6	0.17183E-1	0.17183E-1	0.17183E-1	0.17183E-1	0.17183E-1
0.7	0.21680E-1	0.21680E-1	0.21680E-1	0.21680E-1	0.21680E-1
0.8	0.27331E-1	0.27331E-1	0.27331E-1	0.27331E-1	0.27331E-1
0.9	0.34166E-1	0.34166E-1	0.34166E-1	0.34166E-1	0.34166E-1
1.0	0.42142E-1	0.42142E-1	0.42142E-1	0.42142E-1	0.42142E-1

Tabela 4.31: Comparação dos resultados numéricos para o fluxo angular do problema 10 em $x = L$ com $s = 100$ com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23].

μ	$F_N^{[23]}$	$N = 101$	$N = 201$	$N = 401$	$N = 801$
0.1	0.69024E-1	0.69023E-1	0.69024E-1	0.69024E-1	0.69024E-1
0.2	0.80567E-1	0.80566E-1	0.80567E-1	0.80567E-1	0.80567E-1
0.3	0.91918E-1	0.91916E-1	0.91917E-1	0.91918E-1	0.91917E-1
0.4	0.10342	0.10342	0.10342	0.10342	0.10342
0.5	0.11523	0.11523	0.11523	0.11523	0.11523
0.6	0.12744	0.12744	0.12744	0.12744	0.12744
0.7	0.14010	0.14010	0.14010	0.14010	0.14010
0.8	0.15319	0.15319	0.15319	0.15319	0.15319
0.9	0.16667	0.16667	0.16667	0.16667	0.16667
1.0	0.18047	0.18047	0.18047	0.18047	0.18047

Tabela 4.32: Comparação dos resultados numéricos para o fluxo angular do problema 10 em $x = L$ com $s = 1000$ com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23].

μ	$F_N^{[23]}$	$N = 101$	$N = 201$	$N = 401$	$N = 801$
0.1	0.10629	0.10628	0.10629	0.10629	0.10629
0.2	0.12363	0.12363	0.12363	0.12363	0.12363
0.3	0.14012	0.14012	0.14012	0.14012	0.14012
0.4	0.15622	0.15622	0.15622	0.15622	0.15622
0.5	0.17211	0.17211	0.17211	0.17211	0.17211
0.6	0.18790	0.18790	0.18790	0.18790	0.18790
0.7	0.20364	0.20364	0.20364	0.20364	0.20364
0.8	0.21933	0.21932	0.21933	0.21933	0.21933
0.9	0.23496	0.23495	0.23495	0.23496	0.23496
1.0	0.25049	0.25049	0.25049	0.25049	0.25049

Nas tabelas 4.25 - 4.32 apresentamos os resultados numéricos para as distribuições de saída do problema de transferência radiativa com albedo variando exponencialmente. Em todas as simulações ambas metodologias geraram a mesma

solução para os fluxos de saída, além de apresentarem cinco dígitos de precisão quando comparadas com o método F_N .

4.5.2 Resultados numéricos para os coeficientes A^* e B^*

Os resultados numéricos para os coeficientes A^* e B^* , (4.2) e (4.3), são comparados com os resultados obtidos por Garcia e Siewert [23] aplicando o método F_N , por Vilhena e Vargas [46] aplicando o método de decomposição nas equações S_N , método DS_N , e por Machado [29] pelo método LTS_N .

Os coeficientes A^* e B^* do problema 10 são dados por,

$$A^* = \frac{\int_0^1 \int_0^L \left[e^{-\frac{\tau}{\mu}} \sigma_s(\tau) \Phi(\tau) \right] d\tau d\mu}{\int_0^1 \mu d\mu} \quad (4.12)$$

e

$$B^* = \frac{\int_0^1 \int_0^L \left[e^{-\frac{(L-\tau)}{\mu}} \sigma_s(\tau) \Phi(\tau) \right] d\tau d\mu + \int_0^1 \mu e^{-\frac{L}{\mu}} d\mu}{\int_0^1 \mu d\mu}. \quad (4.13)$$

Quando aproximamos a integral dupla numericamente temos,

$$A^* = 2 \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{-\frac{\tau_j}{\mu_i}} \sigma_s(\tau_j) \Phi(\tau_j) w(\tau_j) w(\mu_i) \quad (4.14)$$

e

$$B^* = 2 \sum_{i=1}^N \sum_{j=1}^N e^{-\frac{(L-\tau_j)}{\mu_i}} \sigma_s(\tau_j) \Phi(\tau_j) w(\tau_j) w(\mu_i) + 2 \sum_{i=1}^N \mu_i e^{-\frac{L}{\mu_i}} w(\mu_i) \quad (4.15)$$

Nas tabelas 4.33 - 4.40 apresentamos os resultados numéricos para os coeficientes A^* e B^* do problema 10. Nas simulações consideramos a quadratura de Gauss-Legendre, w_0 igual a 0.7 e 1.0, s variando entre 1 e 1000 e os domínios $L=0.1$ cm, $L=1.0$ cm, $L=5.0$ cm e $L=10.0$ cm. No problema 10 a seção de choque total é igual a 1 logo os resultados gerados pelas metodologias 1 e 2 são iguais.

Tabela 4.33: Comparação dos resultados numéricos para o coeficiente A^* do problema 10 em $L=0.1$ cm com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23], Machado [29] e Vargas e Vilhena [46].

w_0	s	$F_N^{[23]}$	$LTS_N^{[29]}$	$DS_{60}^{[46]}$	$N = 101$
0.7	1	0.530284E-1	0.530284E-1	0.531624E-1	0.530284E-1
	10	0.554877E-1	0.554878E-1	0.556210E-1	0.554877E-1
	100	0.557431E-1	0.557433E-1	0.558736E-1	0.557431E-1
	1000	0.557687E-1	0.557687E-1	0.557687E-1	0.557687E-1
1.0	1	0.799031E-1	0.799031E-1	0.800804E-1	0.799031E-1
	10	0.838411E-1	0.838413E-1	0.840173E-1	0.838411E-1
	100	0.842514E-1	0.842517E-1	0.844274E-1	0.842514E-1
	1000	0.842925E-1	0.842928E-1	0.844686E-1	0.842925E-1

Tabela 4.34: Comparação dos resultados numéricos para o coeficiente A^* do problema 10 em $L=1.0$ cm com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23] e Machado [29].

w_0	s	$F_N^{[23]}$	$LTS_N^{[29]}$	$N = 101$	$N = 201$
0.7	1	0.152071	0.152072	0.152071	0.152071
	10	0.211600	0.211602	0.211600	0.211600
	100	0.220966	0.220968	0.220966	0.220966
	1000	0.221959	0.221960	0.221959	0.221959
1.0	1	0.258891	0.258892	0.258891	0.258891
	10	0.412506	0.412509	0.412506	0.412506
	100	0.442863	0.442865	0.442863	0.442863
	1000	0.446217	0.446219	0.446217	0.446217

Tabela 4.35: Comparação dos resultados numéricos para o coeficiente A^* do problema 10 em $L=5.0$ cm com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23] e Machado [29].

w_0	s	$F_N^{[23]}$	$LTS_N^{[29]}$	$N = 101$	$N = 201$	$N = 401$
0.7	1	0.155240	0.155241	0.155241	0.155240	0.155240
	10	0.235414	0.235416	0.235415	0.235414	0.235414
	100	0.254017	0.254019	0.254017	0.254017	0.254017
	1000	0.256264	0.256266	0.256264	0.256264	0.256264
1.0	1	0.265892	0.265894	0.265893	0.265892	0.265892
	10	0.531182	0.531188	0.531184	0.531182	0.531182
	100	0.725972	0.725974	0.725974	0.725972	0.725972
	1000	0.784073	0.784075	0.784075	0.784074	0.784073

Tabela 4.36: Comparação dos resultados numéricos para o coeficiente A^* do problema 10 em $L=10.0$ cm com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23].

w_0	s	$F_N^{[23]}$	$N = 101$	$N = 201$	$N = 401$	$N = 801$
0.7	1	0.155240	0.155241	0.155241	0.155240	0.155240
	10	0.235418	0.235420	0.235418	0.235418	0.235418
	100	0.254044	0.254046	0.254045	0.254044	0.254044
	1000	0.256300	0.256301	0.256300	0.256300	0.256300
1.0	1	0.265892	0.265895	0.265892	0.265892	0.265892
	10	0.531268	0.531275	0.531269	0.531268	0.531268
	100	0.741935	0.741945	0.741936	0.741935	0.741935
	1000	0.854489	0.854498	0.854489	0.854489	0.854489

Tabela 4.37: Comparação dos resultados numéricos para o coeficiente B^* do problema 10 em $L=0.1$ cm com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23], Machado [29] e Vargas e Vilhena [46].

w_0	s	$F_N^{[23]}$	$LTS_N^{[29]}$	$DS_{60}^{[46]}$	$N = 101$
	1	0.884557	0.884558	0.884630	0.884557
0.7	10	0.887231	0.887232	0.887307	0.887231
	100	0.887509	0.887511	0.887585	0.887509
	1000	0.887537	0.887539	0.887613	0.887537
	1	0.910943	0.910943	0.911046	0.910943
1.0	10	0.915208	0.915209	0.915317	0.915208
	100	0.915653	0.915655	0.915763	0.915653
	1000	0.915698	0.915699	0.915808	0.915698

Tabela 4.38: Comparação dos resultados numéricos para o coeficiente B^* do problema 10 em $L=1.0$ cm com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23] e Machado [29].

w_0	s	$F_N^{[23]}$	$LTS_N^{[29]}$	$N = 101$	$N = 201$
	1	0.293658	0.293659	0.293658	0.293658
0.7	10	0.358263	0.358264	0.358263	0.358263
	100	0.369812	0.369814	0.369812	0.369812
	1000	0.371056	0.371058	0.371056	0.371056
	1	0.349433	0.349434	0.349433	0.349433
1.0	10	0.512428	0.512429	0.512428	0.512428
	100	0.548858	0.548860	0.548858	0.548858
	1000	0.552946	0.552948	0.552946	0.552946

Tabela 4.39: Comparação dos resultados numéricos para o coeficiente B^* do problema 10 em $L=5.0$ cm com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23] e Machado [29].

w_0	s	$F_N^{[23]}$	$LTS_N^{[29]}$	$N = 101$	$N = 201$	$N = 401$
0.7	1	0.233529E-2	0.233530E-2	0.233529E-2	0.233529E-2	0.233529E-2
	10	0.647245E-2	0.647247E-2	0.647242E-2	0.647244E-2	0.647245E-2
	100	0.113268E-1	0.113269E-1	0.113267E-1	0.113268E-1	0.113268E-1
	1000	0.122743E-1	0.122745E-1	0.122742E-1	0.122743E-1	0.122743E-1
1.0	1	0.278246E-2	0.278247E-2	0.278246E-2	0.278246E-2	0.278246E-2
	10	0.228739E-1	0.228739E-1	0.228737E-1	0.228739E-1	0.228739E-1
	100	0.136939	0.136941	0.136938	0.136939	0.136939
	1000	0.198147	0.198149	0.198145	0.198147	0.198147

Tabela 4.40: Comparação dos resultados numéricos para o coeficiente B^* do problema 10 em $L=10.0$ cm com os resultados publicados por Garcia e Siewert [23].

w_0	s	$F_N^{[23]}$	$N = 101$	$N = 201$	$N = 401$	$N = 801$
0.7	1	0.918404E-5	0.918405E-5	0.918404E-5	0.918404E-5	0.918404E-5
	10	0.325450E-4	0.325440E-4	0.325449E-4	0.325450E-4	0.325450E-4
	100	0.139581E-3	0.139567E-3	0.139580E-3	0.139581E-3	0.139581E-3
	1000	0.186945E-3	0.186923E-3	0.186942E-3	0.186944E-3	0.186945E-3
1.0	1	0.107906E-4	0.107906E-4	0.107906E-4	0.107906E-4	0.107906E-4
	10	0.148970E-3	0.148958E-3	0.148968E-3	0.148970E-3	0.148970E-3
	100	0.157519E-1	0.157494E-1	0.157516E-1	0.157518E-1	0.157519E-1
	1000	0.86889E-1	0.868813E-1	0.868888E-1	0.868888E-1	0.868889E-1

Os resultados numéricos, tabelas 4.33 - 4.40, que nós obtivemos para os coeficientes A^* e B^* do problema de transferência radiativa apresentaram a mesma precisão que a solução calculada por Garcia e Siewert [23] aplicando método F_N . Considerando isso temos que nossas metodologias apresentaram melhor desempenho quando comparada aos métodos como DS_N e LTS_N . Com relação a convergência da solução, para domínios menores como $L=0.1$ cm e $L=1.0$ cm obtivemos seis dígitos

em $N = 101$ pontos e para os demais domínios variou entre 201 e 801 pontos na malha.

5 SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE NÃO HOMOGÊNEA COM ESPALHAMENTO ANISOTRÓPICO PELO MÉTODO DE NYSTRÖM

Neste capítulo apresentamos a solução para a equação de transporte anisotrópica em um domínio não homogêneo com condições de contorno semi-refletivas. A solução deste problema é determinada seguindo os passos da metodologia 2, visto que a mesma apresentou melhor desempenho computacional quando aplicada ao problema com espalhamento isotrópico.

Na primeira seção nós determinamos a formulação integral do problema de transporte com espalhamento anisotrópico em domínio homogêneo, obtido com a aplicação de uma mudança de variável no problema original em domínio não homogêneo. A partir desta formulação integral nós apresentamos, nas seções 5.2 e 5.3, as soluções para os problemas de transporte com anisotropia linear e quadrática, respectivamente. Para determinarmos as soluções desses casos nós aplicamos a técnica de remoção de singularidade nos operadores integrais e discretizamos esses operadores aplicando o método de Nyström.

