

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

ANÁLISE ESPECTRAL DA MATRIZ DE TRANSPORTE S_N
UNIDIMENSIONAL E ESTUDO DO EFEITO DE DOMINÂNCIA NO
PROBLEMA CONDUTIVO-RADIATIVO ACOPLADO

por

Luiz Eduardo Ourique

Tese para obtenção do Título de
Doutor em Engenharia

Porto Alegre, Dezembro de 2002

ESCOLA DE ENGENHARIA
BIBLIOTECA

ANÁLISE ESPECTRAL DA MATRIZ DE TRANSPORTE S_N
UNIDIMENSIONAL E ESTUDO DO EFEITO DE DOMINÂNCIA NO
PROBLEMA CONDUTIVO-RADIATIVO ACOPLADO

por

Luiz Eduardo Ourique

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

Doutor em Engenharia

Área de Concentração: Fenômenos de Transporte

Orientador: Prof. Dr. Marco Túllio Menna Barreto de Vilhena

Comissão de Avaliação:

Prof. Dr. Ricardo Carvalho de Barros (IPRJ/UERJ)

Prof. Dr. Fernando Carvalho da Silva (COPPE/UFRJ)

Prof. Dr. Julio Cesar Ruiz Claeysen (PROMEC/UFRGS)

Prof. Dr. Ruben Panta Pazos (FAMAT/PUCRS)

Prof. Dr. Alberto Tamagna
Coordenador do PROMEC

Porto Alegre, 03 de Dezembro de 2002

À minha família

Ao meu orientador Prof. Dr. Marco Túllio Vilhena, pelas correções de rumo e a motivação para levar até o fim esta tarefa, aos amigos e colegas de trabalho que foram leais e colaboraram com palavras de apoio em todos os momentos, muito obrigado.

RESUMO

ANÁLISE ESPECTRAL DA MATRIZ DE TRANSPORTE S_N UNIDIMENSIONAL E ESTUDO DO EFEITO DE DOMINÂNCIA NO PROBLEMA CONDUTIVO-RADIATIVO ACOPLADO

O principal objetivo desta tese é analisar a influência do parâmetro seção de choque macroscópica total na solução da aproximação S_N da equação de transporte e os efeitos do parâmetro de condução-radiação no problema não-linear condutivo-radiativo acoplado. Inicialmente, é estudada a aproximação S_N da equação de transporte estacionária, com um grupo de energia, numa placa plana homogênea, sem fonte externa. Esta aproximação corresponde a um sistema de N equações diferenciais ordinárias lineares de primeira ordem, cuja solução é a função exponencial da matriz do sistema, denominada matriz de transporte S_N . Através da resolução de problemas e considerando a seção de choque macroscópica total como parâmetro de controle, é verificada numericamente a mudança de comportamento dos autovalores da matriz de transporte S_N que determinam a passagem de soluções não-oscilatórias para soluções oscilatórias da aproximação S_N . Estes pontos, referidos como pontos de bifurcação, são calculados para problemas com seção de choque diferencial de espalhamento com anisotropia de graus $L = 1$ e $L = 2$. Para pequenas ordens de quadratura N , são realizadas simulações para a análise computacional do polinômio característico da matriz de transporte S_N e do seu número de condicionamento em termos da seção de choque macroscópica total. Este estudo é estendido para o problema com dois grupos de energia. Os resultados deste trabalho são comparados com resultados encontrados na literatura. Na parte final deste trabalho, é estudada a influência do parâmetro de condução-radiação na solução do problema acoplado de transferência radiativa e calor condutivo numa placa plana homogênea, com espalhamento anisotrópico, considerando condições de contorno de Dirichlet bem como reflexão especular e difusa. Simulações numéricas obtidas com o uso do método LTS_N combinado com o método da decomposição são apresentadas.

ABSTRACT

SPECTRAL ANALYSIS OF THE ONE-DIMENSIONAL S_N TRANSPORT MATRIX AND STUDY OF THE DOMINANCE EFFECT IN THE COUPLED CONDUCTIVE-RADIATIVE PROBLEM

The main objective of this thesis is to analyze the influence of the parameter total macroscopic cross section in the solution of the S_N approximation to the transport equation and the effects of the conduction-radiation parameter in a coupled nonlinear conductive-radiative problem. Initially, it is studied the S_N approximation of the steady-state transport equation with one group of energy, in a homogeneous slab, without external source. This approximation corresponds to a system of N linear ordinary differential equation of first order, whose solution is the exponential function of the matrix system, termed S_N transport matrix. Through the resolution of problems and viewing the total macroscopic cross section as the control parameter, it is numerically verified the change of behavior of the eigenvalues of the S_N transport matrix that determine the passage from non-oscillatory to oscillatory solutions of S_N approximation. These points, refereed as bifurcation points, are calculated for problems with differential scattering cross section with anisotropy of degrees $L = 1$ and $L = 2$. For small orders of quadrature N , simulations are accomplished for the computational analysis of the characteristic polynomial of S_N transport matrix and of its conditioning number in terms of the total macroscopic cross section. This study is extended for the problem with two groups of energy. The results of this work are compared with available results in the literature. In the final part of this work, it is studied the influence of the radiation-conduction parameter in the solution of coupled radiative transfer and conductive heat problem in a homogeneous slab, with anisotropic scattering, considering the Dirichlet's boundary conditions as well specular and diffuse reflection. Numerical simulations obtained with the use of the combined LTS_N and the decomposition methods are reported.

SUMÁRIO

1	INTRODUÇÃO	1
1.1	Revisão Histórica.....	1
1.2	Resultados Históricos	7
2	QUADRATURAS ANGULARES	12
2.1	Quadratura Angular de Gauss-Legendre	13
2.2	Quadratura Angular de Yvon (Duplo P_N ou DP_N).....	13
3	ANÁLISE ESPECTRAL DA APROXIMAÇÃO S_N	16
3.1	Resultados para Seção de Choque Diferencial de Espalhamento com Anisotropia de Grau 1	21
3.1.1	Resultados Numéricos para $N = 4$	25
3.1.2	Resultados Numéricos para $N = 8$	32
3.2	Resultados para Seção de Choque Diferencial de Espalhamento com Anisotropia de Grau 2	38
3.2.1	Resultados Numéricos para $N = 4$	39
3.2.2	Resultados Numéricos para $N = 8$	42
3.3	Paridade dos Autovalores da Matriz de Transporte S_N	46
3.4	Análise da Aproximação S_N com Multigrupos de Energia.....	48
3.4.1	Resultados Numéricos para $N = 2, G = 2$	49
3.4.2	Resultados Numéricos para $N = 4, G = 2$	50
3.4.3	Resultados Numéricos para $N = 8, G = 2$	52
4	O PROBLEMA DE TRANSFERÊNCIA RADIATIVA COM CALOR CONDUATIVO ACOPLADO	56
4.1	Introdução	56

4.2 Efeito de Dominância no Problema Condutivo-Radiativo	57
4.3 O Método de Decomposição	61
5 ANÁLISE E CONCLUSÕES	66
REFERÊNCIAS	69
APÊNDICE	73
A NORMAS	73
A.1 Normas de Vetores	73
A.2 Norma de Matrizes	74

LISTA DE SÍMBOLOS

Letras Romanas

$\ A\ $	Norma de uma matriz , veja a equação (A.2), página 74
$\ \mathbf{x} \ $	Norma de um vetor , veja a equação (A.1), página 73
$A(m, n)$	Matriz $m \times n$, veja a equação (A.2), página 74
$A_n(x)$	Termo genérico da expansão da temperatura , veja a equação (4.14), página 62
c	Número médio de nêutrons secundários , veja a equação (1.2), página 8
$cond(A)$	Número de condicionamento de uma matriz A , veja a equação (A.6), página 75
E_N	Erro na aproximação por uma quadratura de ordem N , veja a equação (2.1), página 12
$exp(Mx)$	Função exponencial matricial , veja a equação (3.8), página 18
$f(x)$	Fluxo escalar , veja a equação (3.9), página 19
G	Número de grupos de energia , veja a equação (3.29), página 48
$g_1(\mu_i)$	Condição de contorno em $x = 0$, veja a equação (3.3), página 17
$g_2(\mu_i)$	Condição de contorno em $x = X$, veja a equação (3.3), página 17
$I(x, \mu)$	Função intensidade de radiação , veja a equação (4.1), página 57
I_N	Matriz identidade de ordem N , veja a equação (3.7), página 18
k	Condutividade térmica , veja a equação (4.2), página 58
$k_s(\mu', \mu)$	Seção de choque diferencial de espalhamento , veja a equação (1.1), página 7
L	Grau de anisotropia do espalhamento , veja a equação (3.2), página 17