5.1 Formulação integral

Para determinarmos a formulação integral do problema de transporte com espalhamento anisotrópico, (1.1)-(1.4), nós iniciamos considerando a mudança de variável aplicada no caso com espalhamento isotrópico e apresentada na metodologia 2, dada por

$$y(x) = \int_0^x \sigma_t(\tau) d\tau. \quad (5.1)$$

A partir dessa função nós reescrevemos a equação de transporte (1.1), que está em um domínio não homogêneo, na seguinte equação equivalente em meio homogêneo,

$$\mu \frac{\partial}{\partial y} \bar{\Psi}(y, \mu) + \bar{\Psi}(y, \mu) = \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{2\bar{\sigma}_t(y)} \int_{-1}^1 \omega(y, \mu, \mu') \bar{\Psi}(y, \mu') d\mu' + \frac{\bar{S}(y)}{\bar{\sigma}_t(y)}, \quad (5.2)$$

sendo esta sujeita as condições de contorno (1.3) e (1.4).

A partir (5.2) nós determinamos uma equação auxiliar dada por,

$$\mu \frac{\partial}{\partial y} \bar{\Psi}(y, \mu) + \bar{\Psi}(y, \mu) = \bar{q}(y, \mu), \quad (5.3)$$

onde

$$\bar{q}(y, \mu) = \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} J(y, \mu) + \frac{\bar{S}(y)}{\bar{\sigma}_t(y)}. \quad (5.4)$$

A função $J(y, \mu)$ é definida por,

$$J(y, \mu) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \omega(y, \mu, \mu') \bar{\Psi}(y, \mu') d\mu', \quad (5.5)$$

onde o núcleo de espalhamento anisotrópico, $\omega(y, \mu, \mu')$, é dado por

$$\omega(y, \mu, \mu') = \sum_{l=0}^M \beta_l(y) P_l(\mu) P_l(\mu'). \quad (5.6)$$

onde $P_l(\mu)$ são os polinômios de Legendre e $\beta_l(x)$ são contantes. Assumimos que β_l depende de x para que a partir da solução do problema anisotrópico seja possível resolver problemas considerando um domínio constante por partes.

A formulação integral do problema (1.1)-(1.4) é determinada solucionando a equação (5.3), sujeita a condições de contorno (1.3) e (1.4). Seguindo os mesmo passos apresentados no capítulo 3 determinamos os fluxos angulares $\bar{\Psi}(y, \mu)$ e $\bar{\Psi}(y, -\mu)$,

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}(y, \mu) = & \frac{1}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}} \left[\frac{\rho_0(\mu)}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu}(y+\tau)} \bar{q}(\tau, -\mu) d\tau \right. \\ & + \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau+y)} \bar{q}(\tau, \mu) d\tau + (1 - \rho_0(\mu))B_0(\mu)e^{-\frac{y}{\mu}} \\ & \left. + (1 - \rho_L(-\mu))B_L(-\mu)\rho_0(\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(y+L)} \right] + \frac{1}{\mu} \int_0^y e^{-\frac{1}{\mu}(y-\tau)} \bar{q}(\tau, \mu) d\tau \end{aligned} \quad (5.7)$$

e

$$\begin{aligned}
\bar{\Psi}(y, -\mu) &= \frac{1}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}} \left[\frac{\rho_L(-\mu)}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu}(2L-\tau-y)} \bar{q}(\tau, \mu) d\tau \right. \\
&+ \frac{\rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)}{\mu} \int_0^L e^{-\frac{1}{\mu}(2L+\tau-y)} \bar{q}(\tau, -\mu) d\tau + (1 - \rho_L(-\mu))B_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(L-y)} \\
&\left. + (1 - \rho_0(\mu))B_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{1}{\mu}(-y+2L)} \right] + \frac{1}{\mu} \int_y^L e^{-\frac{1}{\mu}(\tau-y)} \bar{q}(\tau, -\mu) d\tau. \quad (5.8)
\end{aligned}$$

Podemos escrever (5.7) e (5.8) como a somas de dois operadores, ou seja,

$$\bar{\Psi}(y, \mu) = L_g^\mu \bar{q}(y, \mu) + L_b^\mu (B_0, B_L). \quad (5.9)$$

Substituindo a definição da função $\bar{q}(y, \mu)$, dada em (5.4), na equação (5.9) nós obtemos

$$\bar{\Psi}(y, \mu) = L_g^\mu \left[\frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} J(y, \mu) + \frac{\bar{S}(y, \mu)}{\bar{\sigma}_t(y)} \right] + L_b^\mu (B_0, B_L). \quad (5.10)$$

Considerando agora a função $J(y, \mu)$ dada em (5.5) e usando a definição da função espalhamento dada em (5.6), temos que $J(y, \mu)$ será reescrito como,

$$J(y, \mu) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \sum_{l=0}^M \beta_l(y) P_l(\mu) P_l(\mu') \bar{\Psi}(y, \mu') d\mu', \quad (5.11)$$

ou ainda

$$J(y, \mu) = \sum_{l=0}^M \beta_l(y) P_l(\mu) J_l(y), \quad (5.12)$$

onde

$$J_l(y) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 P_l(\mu') \bar{\Psi}(y, \mu') d\mu'. \quad (5.13)$$

Substituindo a definição de $\bar{\Psi}(y, \mu)$ dada em (5.10) em (5.13) e considerando $J(y, \mu)$ como apresentada na equação (5.12) obtemos,

$$J_l(y) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 P_l(\mu') L_g^{\mu'} \left[\frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} \sum_{k=0}^M \beta_k(y) J_k(y) P_k(\mu') + \frac{\bar{S}(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} \right] d\mu' + \frac{1}{2} \int_{-1}^1 P_l(\mu') L_b^{\mu'} (B_0, B_L) d\mu'. \quad (5.14)$$

Utilizando operadores integrais nós reescrevemos (5.14) como

$$J_l(y) = \sum_{k=0}^M K_{g1}^{l,k} \beta_k(y) J_k(y) + K_{g2}^l \bar{S}(y) + K_b^l (B_0, B_L) \quad (5.15)$$

onde

$$K_{g1}^{l,k} h(y) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 P_l(\mu') L_g^{\mu'} \left[\beta_k(y) \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} h(y) P_k(\mu') \right] d\mu', \quad (5.16)$$

$$K_{g2}^l h(y) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 P_l(\mu') L_g^{\mu'} \left[\frac{1}{\bar{\sigma}_t(y)} h(y) \right] d\mu', \quad (5.17)$$

$$K_b^l (B_0, B_L) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 P_l(\mu') L_b^{\mu'} (B_0, B_L) d\mu'. \quad (5.18)$$

Podemos ainda reescrever a equação (5.15) na forma de um sistema como

$$\begin{bmatrix} 1 - K_{g1}^{0,0} & -K_{g1}^{0,1} & \cdots & -K_{g1}^{0,M} \\ -K_{g1}^{1,0} & 1 - K_{g1}^{1,1} & \cdots & -K_{g1}^{1,M} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ -K_{g1}^{M,0} & -K_{g1}^{M,1} & \cdots & 1 - K_{g1}^{M,M} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_0(y) \\ J_1(y) \\ \vdots \\ J_M(y) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{g2}^0 \bar{S}(y) + K_b^0 (B_0, B_L) \\ K_{g1}^1 \bar{S}(y) + K_b^1 (B_0, B_L) \\ \vdots \\ K_{g1}^M \bar{S}(y) + K_b^M (B_0, B_L) \end{bmatrix}. \quad (5.19)$$

No sistema (5.19) temos a função $K_{g_1}^{l,k} J_k(y)$ a qual é definida como,

$$\begin{aligned}
K_{g_1}^{l,k} J_k(y) &= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 P_l(\mu') L_g^{\mu'} \left[\frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} J_k(y) P_k(\mu') \right] d\mu' \\
&= \int_0^1 \int_0^L \left\{ \frac{1}{2(1 - \rho_0(\mu') \rho_L(-\mu') e^{-\frac{2L}{\mu'}})} \left[\frac{P_l(\mu') \rho_0(\mu') \bar{\sigma}_s(\tau) J_k(\tau)}{\mu' \bar{\sigma}_t(\tau)} \right. \right. \\
&\quad \left. \left(P_k(-\mu') e^{-\frac{1}{\mu'}(y+\tau)} + \rho_L(-\mu') P_k(\mu') e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-\tau+y)} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{P_l(-\mu') \rho_L(-\mu') \bar{\sigma}_s(\tau) J_k(\tau)}{\mu' \bar{\sigma}_t(\tau)} \left(P_k(\mu') e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-\tau-y)} \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \rho_0(\mu') P_k(-\mu') e^{-\frac{1}{\mu'}(2L+\tau-y)} \right) \right] \right\} d\tau d\mu' \\
&+ \int_0^1 \int_0^y \frac{\bar{\sigma}_s(\tau) P_l(\mu') P_k(\mu') J_k(\tau)}{2\mu' \bar{\sigma}_t(\tau)} e^{-\frac{1}{\mu'}(y-\tau)} d\tau d\mu' \\
&+ \int_0^1 \int_y^L \frac{\bar{\sigma}_s(\tau) P_l(-\mu') P_k(-\mu') J_k(\tau)}{2\mu' \bar{\sigma}_t(\tau)} e^{-\frac{1}{\mu'}(\tau-y)} d\tau d\mu'.
\end{aligned} \tag{5.20}$$

A função $K_{g_2}^l \bar{S}(y)$ é dada por,

$$\begin{aligned}
K_{g_2}^l \bar{S}(y) &= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 P_l(\mu') L_g^{\mu'} \frac{1}{\bar{\sigma}_t(y)} \bar{S}(y) d\mu' \\
&= \int_0^1 \int_0^L \left\{ \frac{1}{2(1 - \rho_0(\mu') \rho_L(-\mu') e^{-\frac{2L}{\mu'}})} \left[\frac{P_l(\mu') \rho_0(\mu') \bar{S}(\tau)}{\mu' \bar{\sigma}_t(\tau)} \right. \right. \\
&\quad \left. \left(e^{-\frac{1}{\mu'}(y+\tau)} + \rho_L(-\mu') e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-\tau+y)} \right) \right. \\
&\quad \left. + \frac{P_l(-\mu') \rho_L(-\mu') \bar{S}(\tau)}{\mu' \bar{\sigma}_t(\tau)} \left(e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-\tau-y)} + \rho_0(\mu') e^{-\frac{1}{\mu'}(2L+\tau-y)} \right) \right] \right\} d\tau d\mu' \\
&+ \int_0^1 \int_0^y \frac{P_l(\mu') \bar{S}(\tau)}{2\mu' \bar{\sigma}_t(\tau)} e^{-\frac{1}{\mu'}(y-\tau)} d\tau d\mu' + \int_0^1 \int_y^L \frac{P_l(-\mu') \bar{S}(\tau)}{2\mu' \bar{\sigma}_t(\tau)} e^{-\frac{1}{\mu'}(\tau-y)} d\tau d\mu'.
\end{aligned} \tag{5.21}$$

E por fim $K_b^l(B_0, B_L)$ é dada por:

$$\begin{aligned}
K_b^l(B_0, B_L) &= \frac{1}{2} \int_{-1}^1 P_l(\mu') L_b^{\mu'}(B_0, B_L) d\mu' \\
&= \int_0^1 \left[\frac{P_l(-\mu')(1 - \rho_L(-\mu')) B_L(-\mu') e^{-\frac{1}{\mu'}(L-y)}}{2(1 - \rho_0(\mu') \rho_L(-\mu') e^{-\frac{2L}{\mu'}})} \right. \\
&\quad + \frac{P_l(-\mu')(1 - \rho_0(\mu')) B_0(\mu') \rho_L(-\mu') e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-y)}}{2(1 - \rho_0(\mu') \rho_L(-\mu') e^{-\frac{2L}{\mu'}})} \\
&\quad + \frac{P_l(\mu')(1 - \rho_0(\mu') B_0(\mu')) e^{-\frac{y}{\mu'}}}{2(1 - \rho_0(\mu') \rho_L(-\mu') e^{-\frac{2L}{\mu'}})} \\
&\quad \left. + \frac{P_l(\mu')(1 - \rho_L(-\mu')) B_L(-\mu') \rho_0(\mu') e^{-\frac{1}{\mu'}(y+L)}}{2(1 - \rho_0(\mu') \rho_L(-\mu') e^{-\frac{2L}{\mu'}})} \right] d\mu'. \quad (5.22)
\end{aligned}$$

5.2 Anisotropia linear

Nesta seção vamos considerar a equação de transporte (1.1) com espalhamento linearmente anisotrópico, ou seja,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, \mu) + \sigma_t(x) \Psi(x, \mu) = \frac{\sigma_s(x)}{2} \int_{-1}^1 (\beta_0(x) + \beta_1(x) \mu \mu') \Psi(x, \mu') d\mu' + S(x), \quad (5.23)$$

sendo esta sujeita as condições de contorno (1.3) e (1.4).