M	Matriz de transporte S_N , veja a equação (3.7), página 18
N	Ordem de uma quadratura , veja a equação (2.1), página 12
n	Índice de refração , veja a equação (4.1), página 57
N_c	Parâmetro de condução-radiação , veja a equação (4.8), página 59
$p(x)$	Polinômio característico de uma matriz , veja a equação (3.27), página 46
P_l	Polinômio de Legendre de grau l , veja a equação (3.2), página 17
$Q(x)$	Fluxo total , veja a equação (4.22), página 63
$Q_c(x)$	Fluxo condutivo , veja a equação (4.20), página 63
$Q_r(x)$	Fluxo radiativo , veja a equação (4.21), página 63
$S(x)$	Fonte externa , veja a equação (1.1), página 7
$\sup_{\ x\ =1} \ Ax\ $	Supremo no círculo unitário , veja a equação (A.4), página 74
$T(x)$	Função temperatura , veja a equação (4.1), página 57
T_r	Temperatura de referência , veja a equação (4.6), página 58
$tr(A)$	Traço de uma matriz A , veja a equação (3.18), página 22
X	Espessura da placa , veja a equação (3.3), página 17
<i>Letras Gregas</i>	
β	Coefficiente de extinção , veja a equação (4.2), página 58
β_l	Coefficientes da função de espalhamento , veja a equação (4.1), página 57
δ_{ij}	Delta de Kronecker , veja a equação (2.7), página 14
μ_i	Nós da quadratura de Gauss-Legendre , veja a equação (3.3), página 17
ω_i	Pesos da quadratura de Gauss-Legendre , veja a equação (3.3), página 17

$\psi(x, \mu)$	Fluxo angular , veja a equação (1.1), página 7
ρ_i^d	Coefficiente de reflexão difusa da superfície i , veja a equação (4.1), página 57
ρ_i^s	Coefficiente de reflexão especular da superfície i , veja a equação (4.1), página 57
σ	Constante de Stefan-Boltzmann , veja a equação (4.1), página 57
$\sigma_{s,g',g}$	Coefficientes da seção de choque diferencial de espalhamento com multigrupo de energia , veja a equação (3.29), página 48
σ_{sl}	Coefficientes da expansão da seção de choque diferencial de espalhamento , veja a equação (3.2), página 17
$\sigma_{T,g}$	Seção de choque macroscópica total do grupo de energia g , veja a equação (3.29), página 48
σ_T	Seção de choque macroscópica total , veja a equação (1.1), página 7
$\theta(x)$	Função temperatura normalizada , veja a equação (4.8), página 59
ε_i	Emissividade para a superfície i , veja a equação (4.1), página 57
ϖ	Albedo para espalhamento , veja a equação (4.1), página 57

LISTA DE FIGURAS

3.1	Fluxo incidente na fronteira da placa.....	17
3.2	Autovalores da matriz de transporte S_2 em função de σ_T , $L = 1$	23
3.3	Fluxo escalar com $\sigma_T = 1$, $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$, $N = 2$	23
3.4	Fluxo escalar com $\sigma_T = 0.98$, $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$, $N = 2$	24
3.5	Fluxo escalar com $\sigma_T = 0.99$, $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$, $N = 2$	24
3.6	Autovalores da matriz de transporte S_4 em função de σ_T , $L = 1$	28
3.7	Polinômio característico, $N = 4$, $\sigma_T = 0.85$, $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$	30
3.8	Polinômio característico, $N = 4$, $\sigma_T = 0.9$, $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$	30
3.9	Polinômio característico, $N = 4$, $\sigma_T = 0.99$, $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$	31
3.10	Polinômio característico, $N = 4$, $\sigma_T = 1.1$, $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$	32
3.11	Autovalores da matriz de transporte S_8 em função de σ_T , $L = 1$	36
3.12	Condicionamento como função de $u = \sigma_T$, $L = 1$, $N = 4$, $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$	38
3.13	Varição de a_0 em função de σ_T , $N = 4$, $L = 2$	42
3.14	Varição de a_2 em função de σ_T , $N = 4$, $L = 2$	42