A formulação integral para o problema de transporte com anisotropia linear é determinada considerando $M = 1$, $l = 0$ e $l = 1$ na equação (5.14), ou seja,

$$J_0(y) - K_{g_1}^{0,0} \beta_0(y) J_0(y) - K_{g_1}^{0,1} \beta_1(y) J_1(y) = K_{g_2}^0 \bar{S}(y) + K_g^0(B_0, B_1), \quad (5.24)$$

e

$$J_1(y) - K_{g_1}^{1,0} \beta_0(y) J_0(y) - K_{g_1}^{1,1} \beta_1(y) J_1(y) = K_{g_2}^1 \bar{S}(y) + K_g^1(B_0, B_1), \quad (5.25)$$

com as quais podemos escrever o seguinte sistema,

$$\begin{bmatrix} 1 - K_{g_1}^{0,0} & -K_{g_1}^{0,1} \\ -K_{g_1}^{1,0} & 1 - K_{g_1}^{1,1} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_0(y) \\ J_1(y) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{g_2}^0 \bar{S}(y) + K_b^0(B_0, B_L) \\ K_{g_2}^1 \bar{S}(y) + K_b^1(B_0, B_L) \end{bmatrix}. \quad (5.26)$$

No sistema (5.26) temos que a função $K_{g_1}^{0,0} J_0(y)$ é dada por,

$$K_{g_1}^{0,0} J_0(y) = \int_0^L k^{0,0}(y, \tau) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} \beta_0(\tau) J_0(\tau) d\tau \quad (5.27)$$

sendo

$$k^{0,0}(y, \tau) = \frac{1}{2} \int_0^1 \left\{ \frac{1}{\mu'(1 - \rho_0(\mu')\rho_L(-\mu')e^{-\frac{2L}{\mu'}})} \left[\rho_0(\mu')\rho_L(-\mu') \left(e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-\tau+y)} + e^{-\frac{1}{\mu'}(2L+\tau-y)} \right) + \rho_0(\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(y+\tau)} + \rho_L(-\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-\tau-y)} \right] + \frac{e^{-\frac{1}{\mu'}|y-\tau|}}{\mu'} \right\} d\mu'. \quad (5.28)$$

Temos que $K_{g_1}^{0,1} J_1(y)$ é dada por,

$$K_{g_1}^{0,1} J_0(y) = \int_0^L k^{0,1}(y, \tau) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} \beta_1(\tau) J_1(\tau) d\tau, \quad (5.29)$$

sendo

$$k^{0,1}(y, \tau) = \frac{1}{2} \int_0^1 \left\{ \frac{1}{(1 - \rho_0(\mu')\rho_L(-\mu')e^{-\frac{2L}{\mu'}})} \left[\rho_0(\mu')\rho_L(-\mu') \left(e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-\tau+y)} - e^{-\frac{1}{\mu'}(2L+\tau-y)} \right) - \rho_0(\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(y+\tau)} + \rho_L(-\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-\tau-y)} \right] + \frac{y - \tau}{|y - \tau|} e^{-\frac{1}{\mu'}|y-\tau|} \right\} d\mu'. \quad (5.30)$$

A função $K_{g_1}^{1,0} J_0(y)$ é escrita da forma,

$$K_{g_1}^{1,0} J_0(y) = \int_0^L k^{1,0}(y, \tau) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} \beta_0(\tau) J_0(\tau) d\tau, \quad (5.31)$$

onde $k^{1,0}(y, \tau)$ é dada por,

$$k^{1,0}(y, \tau) = \frac{1}{2} \int_0^1 \left\{ \frac{1}{(1 - \rho_0(\mu')\rho_L(-\mu')e^{-\frac{2L}{\mu'}})} \left[\rho_0(\mu')\rho_L(-\mu') \left(e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-\tau+y)} - e^{-\frac{1}{\mu'}(2L+\tau-y)} \right) + \rho_0(\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(y+\tau)} - \rho_L(-\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-\tau-y)} \right] + \frac{y - \tau}{|y - \tau|} e^{-\frac{1}{\mu'}|y-\tau|} \right\} d\mu'. \quad (5.32)$$

E por fim, $K_{g_1}^{1,1} J_1(y)$ é dada por,

$$K_{g_1}^{1,1} J_1(y) = \int_0^L k^{1,1}(y, \tau) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} \beta_1(\tau) J_1(\tau) d\tau \quad (5.33)$$

onde

$$k^{1,1}(y, \tau) = \frac{1}{2} \int_0^1 \left\{ \frac{\mu'}{\mu'(1 - \rho_0(\mu')\rho_L(-\mu')e^{-\frac{2L}{\mu'}})} \left[-\rho_L(-\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-\tau-y)} + \rho_0(\mu')\rho_L(-\mu') \left(e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-\tau+y)} + e^{-\frac{1}{\mu'}(2L+\tau-y)} \right) - \rho_0(\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(y+\tau)} \right] + \mu'e^{-\frac{1}{\mu'}|y-\tau|} \right\} d\mu'. \quad (5.34)$$

No lado direito do sistema temos as função $K_{g_2^0}^0 \bar{S}(y)$ e $K_{g_2^1}^1 \bar{S}(y)$, as quais são dada por,

$$K_{g_2^0}^0 \bar{S}(y) = \int_0^L \frac{\bar{S}(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} k^{0,0}(y, \tau) d\tau, \quad (5.35)$$

e

$$K_{g_2^1}^1 \bar{S}(y) = \int_0^L \frac{\bar{S}(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} k^{1,0}(y, \tau) d\tau, \quad (5.36)$$

e funções $K_b^0(B_0, B_L)$ e $K_b^1(B_0, B_L)$ escritas como,

$$K_b^0(B_0, B_L) = \int_0^1 \left[\frac{(1 - \rho_L(-\mu'))B_L(-\mu') \left(e^{-\frac{1}{\mu'}(L-y)} + \rho_0(\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(y+L)} \right)}{2(1 - \rho_0(\mu')\rho_L(-\mu')e^{-\frac{2L}{\mu'}})} + \frac{(1 - \rho_0(\mu')B_0(\mu')) \left(e^{-\frac{y}{\mu'}} + \rho_L(-\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-y)} \right)}{2(1 - \rho_0(\mu')\rho_L(-\mu')e^{-\frac{2L}{\mu'}})} \right] d\mu' \quad (5.37)$$

e

$$K_b^1(B_0, B_L) = \int_0^1 \left[\frac{\mu'(1 - \rho_L(-\mu'))B_L(-\mu') \left(-e^{-\frac{1}{\mu'}(L-y)} + \rho_0(\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(y+L)} + \right)}{2(1 - \rho_0(\mu')\rho_L(-\mu')e^{-\frac{2L}{\mu'}})} + \frac{\mu'(1 - \rho_0(\mu')B_0(\mu')) \left(e^{-\frac{y}{\mu'}} + \rho_L(-\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-y)} \right)}{2(1 - \rho_0(\mu')\rho_L(-\mu')e^{-\frac{2L}{\mu'}})} \right] d\mu'. \quad (5.38)$$

5.2.1 Remoção da singularidade

As funções $K_{g_1}^{0,0} J_0(y)$, $K_{g_1}^{0,1} J_1(y)$, $K_{g_1}^{1,0} J_0(y)$, $K_{g_1}^{1,1} J_1(y)$, $K_{g_2}^0 \bar{S}(y)$ e $K_{g_2}^1 \bar{S}(y)$ apresentam uma singularidade quando $\tau = y$. Para remover tal singularidade, aplicamos a técnica de remoção de singularidades em cada função.

Para a função $K_{g_1}^{0,0} J_0(y)$ temos

$$\begin{aligned}
K_{g_1}^{0,0} J_0(y) &= \int_0^L k^{0,0}(y, \tau) \left(\frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} \beta_0(\tau) J_0(\tau) - \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} \beta_0(\tau) J_0(y) \right. \\
&\quad \left. + \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} \beta_0(\tau) J_0(y) \right) d\tau \\
&= \int_0^L k^{0,0}(y, \tau) \left(\frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} J_0(\tau) - \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} \beta_0(\tau) J_0(y) \right) d\tau \\
&\quad + \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} \beta_0(\tau) J_0(y) R^{0,0}(y), \tag{5.39}
\end{aligned}$$

onde $R^{0,0}(y) = \int_0^L k^{0,0}(y, \tau) d\tau$.

A singularidade que agora aparece na função $R^{0,0}(y)$ é removida analiticamente solucionando a integral na variável τ , assim como foi feito no Capítulo 3.

Portanto temos

$$\begin{aligned}
R^{0,0}(y) &= \int_0^1 \left\{ \frac{1}{2 \left(1 - \rho_0(\mu') \rho_L(-\mu') e^{-\frac{2L}{\mu'}} \right)} \left[\rho_L(-\mu') \left(e^{-\frac{1}{\mu'}(L-y)} - e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-y)} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \rho_0(\mu') \rho_L(-\mu') \left(-e^{-\frac{1}{\mu'}(3L-y)} + e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-y)} \right) + \rho_0(\mu') \left(-e^{-\frac{1}{\mu'}(y+L)} + e^{-\frac{1}{\mu'}(y)} \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \rho_0(\mu') \rho_L(-\mu') \left(e^{-\frac{1}{\mu'}(L+y)} - e^{-\frac{1}{\mu'}(2L+y)} \right) \right] + \frac{1}{2} \left(2 - e^{-\frac{y}{\mu'}} - e^{-\frac{1}{\mu'}(-y+L)} \right) \right\} d\mu'. \tag{5.40}
\end{aligned}$$

A remoção da singularidade da função $K_{g_1}^{0,1} J_1(y)$ é dada por,

$$\begin{aligned}
K_{g_1}^{0,1} J_1(y) &= \int_0^L k^{0,1}(y, \tau) \left(\frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} \beta_1(\tau) J_1(\tau) - \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} \beta_1(\tau) J_1(y) \right) d\tau \\
&\quad + \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} \beta_1(\tau) J_1(y) R^{0,1}(y), \tag{5.41}
\end{aligned}$$

onde $R^{0,1}(y) = \int_0^L k^{0,1}(y, \tau) d\tau$, ou ainda,

$$\begin{aligned}
R^{0,1}(y) = \int_0^1 \left\{ \frac{\mu'}{2 \left(1 - \rho_0(\mu') \rho_L(-\mu') e^{-\frac{2L}{\mu'}} \right)} \right. & \left[\rho_L(-\mu') \left(e^{-\frac{1}{\mu'}(L-y)} - e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-y)} \right) \right. \\
& + \rho_0(\mu') \rho_L(-\mu') \left(e^{-\frac{1}{\mu'}(3L-y)} - e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-y)} \right) - \rho_0(\mu') \left(-e^{-\frac{1}{\mu'}(y+L)} + e^{-\frac{1}{\mu'}(y)} \right) \\
& \left. \left. + \rho_0(\mu') \rho_L(-\mu') \left(e^{-\frac{1}{\mu'}(L+y)} - e^{-\frac{1}{\mu'}(2L+y)} \right) \right] + \frac{\mu'}{2} \left(-e^{-\frac{y}{\mu'}} + e^{-\frac{1}{\mu'}(-y+L)} \right) \right\} d\mu'
\end{aligned} \tag{5.42}$$

quando a integral na variável τ foi resolvida analiticamente.

Com a remoção da singularidade a função $K_{g1}^{1,0} J_0(y)$ é reescrita como,

$$\begin{aligned}
K_{g1}^{1,0} J_0(y) = \int_0^L k^{1,0}(y, \tau) \left(\frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} \beta_0(\tau) J_0(\tau) - \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} \beta_0(\tau) J_0(y) \right) d\tau \\
+ \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} \beta_0(\tau) J_0(y) R^{1,0}(y), \tag{5.43}
\end{aligned}$$

onde $R^{1,0}(y) = \int_0^L k^{1,0}(y, \tau) d\tau$. Solucionando analiticamente a integral na variável τ da função $R^{1,0}(y)$, a fim de remover a singularidade dessa função, temos

$$\begin{aligned}
R^{1,0}(y) = \int_0^1 \left\{ \frac{\mu'}{2 \left(1 - \rho_0(\mu') \rho_L(-\mu') e^{-\frac{2L}{\mu'}} \right)} \right. & \left[-\rho_L(-\mu') \left(e^{-\frac{1}{\mu'}(L-y)} - e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-y)} \right) \right. \\
& + \rho_0(\mu') \rho_L(-\mu') \left(e^{-\frac{1}{\mu'}(3L-y)} - e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-y)} \right) + \rho_0(\mu') \left(-e^{-\frac{1}{\mu'}(y+L)} + e^{-\frac{1}{\mu'}(y)} \right) \\
& \left. \left. + \rho_0(\mu') \rho_L(-\mu') \left(e^{-\frac{1}{\mu'}(L+y)} - e^{-\frac{1}{\mu'}(2L+y)} \right) \right] + \frac{\mu'}{2} \left(-e^{-\frac{y}{\mu'}} + e^{-\frac{1}{\mu'}(-y+L)} \right) \right\} d\mu'.
\end{aligned} \tag{5.44}$$

Por fim, a função $K_{g1}^{1,1} J_1(y)$ é dada por

$$\begin{aligned}
K_{g1}^{1,1} J_1(y) &= \int_0^L k^{1,1}(y, \tau) \left(\frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} J_1(\tau) - \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} J_1(y) + \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} J_1(y) \right) d\tau \\
&= \int_0^L k^{1,1}(y, \tau) \left(\frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} J_1(\tau) - \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} J_1(y) \right) d\tau + \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} J_1(y) R^{1,1}(y),
\end{aligned} \tag{5.45}$$

sendo $R^{1,1}(y) = \int_0^L k^{1,1}(y, \tau) d\tau$, ou ainda

$$\begin{aligned}
R^{1,1}(y) = \int_0^1 \left\{ \frac{\mu'^2}{2 \left(1 - \rho_0(\mu') \rho_L(-\mu') e^{-\frac{2L}{\mu'}} \right)} \right. & \left[-\rho_L(-\mu') \left(e^{-\frac{1}{\mu'}(L-y)} - e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-y)} \right) \right. \\
& + \rho_0(\mu') \rho_L(-\mu') \left(-e^{-\frac{1}{\mu'}(3L-y)} + e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-y)} \right) - \rho_0(\mu') \left(-e^{-\frac{1}{\mu'}(y+L)} + e^{-\frac{1}{\mu'}(y)} \right) \\
& \left. \left. + \rho_0(\mu') \rho_L(-\mu') \left(e^{-\frac{1}{\mu'}(L+y)} - e^{-\frac{1}{\mu'}(2L+y)} \right) \right] + \frac{\mu'^2}{2} \left(2 - e^{-\frac{y}{\mu'}} - e^{-\frac{1}{\mu'}(-y+L)} \right) \right\} d\mu'
\end{aligned} \tag{5.46}$$

quando soluciona a integral na variável τ .