LISTA DE TABELAS

1.1	Número de autovalores discretos da equação de transporte	10
3.1	Fluxo escalar com $\sigma_T = 1.0$, $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$	20
3.2	Autovalores da matriz de transporte S_4 com $L = 1$, $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$	26
3.3	Autovalores da matriz de transporte S_4 com $L = 1$, $\sigma_{s0} = 0.9$, $\sigma_{s1} = 0.7$	27
3.4	Autovalores da matriz de transporte S_8 com $L = 1$, $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$	33
3.5	Autovalores da matriz de transporte S_8 com $L = 1$, $\sigma_{s0} = 0.9$, $\sigma_{s1} = 0.7$	34
3.6	Autovalores da matriz de transporte S_4 com $L = 2$, $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$, $\sigma_{s2} = 0.5$	40
3.7	Autovalores da matriz de transporte S_4 com $L = 2$, $\sigma_{s0} = 0.9$, $\sigma_{s1} = 0.7$, $\sigma_{s2} = 0.5$	41
3.8	Autovalores da matriz de transporte S_8 com $L = 2$, $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$, $\sigma_{s2} = 0.5$	43
3.9	Autovalores da matriz de transporte S_8 com $L = 2$, $\sigma_{s0} = 0.9$, $\sigma_{s1} = 0.7$, $\sigma_{s2} = 0.5$	45
3.10	Autovalores da matriz de transporte S_2 , $G = 2$	50
3.11	Autovalores da matriz de transporte S_4 , $G = 2$, dos exemplos 1, 2 e 3.	51
3.12	Dados para o problema de referência, $N = 8$, $G = 2$	52
3.13	Comparação com autovalores de referência, com $N = 8$ e $G = 2$	53
3.14	Dados dos exemplos 1, 2 e 3, com $N = 8$ e $G = 2$	53
3.15	Autovalores da matriz de transporte S_8 dos exemplos 1, 2 e 3, $G = 2$	54
4.1	Influência de N_c no problema condutivo-radiativo.	60
4.2	Dados físicos dos problemas.	63
4.3	Fluxo condutivo, em $x = 0$, $N = 20$, $L = 0$	64
4.4	Comparação da solução dos problemas, $N_c = 0.05$	64

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

1.1 Revisão Histórica

A equação que modela matematicamente o fenômeno de transporte de partículas num meio material, considerando as diversas reações que podem ocorrer entre as partículas e os núcleos do meio, é uma equação íntegro - diferencial linear conhecida como equação de transporte. Em problemas de transporte, além da equação são estabelecidas condições de contorno e, em problemas dependentes do tempo, condições iniciais são dadas a fim de se determinar a solução, que é definida como fluxo angular. Em sua formulação completa, a equação de transporte depende de sete variáveis [Duderstadt e Hamilton, 1976]. A solução geral desta equação ainda não é conhecida. Por isto, supondo certas restrições, a equação é simplificada com o objetivo de determinar a sua solução analiticamente e conhecer algumas de suas propriedades. Em algumas aplicações, são usados outros modelos, e.g., a teoria da difusão como aproximação de problemas de transporte de nêutrons em cálculos globais de reatores nucleares [da Silva, 2002]. Um outro enfoque na modelagem computacional de problemas de transporte são os métodos probabilísticos (que calculam uma solução aproximada do problema físico exato, os quais não serão analisados em detalhe neste trabalho) ou métodos determinísticos (que procuram soluções exatas de aproximações para o problema de transporte). Dentre os métodos determinísticos, diferentes aproximações do problema de transporte originam diversos métodos conhecidos: o método F_N , onde a equação é aproximada por um sistema de equações integrais [Garcia, 1985]; o método SGF [Barros, 1990], que é um método nodal livre de erro de truncamento espacial em uma dimensão. Entre as aproximações semidiscretas (nas quais somente uma variável é discretizada) da equação de transporte destaca-se a aproximação