Aplicando a remoção de singularidades nas funções $K_{g_2}^0 \bar{S}(y)$ e $K_{g_2}^1 \bar{S}(y)$ obtemos,

$$\begin{aligned}
K_{g_2}^0 \bar{S}(y) &= \int_0^L k^{0,0}(y, \tau) \left(\frac{\bar{S}(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} - \frac{\bar{S}(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} + \frac{\bar{S}(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} \right) d\tau \\
&= \int_0^L k^{0,0}(y, \tau) \left(\frac{\bar{S}(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} - \frac{\bar{S}(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} \right) d\tau + \frac{\bar{S}(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} R^{0,0}(y).
\end{aligned} \tag{5.47}$$

e

$$\begin{aligned}
K_{g_2}^1 \bar{S}(y) &= \int_0^L k^{1,0}(y, \tau) \left(\frac{\bar{S}(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} - \frac{\bar{S}(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} + \frac{\bar{S}(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} \right) d\tau \\
&= \int_0^L k^{1,0}(y, \tau) \left(\frac{\bar{S}(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} - \frac{\bar{S}(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} \right) d\tau + \frac{\bar{S}(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} R^{1,0}(y).
\end{aligned} \tag{5.48}$$

5.2.2 Cálculo do fluxo escalar na malha

Aproximando os operadores integrais, $K_{g_1}^{0,0}$, $K_{g_1}^{1,0}$, $K_{g_1}^{0,1}$ e $K_{g_1}^{1,1}$, aplicando o método de Nyström e avaliando as equações (5.24) e (5.25) em cada ponto da malha obtemos,

$$\begin{aligned}
J_0(y_i) - & \left[\sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq y_i}}^N w(\tau_j) k^{0,0}(y_i, \tau_j) \left(J_0(\tau_j) \beta_0(\tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau_j)}{\bar{\sigma}_t(\tau_j)} - J_0(y_i) \beta_0(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} \right) \right. \\
& \left. + J_0(y_i) \beta_0(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} R^{0,0}(y_i) \right] \\
- & \left[\sum_{j=1}^N w(\tau_j) k^{0,1}(y_i, \tau_j) \left[J_1(\tau_j) \beta_1(\tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau_j)}{\bar{\sigma}_t(\tau_j)} - J_1(y_i) \beta_1(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} \right] \right. \\
& \left. + J_1(y_i) \beta_1(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} R^{0,1}(y_i) \right] = K_{g^2}^0 \bar{S}(y_i) + K_g^0(B_0, B_1) \quad (5.49)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
J_1(y_i) - & \left[\sum_{j=1}^N w(\tau_j) k^{1,0}(y_i, \tau_j) \left[J_0(\tau_j) \beta_0(\tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau_j)}{\bar{\sigma}_t(\tau_j)} - J_0(y_i) \beta_0(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} \right] \right. \\
& \left. + J_0(y_i) \beta_0(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} R^{1,0}(y_i) \right] \\
+ & \left[\sum_{j=1}^N w(\tau_j) k^{1,1}(y_i, \tau_j) \left[J_1(\tau_j) \beta_1(\tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau_j)}{\bar{\sigma}_t(\tau_j)} - J_1(y_i) \beta_1(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} \right] \right. \\
& \left. + J_1(y_i) \beta_1(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} R^{1,1}(y_i) \right] = K_{g^2}^1 \bar{S}(y_i) + K_g^1(B_0, B_1). \quad (5.50)
\end{aligned}$$

Podemos reescrever as equações (5.49) e (5.50) como o sistema,

$$\begin{bmatrix}
1 + \beta_{01} \frac{\bar{\sigma}_{s1}}{\bar{\sigma}_{t1}} (c1_1 - R_1^{0,0}) & \dots & -\beta_{0N} \frac{\bar{\sigma}_{sN}}{\bar{\sigma}_{tN}} w_N k_{1N}^{0,0} & \dots & +\beta_{11} \frac{\bar{\sigma}_{s1}}{\bar{\sigma}_{t1}} (c2_1 - R_1^{0,1}) & \dots & -\beta_{1N} \frac{\bar{\sigma}_{sN}}{\bar{\sigma}_{tN}} w_N k_{1N}^{0,1} & J_{01} \\
\vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\
-\beta_{01} \frac{\bar{\sigma}_{s1}}{\bar{\sigma}_{t1}} w_1 k_{N1}^{0,0} & \dots & 1 + \beta_{0N} \frac{\bar{\sigma}_{sN}}{\bar{\sigma}_{tN}} (c1_N - R_N^{0,0}) & \dots & -\beta_{11} \frac{\bar{\sigma}_{s1}}{\bar{\sigma}_{t1}} w_1 k_{N1}^{0,1} & \dots & +\beta_{1N} \frac{\bar{\sigma}_{sN}}{\bar{\sigma}_{tN}} (c2_N - R_N^{0,1}) & J_{0N} \\
+\beta_{01} \frac{\bar{\sigma}_{s1}}{\bar{\sigma}_{t1}} (c3_1 - R_1^{1,0}) & \dots & -\beta_{0N} \frac{\bar{\sigma}_{sN}}{\bar{\sigma}_{tN}} w_N k_{1N}^{1,0} & \dots & 1 + \beta_{11} \frac{\bar{\sigma}_{s1}}{\bar{\sigma}_{t1}} (c4_1 - R_1^{1,1}) & \dots & -\beta_{1N} \frac{\bar{\sigma}_{sN}}{\bar{\sigma}_{tN}} w_N k_{1N}^{1,1} & J_{11} \\
\vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots & \dots & \dots & \vdots \\
-\beta_{01} \frac{\bar{\sigma}_{s1}}{\bar{\sigma}_{t1}} w_1 k_{N1}^{1,0} & \dots & +\beta_{0N} \frac{\bar{\sigma}_{sN}}{\bar{\sigma}_{tN}} (c3_N - R_N^{1,0}) & \dots & -\beta_{11} \frac{\bar{\sigma}_{s1}}{\bar{\sigma}_{t1}} w_1 k_{N1}^{1,1} & \dots & 1 + \beta_{1N} \frac{\bar{\sigma}_{sN}}{\bar{\sigma}_{tN}} (c4_N - R_N^{1,1}) & J_{1N}
\end{bmatrix} =
\begin{bmatrix}
K_{g2}^0 \bar{S}_1 + K_b^0 (B_0, B_L) \\
\vdots \\
K_{g2}^0 \bar{S}_N + K_b^0 (B_0, B_L) \\
K_{g1}^1 \bar{S}_1 + K_b^1 (B_0, B_L) \\
\vdots \\
K_{g1}^1 \bar{S}_N + K_b^1 (B_0, B_L)
\end{bmatrix},
\tag{5.51}$$

onde $c1_i = \sum_{j \neq i}^N w_j k_{ij}^{0,0}$, $i = 1, 2, 3, \dots, N$, $c2_i = \sum_{j \neq i}^N w_j k_{ij}^{0,1}$, $i = 1, 2, 3, \dots, N$, $c3_i = \sum_{j \neq i}^N w_j k_{ij}^{1,0}$, $i = 1, 2, 3, \dots, N$ e $c4_i = \sum_{j \neq i}^N w_j k_{ij}^{1,1}$, $i = 1, 2, 3, \dots, N$.

5.3 Anisotropia quadrática

Nesta seção vamos considerar a equação de transporte (1.1) para o caso com anisotropia quadrática, ou seja,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, \mu) + \sigma_t(x) \Psi(x, \mu) = \frac{\sigma_s(x)}{2} \int_{-1}^1 \left(\beta_0(x) + \beta_1(x) \mu \mu' + \beta_2(x) \left(\frac{3\mu^2}{2} - \frac{1}{2} \right) \left(\frac{3\mu'^2}{2} - \frac{1}{2} \right) \right) \bar{\Psi}(x, \mu') d\mu' + S(x), \quad (5.52)$$

sendo esta sujeita as condições de contorno (1.3) e (1.4).

Considerando a resolução apresentada na seção 5.1 temos que a formulação integral para o problema de transporte com anisotropia quadrática é dada pela equação (5.14) considerando $M = 2$, $l = 0$, $l = 1$ e $l = 2$. Assim temos que

$$J_0(y) - K_{g1}^{0,0} J_0(y) + K_{g1}^{0,1} J_1(y) + K_{g1}^{0,2} J_2(y) = K_{g2}^0 \bar{S}(y) + K_g^0(B_0, B_1), \quad (5.53)$$

$$J_1(y) - K_{g1}^{1,0} J_0(y) + K_{g1}^{1,1} J_1(y) + K_{g1}^{1,2} J_2(y) = K_{g2}^1 \bar{S}(y) + K_g^1(B_0, B_1), \quad (5.54)$$

e

$$J_2(y) - K_{g1}^{2,0} J_0(y) + K_{g1}^{2,1} J_1(y) + K_{g1}^{2,2} J_2(y) = K_{g2}^2 \bar{S}(y) + K_g^2(B_0, B_1). \quad (5.55)$$

Podemos escrever (5.53), (5.54) e (5.55) como o seguinte sistema,

$$\begin{bmatrix} 1 - K_{g1}^{0,0} & -K_{g1}^{0,1} & -K_{g1}^{0,2} \\ -K_{g1}^{1,0} & 1 - K_{g1}^{1,1} & -K_{g1}^{1,2} \\ -K_{g1}^{2,0} & -K_{g1}^{2,1} & 1 - K_{g1}^{2,2} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} J_0(y) \\ J_1(y) \\ J_2(y) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} K_{g2}^0 \bar{S}(y) + K_b^0(B_0, B_L) \\ K_{g2}^1 \bar{S}(y) + K_b^1(B_0, B_L) \\ K_{g2}^2 \bar{S}(y) + K_b^2(B_0, B_L) \end{bmatrix}. \quad (5.56)$$

As função $K_{g1}^{0,0} J_0(y)$, $K_{g1}^{0,1} J_1(y)$, $K_{g1}^{1,0} J_0(y)$ e $K_{g1}^{1,1} J_1(y)$ são dadas em (5.27), (5.29), (5.31) e (5.33), respectivamente.

A função $K_{g1}^{0,2} J_2(y)$ é escrita como,

$$K_{g1}^{0,2} J_2(y) = \int_0^L J_2(\tau) k^{0,2}(y, \tau) \beta_2(\tau) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} d\tau \quad (5.57)$$

sendo

$$k^{0,2}(y, \tau) = \int_0^1 \left(\frac{3}{4}\mu'^2 - \frac{1}{4} \right) \left[\frac{1}{\mu'(1 - \rho_0(\mu')\rho_L(-\mu')e^{-\frac{2L}{\mu'}})} \left(\rho_0(\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(y+\tau)} \right. \right. \\ \left. \left. + \rho_L(-\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-\tau-y)} + \rho_0(\mu')\rho_L(-\mu') \left(e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-\tau+y)} + e^{-\frac{1}{\mu'}(2L+\tau-y)} \right) \right) \right. \\ \left. + \frac{e^{-\frac{1}{\mu'}|y-\tau|}}{\mu'} \right] d\mu'. \quad (5.58)$$

A função $K_{g_1}^{1,2} J_2(y)$ é dada por,

$$K_{g_1}^{1,2} J_2(y) = \int_0^L J_2(\tau) k^{1,2}(y, \tau) \beta_2(\tau) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} d\tau \quad (5.59)$$

sendo

$$k^{1,2}(y, \tau) = \int_0^1 \left(\frac{3}{4}\mu'^2 - \frac{1}{4} \right) \left[\frac{1}{(1 - \rho_0(\mu')\rho_L(-\mu')e^{-\frac{2L}{\mu'}})} \left(\rho_0(\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(y+\tau)} \right. \right. \\ \left. \left. + \rho_0(\mu')\rho_L(-\mu') \left(e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-\tau+y)} - e^{-\frac{1}{\mu'}(2L+\tau-y)} \right) \right) \right. \\ \left. - \rho_L(-\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-\tau-y)} \right) + \frac{y - \tau}{|y - \tau|} e^{-\frac{1}{\mu'}|y-\tau|} \left. \right] d\mu'. \quad (5.60)$$

Escrevemos $K_{g_1}^{2,0} J_0(y)$ como,

$$K_{g_1}^{2,0} J_0(y) = \int_0^L J_0(\tau) k^{2,0}(y, \tau) \beta_0(\tau) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} d\tau \quad (5.61)$$

onde $k^{2,0}(y, \tau) = k^{0,2}(y, \tau)$ e é dado em (5.58).

A função $K_{g_1}^{2,1} J_1(y)$ é dada por,

$$K_{g_1}^{2,1} J_1(y) = \int_0^L J_1(\tau) k^{2,1}(y, \tau) \beta_1(\tau) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} d\tau \quad (5.62)$$

onde

$$\begin{aligned}
k^{2,1}(y, \tau) = \int_0^1 \left(\frac{3}{4}\mu'^2 - \frac{1}{4} \right) & \left[\frac{1}{(1 - \rho_0(\mu')\rho_L(-\mu')e^{-\frac{2L}{\mu'}})} \left(-\rho_0(\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(y+\tau)} \right. \right. \\
& \left. \left. \rho_0(\mu')\rho_L(-\mu') \left(e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-\tau+y)} - e^{-\frac{1}{\mu'}(2L+\tau-y)} \right) + \rho_L(-\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-\tau-y)} \right) \right. \\
& \left. + \frac{y-\tau}{|y-\tau|} e^{-\frac{1}{\mu'}|y-\tau|} \right] d\mu' \tag{5.63}
\end{aligned}$$

e por fim a função $K_{g1}^{2,2}J_2(y)$ é dada por,

$$K_{g1}^{2,2}J_2(y) = \int_0^L J_2(\tau)k^{2,2}(y, \tau)\beta_2(\tau)\frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)}d\tau \tag{5.64}$$

sendo

$$\begin{aligned}
k^{2,2}(y, \tau) = \int_0^1 \left(\frac{3}{4}\mu'^2 - \frac{1}{4} \right)^2 & \left[\frac{1}{\mu'(1 - \rho_0(\mu')\rho_L(-\mu')e^{-\frac{2L}{\mu'}})} \left(\rho_0(\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(y+\tau)} \right. \right. \\
& \left. \left. \rho_L(-\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-\tau-y)} + \rho_0(\mu')\rho_L(-\mu') \left(e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-\tau+y)} + e^{-\frac{1}{\mu'}(2L+\tau-y)} \right) \right) \right. \\
& \left. + \frac{e^{-\frac{1}{\mu'}|y-\tau|}}{\mu'} \right] d\mu'. \tag{5.65}
\end{aligned}$$

Nas equações (5.35) e (5.36) temos as funções $K_{g2}^0\bar{S}(y)$ e $K_{g2}^1\bar{S}(y)$, respectivamente, já a função $K_{g2}^2\bar{S}(y)$ é dada por,

$$K_{g2}^2\bar{S}(y) = \int_0^L \frac{\bar{S}(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)}k^{0,2}(y, \tau)d\tau. \tag{5.66}$$

As funções $K_b^0(B_0, B_L)$ e $K_b^1(B_0, B_L)$ são dadas em (5.37) e (5.38) respectivamente e $K_b^2(B_0, B_L)$ é dada por,

$$\begin{aligned}
K_b^0(B_0, B_L) = & \int_2^1 \left(\frac{3}{4}\mu'^2 - \frac{1}{4} \right) \left[\frac{(1 - \rho_L(-\mu'))B_L(-\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(L-y)}}{1 - \rho_0(\mu')\rho_L(-\mu')e^{-\frac{2L}{\mu'}}} \right. \\
& + \frac{(1 - \rho_0(\mu')B_0(\mu'))e^{-\frac{y}{\mu'}} + (1 - \rho_L(-\mu'))B_L(-\mu')\rho_0(\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(y+L)}}{1 - \rho_0(\mu')\rho_L(-\mu')e^{-\frac{2L}{\mu'}}} \\
& \left. + \frac{(1 - \rho_0(\mu'))B_0(\mu')\rho_L(-\mu')e^{-\frac{1}{\mu'}(2L-y)}}{1 - \rho_0(\mu')\rho_L(-\mu')e^{-\frac{2L}{\mu'}}} \right] d\mu'. \quad (5.67)
\end{aligned}$$

5.3.1 Remoção da singularidade

A funções $K_{g_1}^{l,k} J_k(y)$ e $K_{g_2}^k \bar{S}(y)$ apresentam uma singularidade nos núcleos quando $\tau = y$. Logo, aplicamos a técnica de remoção de singularidade nessas funções. A remoção da singularidade das funções $K_{g_1}^{0,0} J_0(y)$, $K_{g_1}^{0,1} J_1(y)$, $K_{g_1}^{1,0} J_0(y)$, $K_{g_1}^{1,1} J_1(y)$, $K_{g_2}^0 S(y)$ e $K_{g_2}^1 S(y)$ são dada em (5.39), (5.41), (5.43), (5.45), (5.47) e (5.48), respectivamente.

No caso da função $K_{g_1}^{0,2} J_2(y)$ quando aplicamos a técnica de remoção de singularidades ela é reescrita como,

$$\begin{aligned}
K_{g_1}^{0,2} J_2(y) = & \int_0^L k^{0,2}(y, \tau) \left(\beta_2(\tau) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} J_2(\tau) - \beta_2(y) \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} J_2(y) \right) d\tau \\
& + \beta_2(y) \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} J_2(y) R^{0,2}(y), \quad (5.68)
\end{aligned}$$

onde $R^{0,2}(y) = \int_0^L k^{0,2}(y, \tau) d\tau$. Assim como nos casos anteriores a remoção da singularidade da função $R^{0,2}(y)$ é feita analiticamente resolvendo a integral com relação a variável τ , ou seja,

$$\begin{aligned}
R^{0,2}(y) = \int_0^1 \left(\frac{3}{4}\mu'^2 - \frac{1}{4} \right) & \left\{ \frac{1}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}} \left[\rho_0(\mu) \left(-e^{-\frac{1}{\mu}(y+L)} + e^{-\frac{1}{\mu}(y)} \right) \right. \right. \\
& \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu) \left(-e^{-\frac{1}{\mu}(3L-y)} + e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y)} + e^{-\frac{1}{\mu}(L+y)} - e^{-\frac{1}{\mu}(2L+y)} \right) + \\
& \left. \left. + \rho_L(-\mu) \left(e^{-\frac{1}{\mu}(L-y)} - e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y)} \right) \right] + 2 - e^{-\frac{y}{\mu}} - e^{-\frac{1}{\mu}(-y+L)} \right\} d\mu.
\end{aligned} \tag{5.69}$$

Removendo a singularidade da função $K_{g_1}^{1,2} J_2(y)$ nós temos

$$\begin{aligned}
K_{g_1}^{1,2} J_2(y) = \int_0^L k^{1,2}(y, \tau) & \left(\beta_2(\tau) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} J_2(\tau) - \beta_2(y) \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} J_2(y) \right) d\tau \\
& + \beta_2(y) \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} J_2(y) R^{1,2}(y),
\end{aligned} \tag{5.70}$$

onde $R^{1,2}(y) = \int_0^L k^{1,2}(y, \tau) d\tau$, ou ainda,

$$\begin{aligned}
R^{1,2}(y) = \int_0^1 \left(\frac{3}{4}\mu'^2 - \frac{1}{4} \right) & \left\{ \frac{\mu}{1 - \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu)e^{-\frac{2L}{\mu}}} \left[\rho_0(\mu) \left(e^{-\frac{y}{\mu}} - e^{-\frac{1}{\mu}(y+L)} \right) \right. \right. \\
& + \rho_0(\mu)\rho_L(-\mu) \left(e^{-\frac{1}{\mu}(3L-y)} - e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y)} + e^{-\frac{1}{\mu}(L+y)} - e^{-\frac{1}{\mu}(2L+y)} \right) \\
& \left. \left. - \rho_L(-\mu) \left(e^{-\frac{1}{\mu}(L-y)} - e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y)} \right) \right] - e^{-\frac{y}{\mu}} + e^{-\frac{1}{\mu}(-y+L)} \right\} d\mu
\end{aligned} \tag{5.71}$$

quando solucionada a integral na variável τ .

A função $K_{g_1}^{2,0} J_0(y)$ é dada por,

$$\begin{aligned}
K_{g_1}^{2,0} J_0(y) = \int_0^L k^{2,0}(y, \tau) & \left(\beta_0(\tau) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} J_0(\tau) - \beta_0(y) \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} J_0(y) \right) d\tau \\
& + \beta_0(y) \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} J_0(y) R^{2,0}(y)
\end{aligned} \tag{5.72}$$

com $R^{2,0}(y) = R^{0,2}(y)$.

Para $K_{g_1}^{2,1} J_1(y)$ temos,

$$K_{g_1}^{2,1} J_1(y) = \int_0^L k^{2,1}(y, \tau) \left(\beta_1(\tau) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} J_1(\tau) - \beta_1(y) \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} J_1(y) \right) d\tau + \beta_1(y) \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} J_1(y) R^{2,1}(y) \quad (5.73)$$

onde $R^{2,1}(y) = \int_0^L k^{2,1}(y, \tau) d\tau$.

Resolvendo a integral na variável espacial da função $R^{2,1}(y)$ temos,

$$R^{2,1}(y) = \int_0^1 \left(\frac{3}{4} \mu'^2 - \frac{1}{4} \right) \left\{ \frac{\mu}{1 - \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{2L}{\mu}}} \left[\rho_0(\mu) \left(e^{-\frac{1}{\mu}(y+L)} - e^{-\frac{1}{\mu}(y)} \right) + \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) \left(-e^{-\frac{1}{\mu}(3L-y)} + e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y)} + e^{-\frac{1}{\mu}(L+y)} - e^{-\frac{1}{\mu}(2L+y)} \right) + \rho_L(-\mu) \left(e^{-\frac{1}{\mu}(L-y)} - e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y)} \right) \right] - e^{-\frac{y}{\mu}} + e^{-\frac{1}{\mu}(-y+L)} \right\} d\mu. \quad (5.74)$$

Por fim temos

$$K_{g_1}^{2,2} J_1(y) = \int_0^L k^{2,2}(y, \tau) \left(\beta_1(\tau) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} J_1(\tau) - \beta_1(y) \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} J_1(y) \right) d\tau + \beta_1(y) \frac{\bar{\sigma}_s(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} J_1(y) R^{2,2}(y), \quad (5.75)$$

onde $R^{2,2}(y) = \int_0^L k^{2,2}(y, \tau) d\tau$, ou ainda,

$$R^{2,2}(y) = \int_0^1 \left(\frac{3}{4} \mu'^2 - \frac{1}{4} \right)^2 \left\{ \frac{1}{1 - \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) e^{-\frac{2L}{\mu}}} \left[\rho_0(\mu) \left(e^{-\frac{1}{\mu}(y)} - e^{-\frac{1}{\mu}(y+L)} \right) + \rho_0(\mu) \rho_L(-\mu) \left(-e^{-\frac{1}{\mu}(3L-y)} + e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y)} e^{-\frac{1}{\mu}(L+y)} - e^{-\frac{1}{\mu}(2L+y)} \right) + \rho_L(-\mu) \left(e^{-\frac{1}{\mu}(L-y)} - e^{-\frac{1}{\mu}(2L-y)} \right) \right] + 2 - e^{-\frac{y}{\mu}} - e^{-\frac{1}{\mu}(-y+L)} \right\} d\mu \quad (5.76)$$

quando solucionada a integral na variável τ .

As funções $K_{g_2}^0 \bar{S}(y)$ e $K_{g_2}^0 \bar{S}(y)$ são dadas em (5.47) e (5.48) respectivamente e a função $K_{g_2}^2 \bar{S}(y)$ é reescrita da seguinte forma

$$K_{g_2}^2 \bar{S}(y) = \int_0^L k^{0,2}(y, \tau) \left(\frac{\bar{S}(\tau)}{\bar{\sigma}_t(\tau)} - \frac{\bar{S}(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} \right) d\tau + \frac{\bar{S}(y)}{\bar{\sigma}_t(y)} R^{0,2}(y). \quad (5.77)$$

5.3.2 Cálculo do fluxo escalar na malha

Aplicando o método de Nyström nos operadores integrais da equação de transporte com anisotropia quadrática, equações (5.53), (5.54) e (5.55), e avaliando essas equações em cada ponto da malha nós obtemos,

$$\begin{aligned} J_0(y_i) - & \left[\sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq y_i}}^N w(\tau_j) k^{0,0}(y_i, \tau_j) \left(J_0(\tau_j) \beta_0(\tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau_j)}{\bar{\sigma}_t(\tau_j)} - J_0(y_i) \beta_0(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} \right) \right. \\ & \left. + J_0(y_i) \beta_0(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} R^{0,0}(y_i) \right] \\ - & \left[\sum_{j=1}^N w(\tau_j) k^{0,1}(y_i, \tau_j) \left(J_1(\tau_j) \beta_1(\tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau_j)}{\bar{\sigma}_t(\tau_j)} - J_1(y_i) \beta_1(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} \right) \right. \\ & \left. + J_1(y_i) \beta_1(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} R^{1,0}(y_i) \right] \\ - & \left[\sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq y_i}}^N w(\tau_j) k^{0,2}(y_i, \tau_j) \left(J_2(\tau_j) \beta_2(\tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau_j)}{\bar{\sigma}_t(\tau_j)} - J_2(y_i) \beta_2(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} \right) \right. \\ & \left. + J_2(y_i) \beta_2(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} R^{0,2}(y_i) \right] = K_{g_2}^0 \bar{S}(y_i) + K_g^0(B_0, B_1), \quad (5.78) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
J_1(y_i) - & \left[\sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq y_i}}^N w(\tau_j) k^{1,0}(y_i, \tau_j) \left(J_0(\tau_j) \beta_0(\tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau_j)}{\bar{\sigma}_t(\tau_j)} - J_0(y_i) \beta_0(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} \right) \right. \\
& \left. + J_0(y_i) \beta_0(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} R^{1,0}(y_i) \right] \\
- & \left[\sum_{j=1}^N w(\tau_j) k^{1,1}(y_i, \tau_j) \left(J_1(\tau_j) \beta_1(\tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau_j)}{\bar{\sigma}_t(\tau_j)} - J_1(y_i) \beta_1(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} \right) \right. \\
& \left. + J_1(y_i) \beta_1(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} R^{1,1}(y_i) \right] \\
- & \left[\sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq y_i}}^N w(\tau_j) k^{1,2}(y_i, \tau_j) \left(J_2(\tau_j) \beta_2(\tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau_j)}{\bar{\sigma}_t(\tau_j)} - J_2(y_i) \beta_2(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} \right) \right. \\
& \left. + J_2(y_i) \beta_2(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} R^{1,2}(y_i) \right] = K_{g^2}^1 \bar{S}(y_i) + K_g^1(B_0, B_1) \quad (5.79)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
J_2(y_i) - & \left[\sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq y_i}}^N w(\tau_j) k^{2,0}(y_i, \tau_j) \left(J_0(\tau_j) \beta_0(\tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau_j)}{\bar{\sigma}_t(\tau_j)} - J_0(y_i) \beta_0(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} \right) \right. \\
& \left. + J_0(y_i) \beta_0(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} R^{2,0}(y_i) \right] \\
- & \left[\sum_{j=1}^N w(\tau_j) k^{2,1}(y_i, \tau_j) \left(J_1(\tau_j) \beta_1(\tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau_j)}{\bar{\sigma}_t(\tau_j)} - J_1(y_i) \beta_1(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} \right) \right. \\
& \left. + J_1(y_i) \beta_1(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} R^{2,1}(y_i) \right] \\
- & \left[\sum_{\substack{j=1 \\ \tau_j \neq y_i}}^N w(\tau_j) k^{2,2}(y_i, \tau_j) \left(J_2(\tau_j) \beta_2(\tau_j) \frac{\bar{\sigma}_s(\tau_j)}{\bar{\sigma}_t(\tau_j)} - J_2(y_i) \beta_2(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} \right) \right. \\
& \left. + \beta_2(y_i) J_2(y_i) \frac{\bar{\sigma}_s(y_i)}{\bar{\sigma}_t(y_i)} R^{2,2}(y_i) \right] = K_{g^2}^2 \bar{S}(y_i) + K_g^2(B_0, B_1). \quad (5.80)
\end{aligned}$$

Considerando as equações (5.78) - (5.80) obtemos o seguinte sistema,

$$\begin{bmatrix}
1 + \beta_{01} \frac{\sigma_{s1}}{\sigma_{t1}} (c1_1 - R_1^{0,0}) & \dots & -\beta_{0N} \frac{\sigma_{sN}}{\sigma_{tN}} w_N k_{1N}^{0,0} & \dots & \beta_{11} \frac{\sigma_{s1}}{\sigma_{t1}} (c2_1 - R_1^{0,1}) & \dots & -\beta_{1N} \frac{\sigma_{sN}}{\sigma_{tN}} w_N k_{1N}^{0,1} & \dots & \beta_{21} \frac{\sigma_{s1}}{\sigma_{t1}} (c3_1 - R_1^{0,2}) & \dots & -\beta_{2N} \frac{\sigma_{sN}}{\sigma_{tN}} w_N k_{1N}^{0,2} \\
\vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots \\
-\beta_{01} \frac{\sigma_{s1}}{\sigma_{t1}} w_1 k_{N1}^{0,0} & \dots & \dots & \dots & -\beta_{11} \frac{\sigma_{s1}}{\sigma_{t1}} w_1 k_{N1}^{0,1} & \dots & +\beta_{1N} \frac{\sigma_{sN}}{\sigma_{tN}} (c2_N - R_N^{0,1}) & \dots & -\beta_{21} \frac{\sigma_{s1}}{\sigma_{t1}} w_1 k_{N1}^{0,2} & \dots & \beta_{2N} \frac{\sigma_{sN}}{\sigma_{tN}} (c3_N - R_N^{0,2}) \\
\beta_{01} \frac{\sigma_{s1}}{\sigma_{t1}} (c4_1 - R_1^{1,0}) & \dots & -\beta_{0N} \frac{\sigma_{sN}}{\sigma_{tN}} w_N k_{1N}^{1,0} & \dots & 1 + \beta_{11} \frac{\sigma_{s1}}{\sigma_{t1}} (c5_1 - R_1^{1,1}) & \dots & -\beta_{1N} \frac{\sigma_{sN}}{\sigma_{tN}} w_N k_{1N}^{1,1} & \dots & \beta_{21} \frac{\sigma_{s1}}{\sigma_{t1}} (c6_1 - R_1^{1,2}) & \dots & -\beta_{2N} \frac{\sigma_{sN}}{\sigma_{tN}} w_N k_{1N}^{1,2} \\
\vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots \\
-\beta_{01} \frac{\sigma_{s1}}{\sigma_{t1}} w_1 k_{N1}^{1,0} & \dots & \dots & \dots & -\beta_{11} \frac{\sigma_{s1}}{\sigma_{t1}} w_1 k_{N1}^{1,1} & \dots & 1 + \beta_{1N} \frac{\sigma_{sN}}{\sigma_{tN}} (c5_N - R_N^{1,1}) & \dots & -\beta_{21} \frac{\sigma_{s1}}{\sigma_{t1}} w_1 k_{N1}^{1,2} & \dots & \beta_{2N} \frac{\sigma_{sN}}{\sigma_{tN}} (c6_N - R_N^{1,2}) \\
\beta_{01} \frac{\sigma_{s1}}{\sigma_{t1}} (c7_1 - R_1^{2,0}) & \dots & -\beta_{0N} \frac{\sigma_{sN}}{\sigma_{tN}} w_N k_{1N}^{2,0} & \dots & \beta_{11} \frac{\sigma_{s1}}{\sigma_{t1}} (c8_1 - R_1^{2,1}) & \dots & -\beta_{1N} \frac{\sigma_{sN}}{\sigma_{tN}} w_N k_{1N}^{2,1} & \dots & 1 - \beta_{21} \frac{\sigma_{s1}}{\sigma_{t1}} (c9_1 - R_1^{2,2}) & \dots & -\beta_{2N} \frac{\sigma_{sN}}{\sigma_{tN}} w_N k_{1N}^{2,2} \\
\vdots & \vdots & \dots & \dots & \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots & \dots & \vdots \\
-\beta_{01} \frac{\sigma_{s1}}{\sigma_{t1}} w_1 k_{N1}^{2,0} & \dots & \beta_{0N} \frac{\sigma_{sN}}{\sigma_{tN}} (c7_N - R_N^{2,0}) & \dots & -\beta_{11} \frac{\sigma_{s1}}{\sigma_{t1}} w_1 k_{N1}^{2,1} & \dots & \beta_{1N} \frac{\sigma_{sN}}{\sigma_{tN}} (c8_N - R_N^{2,1}) & \dots & -\beta_{21} \frac{\sigma_{s1}}{\sigma_{t1}} w_1 k_{N1}^{2,2} & \dots & 1 + \beta_{2N} \frac{\sigma_{sN}}{\sigma_{tN}} (c9_N - R_N^{2,2})
\end{bmatrix}$$

$$\begin{bmatrix}
J_{01} \\
\vdots \\
J_{0N} \\
J_{11} \\
\vdots \\
J_{1N} \\
J_{21} \\
\vdots \\
J_{2N}
\end{bmatrix}
=
\begin{bmatrix}
K_{g2}^0 \bar{S}_1 + K_b^0 (B_0, B_L) \\
\vdots \\
K_{g2}^0 \bar{S}_N + K_b^0 (B_0, B_L) \\
K_{g1}^1 \bar{S}_1 + K_b^1 (B_0, B_L) \\
\vdots \\
K_{g1}^1 \bar{S}_N + K_b^1 (B_0, B_L) \\
K_{g1}^2 \bar{S}_1 + K_b^2 (B_0, B_L) \\
\vdots \\
K_{g1}^2 \bar{S}_N + K_b^2 (B_0, B_L)
\end{bmatrix},
\tag{5.81}$$

onde $c1_i = \sum_{j \neq i}^N w_j k_{ij}^{0,0}$, $i = 1, 2, 3, \dots, N$, $c2_i = \sum_{j \neq i}^N w_j k_{ij}^{0,1}$, $i = 1, 2, 3, \dots, N$, $c3_i = \sum_{j \neq i}^N w_j k_{ij}^{0,2}$, $i = 1, 2, 3, \dots, N$, $c4_i = \sum_{j \neq i}^N w_j k_{ij}^{1,0}$, $i = 1, 2, 3, \dots, N$, $c5_i = \sum_{j \neq i}^N w_j k_{ij}^{1,1}$, $i = 1, 2, 3, \dots, N$, $c6_i = \sum_{j \neq i}^N w_j k_{ij}^{1,2}$, $i = 1, 2, 3, \dots, N$, $c7_i = \sum_{j \neq i}^N w_j k_{ij}^{2,0}$, $i = 1, 2, 3, \dots, N$, $c8_i = \sum_{j \neq i}^N w_j k_{ij}^{2,1}$, $i = 1, 2, 3, \dots, N$ e $c9_i = \sum_{j \neq i}^N w_j k_{ij}^{2,2}$, $i = 1, 2, 3, \dots, N$.

6 RESULTADOS NUMÉRICOS DO PROBLEMA DE TRANSPORTE COM ESPALHAMENTO ANISOTRÓPICO

A fim de validar a eficiência da nossa metodologia na solução do problema de transporte com espalhamento anisotrópico em domínio não homogêneo com condições de contorno semi-refletivas, nós apresentamos nessa seção simulações deste problema para os casos isotrópico, linear e quadrático.

Nossos resultados numéricos são comparados com os trabalhos desenvolvidos por Vargas *et al.* [45] e Azevedo *et al.* [2] e também a solução obtida pelo método Diamond Difference (DD). O problema de transporte com espalhamento isotrópico é solucionado em ambos trabalhos, Vargas *et al.* [45] utilizam o método LTS_N com $N = 300$ enquanto Azevedo *et al.* [2] utilizam o método GFD , neste último trabalho também encontramos simulações para os casos com anisotropia linear e quadrática.

Os algoritmos dessa metodologia foram implementados em linguagem de programação C e simulados em um computador Intel Core i7. Os sistemas lineares foram solucionados aplicado o método de decomposição LU, cuja rotina utilizada está disponível em GNU Scientific Library (GSL) [21] e dessa mesma biblioteca utilizamos as rotinas de integração numéricas para a resolução dos termos integrais do sistema. Todas as integrações foram realizadas com tolerâncias relativas e absolutas menores que 10^{-10} .

6.1 Resultados numéricos

Nessa seção nós apresentamos os resultados numéricos para os seguintes problemas de transporte:

- Problema 1: Comprimento da placa $L = 1$ cm, seções de choque $\sigma_t(x) = \sigma_s(x) = 1.0 \text{ cm}^{-1}$, coeficientes de reflexão $\rho_0(\mu) = \rho_L(\mu) = 0$, contribuição da fronteira $B_0(\mu) = B_L(\mu) = 1.0$, termo fonte $S(x) = e^{-x}$ e $w = 1.0$.
- Problema 2: Comprimento da placa $L = 100$ cm, seções de choque $\sigma_t(x) = \sigma_s(x) = 1.0 \text{ cm}^{-1}$, coeficientes de reflexão $\rho_0(\mu) = \rho_L(\mu) = 0$, contribuição da fronteira $B_0(\mu) = 1.0$ e $B_L(\mu) = 0$, termo fonte $S(x) = e^{-x^2/4}$ e $w = 1.0$.
- Problema 3: Comprimento da placa $L = 1$ cm, seções de choque $\sigma_t(x) = \sigma_s(x) = 1.0 \text{ cm}^{-1}$, coeficientes de reflexão $\rho_0(\mu) = \rho_L(\mu) = 0.5$, contribuição da fronteira $B_0(\mu) = 0.5$ e $B_L(\mu) = 1.0$, termo fonte $S(x) = e^{-x}$ e $w = 0.5 + \beta_1 \mu \mu'$.
- Problema 4: Comprimento da placa $L = 1$ cm, seções de choque $\sigma_t(x) = \sigma_s(x) = 1.0 \text{ cm}^{-1}$, coeficientes de reflexão $\rho_0(\mu) = \rho_L(\mu) = 0.5$, contribuição da fronteira $B_0(\mu) = 0.5$ e $B_L(\mu) = 0.25$, termo fonte $S(x) = e^{-x}$ e $w = 0.1 + \beta_2 P_2(\mu) P_2(\mu')$.

Nos problemas 1 e 2 temos o caso com espalhamento isotrópico, no problema 3 consideramos espalhamento linearmente anisotrópico e no problema 4 temos um problema com anisotropia quadrática, em todos os casos $\beta_l(x)$ são constantes. Nas simulações desses problemas utilizamos a quadratura de Gauss-Legendre.

Tabela 6.1: Comparação entre os resultados numéricos para o fluxo escalar, $2J_0$, do problema 1, com os resultados publicados por Vargas *et al.* [45] e Azevedo *et al.* [2].

x	$LTS_{300}^{[45]}$	$GFD_{400}^{[2]}$	$GFD_{800}^{[2]}$	N = 200	N = 400	N = 800	N=1600	N=3200
0.00	3.514736	3.514725	3.514742	3.514748	3.514748	3.514748	3.514748	3.514748
0.20	4.193457	4.193456	4.193467	4.193470	4.193471	4.193471	4.193471	4.193471
0.40	4.306992	4.306991	4.307001	4.307005	4.307005	4.307005	4.307005	4.307005
0.60	4.162764	4.162763	4.162773	4.162780	4.162778	4.162776	4.162776	4.162776
0.80	3.820951	3.820951	3.820960	3.820961	3.820963	3.820963	3.820963	3.820963
1.00	3.196350	3.196338	3.196349	3.196353	3.196353	3.196353	3.196353	3.196353

Tabela 6.2: Comparação entre os resultados numéricos para a corrente, $2J_1$, do problema 1, com os resultados publicados por Vargas *et al.* [45] e Azevedo *et al.* [2].

x	$LTS_{300}^{[45]}$	$GFD_{400}^{[2]}$	$GFD_{800}^{[2]}$	N = 200	N = 400	N = 800	N=1600	N=3200
0.00	-0.682658	-0.682651	-0.682656	-0.682658	-0.682658	-0.682658	-0.682658	-0.682658
0.20	-0.320120	-0.320119	-0.320119	-0.320121	-0.320120	-0.320119	-0.320119	-0.320119
0.40	-0.023298	-0.023298	-0.023298	-0.023297	-0.023298	-0.023298	-0.023298	-0.023298
0.60	0.219718	0.219718	0.219719	0.219721	0.219719	0.219719	0.219719	0.219719
0.80	0.418684	0.418683	0.418684	0.418688	0.418685	0.418685	0.418685	0.418685
1.00	0.581583	0.581579	0.581582	0.581584	0.581584	0.581584	0.581584	0.581584

Nas tabelas 6.1 e 6.2 apresentamos os resultados numéricos de $2J_0$ e $2J_1$ do problema 1, no qual o espalhamento é isotrópico. Para este problema a precisão dos resultados foi entre 4 a 5 dígitos quando comparadas com os outros dois métodos de solução.

Tabela 6.3: Comparação entre os resultados numéricos para o fluxo escalar, $2J_0$, do problema 2, com os resultados publicados por Vargas *et al.* [45] e Azevedo *et al.* [2].

x	$LTS_{300}^{[45]}$	$GFD_{400}^{[2]}$	$GFD_{800}^{[2]}$	N = 400	N = 800	N=1600	N=3200	N=6400
0.0	8.425920	8.429517	8.443685	8.449803	8.449655	8.449635	8.449633	8.449632
20.0	16.949000	16.929820	16.945922	16.956025	16.952232	16.951756	16.951746	16.951759
40.0	12.747300	12.734579	12.746721	12.750944	12.752013	12.751032	12.751148	12.751131
60.0	8.547020	8.539338	8.547520	8.550859	8.549620	8.550580	8.550461	8.550478
80.0	4.347820	4.344098	4.348319	4.345778	4.349402	4.349856	4.349863	4.349850
100.0	0.121203	0.120914	0.121160	0.121087	0.121239	0.121259	0.121262	0.121262

Tabela 6.4: Comparação entre os resultados numéricos para a corrente, $2J_1$, do problema 2, com os resultados publicados por Vargas *et al.* [45] e Azevedo *et al.* [2].

x	$LTS_{300}^{[45]}$	$GFD_{400}^{[2]}$	$GFD_{800}^{[2]}$	N = 400	N = 800	N=1600	N=3200	N=6400
0.0	-3.474830	-3.474830	-3.472449	-3.474998	-3.474910	-3.474899	-3.474897	-3.474897
20.0	0.070045	0.069921	0.069987	0.070708	0.070204	0.070044	0.069994	0.070014
40.0	0.070015	0.069921	0.069987	0.069510	0.069950	0.069923	0.070026	0.070012
60.0	0.069994	0.069921	0.069987	0.069510	0.069950	0.069923	0.070026	0.070012
80.0	0.069981	0.069921	0.069987	0.070708	0.070204	0.070044	0.069994	0.070014
100.0	0.069977	0.069845	0.069964	0.069910	0.069997	0.070009	0.070010	0.070011

Os resultados numéricos do segundo problema simulado são apresentados nas tabelas 6.3 e 6.4. Neste caso temos um problema com espalhamento isotrópico cujo domínio é igual a 100 cm. Por ser um domínio grande nossa metodologia não gerou resultados com a mesma precisão que os dados da literatura para $2J_0$ já no cálculo $2J_1$ obtivemos mais dígitos de precisão.

Tabela 6.5: Comparação entre os resultados numéricos para o fluxo escalar, $2J_0$, do problema 3, com os resultados publicados por Azevedo *et al.* [2] para $\beta_1 = -0.4$.

x	$GFD_{400}^{[2]}$	N = 100	N = 200	N = 400	N = 800
0.00	2.171404	2.171407	2.171408	2.171408	2.171408
0.20	2.287915	2.287913	2.287916	2.287916	2.287916
0.40	2.228408	2.228409	2.228407	2.228408	2.228408
0.60	2.129973	2.129969	2.129973	2.129973	2.129973
0.80	2.039060	2.039062	2.039060	2.039060	2.039060
1.00	1.999342	1.999341	1.999341	1.999341	1.999341

Tabela 6.6: Comparação entre os resultados numéricos para a corrente, $2J_1$, do problema 3, com os resultados publicados por Azevedo *et al.* [2] para $\beta_1 = -0.4$.

x	$GFD_{400}^{[2]}$	N = 100	N = 200	N = 400	N = 800
0.00	-0.179493	-0.179493	-0.179493	-0.179493	-0.179493
0.20	-0.043131	-0.043130	-0.043130	-0.043130	-0.043130
0.40	0.027270	0.027268	0.027271	0.027271	0.027271
0.60	0.052272	0.052270	0.052273	0.052273	0.052273
0.80	0.042998	0.042998	0.042999	0.042999	0.042999
1.00	0.004747	0.004747	0.004747	0.004747	0.004747

Tabela 6.7: Comparação entre os resultados numéricos para o fluxo escalar, $2J_0$, do problema 3, com os resultados publicados por Azevedo *et al.* [2] para $\beta_1 = -0.2$.

x	$GFD_{400}^{[2]}$	N = 100	N = 200	N = 400	N = 800
0.00	2.172810	2.172813	2.172813	2.172813	2.172813
0.20	2.285582	2.285581	2.285583	2.285583	2.285583
0.40	2.225975	2.225977	2.225974	2.225975	2.225975
0.60	2.128928	2.128924	2.128929	2.128928	2.128928
0.80	2.039572	2.039574	2.039571	2.039571	2.039571
1.00	2.000564	2.000563	2.000563	2.000563	2.000563

Tabela 6.8: Comparação entre os resultados numéricos para a corrente, $2J_1$, do problema 3, com os resultados publicados por Azevedo *et al.* [2] para $\beta_1 = -0.2$.

x	$GFD_{400}^{[2]}$	N = 100	N = 200	N = 400	N = 800
0.00	-0.179721	-0.179721	-0.179721	-0.179721	-0.179721
0.20	-0.043268	-0.043268	-0.043268	-0.043268	-0.043268
0.40	0.027390	0.027388	0.027391	0.027390	0.027391
0.60	0.052573	0.052570	0.052573	0.052573	0.052573
0.80	0.043322	0.043322	0.043323	0.043323	0.043323
1.00	0.004973	0.004973	0.004973	0.004973	0.004973

Tabela 6.9: Comparação entre os resultados numéricos para o fluxo escalar, $2J_0$, do problema 3, com os resultados publicados por Azevedo *et al.* [2] para $\beta_1 = 0$.

x	$GFD_{400}^{[2]}$	N = 100	N = 200	N = 400	N = 800
0.00	2.174212	2.174216	2.174216	2.174216	2.174216
0.20	2.283228	2.283229	2.283229	2.283229	2.283229
0.40	2.223519	2.223522	2.223518	2.223519	2.223519
0.60	2.127872	2.127869	2.127873	2.127873	2.127872
0.80	2.040092	2.040093	2.040091	2.040091	2.040091
1.00	2.001812	2.001811	2.001811	2.001811	2.001811

Tabela 6.10: Comparação entre os resultados numéricos para a corrente, $2J_1$, do problema 3, com os resultados publicados por Azevedo *et al.* [2] para $\beta_1 = 0$.

x	$GFD_{400}^{[2]}$	N = 100	N = 200	N = 400	N = 800
0.00	-0.179948	-0.179948	-0.179948	-0.179948	-0.179948
0.20	-0.043404	-0.043404	-0.043403	-0.043403	-0.043404
0.40	0.027514	0.027512	0.027515	0.027515	0.027515
0.60	0.052879	0.052876	0.052880	0.052879	0.052879
0.80	0.043653	0.043652	0.043653	0.043653	0.043653
1.00	0.005203	0.005203	0.005203	0.005203	0.005203

Tabela 6.11: Comparação entre os resultados numéricos para o fluxo escalar, $2J_0$, do problema 3, com os resultados publicados por Azevedo *et al.* [2] para $\beta_1 = 0.2$.

x	$GFD_{400}^{[2]}$	N = 100	N = 200	N = 400	N = 800
0.00	2.175611	2.175615	2.175615	2.175615	2.175615
0.20	2.280854	2.280856	2.280855	2.280855	2.280855
0.40	2.221039	2.221044	2.221039	2.221039	2.221040
0.60	2.126806	2.126803	2.126807	2.126806	2.126806
0.80	2.040620	2.040621	2.040620	2.040620	2.040620
1.00	2.003085	2.003084	2.003084	2.003084	2.003084

Tabela 6.12: Comparação entre os resultados numéricos para a corrente, $2J_1$, do problema 3, com os resultados publicados por Azevedo *et al.* [2] para $\beta_1 = 0.2$.

x	$GFD_{400}^{[2]}$	N = 100	N = 200	N = 400	N = 800
0.00	-0.180173	-0.180174	-0.180174	-0.180174	-0.180174
0.20	-0.043537	-0.043537	-0.043537	-0.043537	-0.043537
0.40	0.027644	0.027641	0.027644	0.027644	0.027644
0.60	0.053192	0.053189	0.053192	0.053192	0.053192
0.80	0.043990	0.043988	0.043990	0.043990	0.043989
1.00	0.005439	0.005438	0.005438	0.005438	0.005438

Tabela 6.13: Comparação entre os resultados numéricos para o fluxo escalar, $2J_0$, do problema 3, com os resultados publicados por Azevedo *et al.* [2] para $\beta_1 = 0.4$.

x	$GFD_{400}^{[2]}$	N = 100	N = 200	N = 400	N = 800
0.00	2.177005	2.177009	2.177009	2.177009	2.177009
0.20	2.278459	2.278462	2.278460	2.278460	2.278460
0.40	2.218536	2.218542	2.218536	2.218536	2.218536
0.60	2.125729	2.125726	2.125730	2.125729	2.125729
0.80	2.041158	2.041159	2.041157	2.041157	2.041157
1.00	2.004384	2.004383	2.004383	2.004383	2.004383

Tabela 6.14: Comparação entre os resultados numéricos para a corrente, $2J_1$, do problema 3, com os resultados publicados por Azevedo *et al.* [2] para $\beta_1 = 0.4$.

x	$GFD_{400}^{[2]}$	N = 100	N = 200	N = 400	N = 800
0.00	-0.180398	-0.180398	-0.180398	-0.180398	-0.180398
0.20	-0.043668	-0.043668	-0.043668	-0.043668	-0.043668
0.40	0.027778	0.027775	0.027778	0.027778	0.027778
0.60	0.053511	0.053508	0.053512	0.053511	0.053511
0.80	0.044333	0.044332	0.044333	0.044333	0.044333
1.00	0.005679	0.005678	0.005678	0.005678	0.005678

Na tabelas 6.5 - 6.14 são apresentados os resultados para o problema de transporte com anisotropia linear cujos resultados numéricos são comparado com o método GFD [2] . Pra esse problema foram calculadas as quantidades $2J_0$ e $2J_1$ com β_1 variando entre -0.4 e 0.4. Em todas as situações simuladas nós obtivemos 5 dígitos de precisão na solução quando comparada com dados da literatura, sendo esta precisão obtida em $N = 200$ pontos na malha. Na maioria dos casos nossa solução convergiu em $N = 400$ pontos.

Tabela 6.15: Comparação entre os resultados numéricos para o fluxo escalar, $2J_0$, do problema 4, com os resultados publicados por Azevedo *et al.* [2] e com o método DD para $\beta_2 = -0.8$.

x	$GFD_{400}^{[2]}$	DD	N = 100	N = 200	N = 400	N = 800
0.00	1.420313	1.420312	1.420205	1.420205	1.420205	1.420205
0.20	1.418733	1.418733	1.418583	1.418583	1.418583	1.418583
0.40	1.316498	1.316498	1.316393	1.316393	1.316393	1.316393
0.60	1.196469	1.196469	1.196431	1.196432	1.196432	1.196432
0.80	1.082103	1.082102	1.082124	1.082124	1.082124	1.082124
1.00	0.980052	0.980051	0.980104	0.980104	0.980104	0.980104

Tabela 6.16: Comparação entre os resultados numéricos para a corrente, $2J_1$, do problema 4, com os resultados publicados por Azevedo *et al.* [2] e com o método DD para $\beta_2 = -0.8$.

x	$GFD_{400}^{[2]}$	DD	N = 100	N = 200	N = 400	N = 800
0.00	-0.051574	-0.054057	-0.054085	-0.054085	-0.054085	-0.054085
0.20	0.052266	0.049549	0.049547	0.049548	0.049548	0.049548
0.40	0.101442	0.099644	0.099664	0.099665	0.099665	0.099665
0.60	0.117132	0.116452	0.116486	0.116487	0.116487	0.116487
0.80	0.110456	0.110536	0.110571	0.110572	0.110572	0.110572
1.00	0.087691	0.087843	0.087872	0.087872	0.087872	0.087872

Tabela 6.17: Comparação entre os resultados numéricos para o fluxo escalar, $2J_0$, do problema 4, com os resultados publicados por Azevedo *et al.* [2] e com o método DD para $\beta_2 = -0.4$.

x	$GFD_{400}^{[2]}$	DD	N = 100	N = 200	N = 400	N = 800
0.00	1.422188	1.422187	1.422159	1.422159	1.422159	1.422159 8
0.20	1.420928	1.420928	1.420888	1.420888	1.420888	1.420888
0.40	1.317645	1.317645	1.317617	1.317617	1.317617	1.317617
0.60	1.196410	1.196409	1.196398	1.196399	1.196399	1.196399
0.80	1.081049	1.081048	1.081053	1.081053	1.081053	1.081053
1.00	0.978640	0.978640	0.978653	0.978653	0.978653	0.978653

Tabela 6.18: Comparação entre os resultados numéricos para a corrente, $2J_1$, do problema 4, com os resultados publicados por Azevedo *et al.* [2] e com o método DD para $\beta_2 = -0.4$.

x	$GFD_{400}^{[2]}$	DD	N = 100	N = 200	N = 400	N = 800
0.00	-0.052534	-0.053833	-0.053840	-0.053840	-0.053840	-0.053840
0.20	0.050794	0.049364	0.049363	0.049363	0.049363	0.049363
0.40	0.100112	0.099150	0.099155	0.099156	0.099156	0.099156
0.60	0.116247	0.115862	0.115870	0.115871	0.115871	0.115871
0.80	0.110036	0.110051	0.110060	0.110061	0.110061	0.110061
1.00	0.087532	0.087600	0.087607	0.087607	0.087607	0.087607

Tabela 6.19: Comparação entre os resultados numéricos para o fluxo escalar, $2J_0$, do problema 4, com os resultados publicados por Azevedo *et al.* [2] e com o método DD para $\beta_2 = 0.4$.

x	$GFD_{400}^{[2]}$	DD	N = 100	N = 200	N = 400	N = 800
0.00	1.426277	1.426277	1.426246	1.426246	1.426246	1.426246
0.20	1.425790	1.425790	1.425744	1.425745	1.425745	1.425745
0.40	1.320271	1.320270	1.320239	1.320237	1.320238	1.320238
0.60	1.196412	1.196411	1.196396	1.196398	1.196398	1.196398
0.80	1.078875	1.078875	1.078879	1.078878	1.078878	1.078878
1.00	0.975655	0.975655	0.975668	0.975668	0.975668	0.975668

Tabela 6.20: Comparação entre os resultados numéricos para a corrente, $2J_1$, do problema 4, com os resultados publicados por Azevedo *et al.* [2] e com o método DD para $\beta_2 = 0.4$.

x	$GFD_{400}^{[2]}$	DD	N = 100	N = 200	N = 400	N = 800
0.00	-0.054730	-0.053297	-0.053306	-0.053306	-0.053306	-0.053306
0.20	0.047398	0.048999	0.048998	0.048998	0.048998	0.048998
0.40	0.096981	0.098095	0.098100	0.098101	0.098101	0.098101
0.60	0.114078	0.114573	0.114583	0.114583	0.114583	0.114583
0.80	0.108919	0.108969	0.108979	0.108979	0.108979	0.108979
1.00	0.087067	0.087022	0.087031	0.087031	0.087031	0.087031

Tabela 6.21: Comparação entre os resultados numéricos para o fluxo escalar, $2J_0$, do problema 4, com os resultados publicados por Azevedo *et al.* [2] e com o método DD para $\beta_2 = 0.8$.

x	$GFD_{400}^{[2]}$	DD	N = 100	N = 200	N = 400	N = 800
0.00	1.428517	1.428517	1.428385	1.428385	1.428385	1.428385
0.20	1.428410	1.428499	1.428307	1.428308	1.428308	1.428308
0.40	1.321786	1.321786	1.321646	1.321644	1.321644	1.321644
0.60	1.196498	1.196498	1.196434	1.196436	1.196435	1.196435
0.80	1.077769	1.077768	1.077779	1.077778	1.077778	1.077778
1.00	0.974080	0.974080	0.974134	0.974134	0.974134	0.974134

Tabela 6.22: Comparação entre os resultados numéricos para a corrente, $2J_1$, do problema 4, com os resultados publicados por Azevedo *et al.* [2] e com o método DD para $\beta_2 = 0.8$.

x	$GFD_{400}^{[2]}$	DD	N = 100	N = 200	N = 400	N = 800
0.00	-0.055999	-0.052973	-0.053012	-0.053012	-0.053012	-0.053012
0.20	0.045420	0.048826	0.048818	0.048819	0.048819	0.048819
0.40	0.095117	0.097532	0.097555	0.097556	0.097556	0.097556
0.60	0.112738	0.113867	0.113908	0.113909	0.113909	0.113909
0.80	0.108177	0.108360	0.108406	0.108407	0.108407	0.108407
1.00	0.086735	0.086675	0.086716	0.086716	0.086716	0.086716

Os resultados para o problema de transporte com anisotropia quadrática, dados nas tabelas 6.15 - 6.22, são comparados com os métodos GFD_{400} e DD . Quando comparamos nossa solução com os resultados obtidos pelo método DD temos 4 dígitos de precisão para $N = 200$ pontos e uma menor precisão quando comparada com o método GFD_{400} . Em todos os casos simulados obtivemos a convergência da nossa solução em $N = 400$ pontos.

7 CONCLUSÕES

Neste trabalho determinamos a solução numérica para a equação de transporte em domínio não homogêneo com condições de contorno semi-refletivas para os casos com espalhamento isotrópico e anisotrópico. O problema com espalhamento isotrópico é solucionada através de duas metodologias. A primeira metodologia consistiu em aplicar o método de Nyström na formulação integral da equação do transporte e, a segunda, em fazer uma mudança de variável a fim de obter um problema equivalente com seção de choque total constante e aproximar o operador integral utilizando o método Nyström. As formulações integrais determinadas em ambas metodologias apresentaram algumas singularidades logo, a aplicação de técnicas analíticas para a remoção de tais singularidades foi essencial para discretizarmos desses operadores pelo método de Nyström e também para garantir melhor desempenho computacional.

A fim de validar as metodologias 1 e 2, simulamos o problema de transporte com espalhamento isotrópico para os domínios homogêneo, multirregião e não homogêneo. Em todos os casos, as duas metodologias foram eficientes na determinação da solução dos problemas, visto que elas apresentaram a mesma precisão que os dados da literatura. Para o problema em domínio não homogêneo simulamos ainda diferentes casos com $\sigma_t(x)$ e $\sigma_s(x)$ variando continuamente ao longo do domínio e comparamos os resultados numéricos entre as metodologias. Aplicamos esse critério de validação pois não encontramos, até o momento, na literatura dados que abrangessem este tipo de situação problema. Neste caso as duas metodologias apresentaram a mesma precisão e em alguns casos a metodologia 2 convergiu mais rapidamente. Em todas as simulações feitas, a metodologia 2, na qual aplicamos a mudança de variável, apresentou menor tempo computacional quando comparada a metodologia 1. Isto já era esperado visto que a mudança de variável transformou o problema inicial em um problema computacionalmente mais simples. Portanto, con-

cluímos que a metodologia 2 foi uma estratégia melhor que a metodologia 1, visto que mostrou-se mais precisa e computacionalmente mais eficiente.

Na validação do problema de transporte com espalhamento isotrópico o fluxo escalar de partículas foi determinado aplicando duas quadraturas numéricas, a saber, quadratura de Gauss-Legendre e regra de Boole. Analisando o desempenho de ambas na solução dos problemas, observamos que nos casos em que temos um domínio contínuo a quadratura de Gauss-Legendre se destacou convergindo mais rapidamente, mas para os casos multirregião a regra de Boole apresentou melhor precisão. Esse fenômeno acontece porque as transições entre as regiões do domínio fazem parte da malha. Mesmo que as soluções obtidas com a aplicação da quadratura de Gauss-Legendre convirjam mais rapidamente no caso homogêneo, quando consideramos um número de pontos suficientemente grande os resultados numéricos obtidos por ambas quadraturas tem a mesma ordem de precisão.

Na solução do problema de transporte com espalhamento anisotrópico em domínio não homogêneo apenas a segunda metodologia de solução foi aplicada, uma vez que para o caso com espalhamento isotrópico esta apresentou resultados com a mesma precisão que a metodologia 1 e melhor desempenho computacional. A fim de verificar a eficiência da nossa metodologia, simulamos o problema de transporte para espalhamento isotrópico, linear e quadrático. Para o caso isotrópico obtivemos soluções com a mesma precisão que as apresentadas nos dados da literatura e para os casos linear e quadrático os resultados numéricos apresentaram 5 e 4 dígitos de precisão, respectivamente. Para os casos linear e quadrático obtivemos, em todas os problema simulados, a convergência da solução.

Em nosso trabalho apresentamos metodologias que solucionam o problema de transporte em domínio não homogêneo com espalhamento isotrópico e anisotrópico. Apesar de não encontrarmos na literatura situações problema onde $\sigma_t(x)$ seja uma função contínua arbitrária, nossas metodologias possibilitam a solução de problema onde esse tipo de função seja considerada.

Como sequência do nosso trabalho propomos a determinação da solução da equação de transporte em domínio não homogêneo com espalhamento linearmente anisotrópico considerando um domínio multirregião.

REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] ATKINSON, K. E. The numerical solution of integral equations of the second kind. *Cambridge Monographs on Applied and Computational Mathematics* (1997).
- [2] AZEVEDO, F., SAUTER, E., THOMPSON, M., AND VILHENA, M. Green's function decomposition method for transport equation. In *Integral Methods in Science and Engineering*. Springer, 2013, pp. 15–39.
- [3] AZEVEDO, F. S., SAUTER, E., KONZEN, P. H. A., THOMPSON, M., AND BARICHELLO, L. B. Integral formulation and numerical simulations for the neutron transport equation in x-y geometry. *Annals of Nuclear Energy* 112 (2018), 735–747.
- [4] AZEVEDO, F. S., SAUTER, E., THOMPSON, M., AND VILHENA, M. T. Existence theory and simulations for one-dimensional radiative flows. *Annals of Nuclear Energy* 38, 5 (2011), 1115–1124.
- [5] AZMY, Y. The weighted diamond-difference form of nodal transport methods. *Nuclear Science and Engineering* 98, 1 (1988), 29–40.
- [6] BARICHELLO, L., AND SIEWERT, C. E. A discrete-ordinates solution for a non-grey model with complete frequency redistribution. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 62, 6 (1999), 665–675.
- [7] BARICHELLO, L. B., AND SIEWERT, C. E. A new version of the discrete-ordinates method. In *Proc. of the 2nd Conf. on Comput. Heat and Mass Transfer (COPPE/EE/UFRJ)* (2001), pp. 22–26.
- [8] BELL, G. I., AND GLASSTONE, S. *Nuclear Reactor Theory*. New York, 1970.
- [9] BOLTZMANN, L. *Lectures on gas theory*. University of California Press, Berkeley, 1964.

- [10] BORGES, V., FRANCIO, L. M., AND BRIGONI, J. I. F. O uso de método lts_n na obtenção de parâmetros de blindagens múltiplas para nêutrons e fótons. In *International Nuclear Atlantic Conference* (Rio de Janeiro, Brasil, 2001).
- [11] BUBLITZ, C., DE AZEVEDO, F. S., AND SAUTER, E. Nyström method applied to the transport equation in an axisymmetric cylinder. *Annals of Nuclear Energy* 148 (2020), 107701.
- [12] CHANDRASEKHAR, S. *Radiative Transfer*. Oxford University Press, London, 1950.
- [13] COLTON, D. L., AND GILBERT, R. P. *Constructive and computational methods for differential and integral equations: symposium, Indiana University, February 17-20, 1974*, vol. 430. Springer, 2006.
- [14] DALMOLIN, D., DE AZEVEDO, F. S., AND SAUTER, E. Nyström method in transport equation. In *Proceedings of INAC 2017 International Nuclear Atlantic Conference* (Rio de Janeiro, Brasil, 2017).
- [15] DAVISON, B., AND SYKES, J. B. *Neutron transport theory*. Clarendon Press, 1957.
- [16] DELVES, L., AND MOHAMED, J. L. *Computational methods for integral equations*. CUP Archive, 1988.
- [17] DEMARCO, G. *Simulação Monte Carlo em terapia de câncer por Captura de nêutrons pelo Boro(BNCT) utilizando a plataforma GEANT4*. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/RS, 2009.
- [18] DUDERSTADT, J. J., AND HAMILTON, L. J. *Nuclear Reactor Analysis*. John Wiley, New York, 1976.
- [19] DUDERSTADT, J. J., AND MARTIN, W. *Transport Theory*. John Wiley & Sons, New York, 1979.

- [20] FIRMINO, S. F. *Transmissão e fluência de fótons na área de radiodiagnóstico para diferentes configurações de feixes e blindagens*. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/RS, 2010.
- [21] GALASSI, M., AND THEILER, J. Gsl-gnu scientific library. *Internet WWW-page*, URL: <http://www.gnu.org/software/gsl> (2005).
- [22] GARCIA, R., AND SIEWERT, C. A multiregion calculation in the theory of neutron diffusion. *Nuclear Science and Engineering* 76, 1 (1980), 53–56.
- [23] GARCIA, R., AND SIEWERT, C. Radiative transfer in finite inhomogeneous plane-parallel atmospheres. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 27, 2 (1982), 141–148.
- [24] G.C.WICK. Uber ebene diffusionproblem. *Z. Phys* 120 (1943), 702–705.
- [25] JEANS, J. H. The equation of radiative transfer of energy. *Monthly Notices Royal Astronomical Society* 78 (1917), 28–36.
- [26] KIST, G. S. *Determinação da probabilidade de escape de nêutrons pelo método Monte Carlo*. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/RS, 2016.
- [27] KRESS, R., MAZ'YA, V., AND KOZLOV, V. *Linear integral equations*, vol. 82. Springer, 1989.
- [28] LEWIS, E. E., AND MILLER, W. F. *Computational Methods of Neutron Transport*. Copyright, United States of America, 1984.
- [29] MACHADO, R. S. *Uma solução para o problema de transferência radiativa pelo método LTS_N com albedo variável*. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/RS, 2008.
- [30] MARK, C. *The Spherical Harmonics Method, 1*. Atomic Energy Of Canada Limited, 1957.

- [31] MODEST, M. F. *Radiative Heat Transfer*. Elsevier, 2003.
- [32] NUNES, C. E. A., AND BARROS, R. C. Aplicativo computacional para cálculos de blindagem com modelo de transporte s_n unidimensional e monoenergético. In *Proceedings of INAC 2009 International Nuclear Atlantic Conference* (Rio de Janeiro, Brasil, 2009).
- [33] NYSTRÖM, E. J. Über die praktische auflösung von integralgleichungen mit anwendungen auf randwertaufgaben. *Acta Mathematica* 54, 1 (1930), 185–204.
- [34] PRESS, W. H., TEUKOLSKY, S. A., VETTERLING, W. T., AND FLANNERY, B. P. *Numerical recipes 3rd edition: The art of scientific computing*. Cambridge university press, 2007.
- [35] PROLO FILHO, J. F., AND RODRIGUES, M. P. A closed form solution for a one-dimensional multi-layered neutron transport problem by analytical discrete ordinates method. In *Defect and Diffusion Forum* (2016), vol. 372, Trans Tech Publ, pp. 50–59.
- [36] REED, W. H. New difference schemes for the neutron transport equation. *Nuclear Science and Engeneering* 46, 2 (1971), 309–314.
- [37] REICHERT, J. T. *Abordagens analíticas para problemas de trasporte de radiação com dependência espectral*. Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/RS, 2009.
- [38] ROST, B. *Solução da equação de transferência radiativa unidimensional em geometria cartesiana em nuvens pela transformada de Laplace*. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/RS, 2008.
- [39] SAUTER, E., DE AZEVEDO, F. S., AND KONZEN, P. H. A. Nyström method applied to the transport equation in a semi-reflective rectangle. *Journal of Computational and Theoretical Transport* (2019).

- [40] SAUTER, E., DE AZEVEDO, F. S., THOMPSON, M., AND DE VILHENA, M. T. M. B. Solution of the one-dimensional transport equation by the vector green function method: Error bounds and simulation. *Applied Mathematics and Computation* 219, 24 (2013), 11291–11301.
- [41] SCHULZ, D. M. Métodos analíticos e computacionais em geofísica nuclear. Dissertação de mestrado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, 2014.
- [42] SCHULZ, D. M. *Métodos de aceleração para a solução da equação de transporte*. Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/ Rs, Outubro 2018.
- [43] TRES, A. *Análise de esquemas de aproximações angulares para a equação de transporte bidimensional em ordenadas discretas via formulações nodais*. Tese de doutorado, Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre/ Rs, Agosto 2015.
- [44] TSAI, R. W., AND LOYALKA, S. K. A numerical method for solving the integral equation of neutron transport: Iii. *Nuclear Science and Engineering* 61, 4 (1976), 536–540.
- [45] VARGAS, R., SEGATTO, C., AND VILHENA, M. Solution of the radiative heat transfer equation with internal energy sources in a slab by the ltsn method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 105, 1 (2007), 1–7.
- [46] VARGAS, R. M., AND DE VILHENA, M. T. M. Solution of the sn radiative transfer equation in an inhomogeneous plane-parallel atmosphere by the decomposition method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 92, 1 (2005), 121–127.
- [47] VILHENA, M. T., AND BARICHELLO, L. A new analytical approach to solve the neutron transport equation. *Kernntechnik* 56, 3 (1991), 334–336.

[48] WILLIAMS, M. M. R. *Mathematical methods in particle transport theory*. 1971.