S_N ou ordenadas discretas, resultantes da aproximação do termo integral da equação de transporte através de fórmulas de quadraturas de Gauss na variável angular. O número de pontos da quadratura é a ordem da quadratura e denotado por N . A aproximação S_N é um sistema de N equações diferenciais ordinárias lineares de primeira ordem, cuja matriz dos coeficientes é chamada de matriz de transporte S_N . A solução analítica para a aproximação S_N é conhecida: é a função exponencial da matriz de transporte S_N , e representa uma solução exata para uma aproximação da equação de transporte. Nos últimos anos, diversos trabalhos de resolução da aproximação S_N foram desenvolvidos com o objetivo não só de resolver problemas de transporte em diversas geometrias, com e sem fonte externa, mas também de melhorar a eficiência (diminuir o esforço computacional necessário para a obtenção da solução), aumentar a precisão (isto é, obter um maior número de dígitos significativos corretos na solução) e aumentar a ordem das quadraturas utilizadas nas aproximações, dentre os quais cito alguns. O trabalho [Barichello e Vilhena, 1993] foi o início do método \mathcal{LTS}_N , que formula analiticamente uma solução para a aproximação S_N , através da aplicação da Transformada de Laplace na variável espacial e posterior inversão da transformada para o cálculo do fluxo angular em algumas direções, chamadas direções discretas. Vemos no trabalho de [Brancher, 1998] a utilização do método \mathcal{LTS}_N na resolução de problemas com elevadas ordens de quadratura. Em [Cardona e Vilhena, 1998] vemos um método genérico de solução analítica para aproximações da equação de transporte unidimensional, utilizando a Transformada de Laplace na variável espacial da equação e na resolução do sistema de equações algébricas resultante. Em [Batistela, 1997] vemos o estudo do problema de criticalidade para determinação dos parâmetros de espessura crítica e do fator de multiplicação efetivo de nêutrons em um reator nuclear, aplicando o método \mathcal{LTS}_N à equação de transporte unidimensional com mais de um grupo de energia em uma placa heterogênea. Como alternativa ao método clássico da iteração no qual é necessário o cálculo do fluxo angular em cada etapa, neste trabalho foi utilizado o método da bissecção com refinamento variável para o cálculo do fator de multiplicação efetivo de nêutrons e da espessura crítica de um reator, sem a necessidade de cálculo do fluxo em cada passo do processo iterativo, resultando num método mais eficiente. No trabalho de [Segatto *et al.*, 1999], vemos a solução do problema em ordenadas discretas para altas ordens de quadratura , usando a diagonalização da matriz de transporte. No trabalho de

[Hauser, 2002], a aproximação S_N em problemas bidimensionais foi resolvida para ordens de quadratura mais elevadas, o que só foi possível através de um método que diminuiu sensivelmente a complexidade da solução pela diminuição da ordem de um sistema de equações lineares que deve ser resolvido para o cálculo da solução. No trabalho de [Pazos, 2000] foi demonstrado que a solução da aproximação S_N pelo método \mathcal{LTS}_N converge para a solução exata da equação de transporte, com seção de choque macroscópica total constante (e também seccionalmente constante), seção de choque diferencial de espalhamento linearmente anisotrópica, usando a Teoria dos Esquemas Discretos e convergência de seqüência de operadores lineares em Espaços de Hilbert, o que consolidou o método. Deste modo, podemos dizer que os resultados numéricos obtidos pelo método \mathcal{LTS}_N podem ser considerados como valores de referência, uma vez que para valores crescentes da ordem de quadratura, a solução converge para a solução exata da equação de transporte, desconsiderando-se erros de arredondamento. Como vimos, o método de ordenadas discretas S_N é largamente utilizado na solução de problemas de transporte . Em problemas multidimensionais, este método pode apresentar o problema do efeito de raio, que ocorre tipicamente em problemas com fontes externas localizadas, já que o método de ordenadas discretas modela o fluxo em um número finito de direções (chamadas de direções discretas) que podem não ser suficientes para modelar tais fontes. Uma alternativa para eliminar o efeito de raio em problemas multidimensionais é o método dos harmônicos esféricos, ou método P_N , cuja desvantagem é a complexidade das equações, comparada à aproximação S_N [Brown *et al.*, 2001].

Tendo em vista estes resultados, em nosso trabalho pretendemos analisar a influência de um parâmetro na solução da aproximação S_N em problemas monoenergéticos, i.e., com um grupo de energia (ou parâmetros, no caso do problema de multigrupo de energia). Isto é, nós vamos analisar como a variação de um parâmetro, chamado de parâmetro de controle, influencia a solução e a possibilidade de existência de pontos de bifurcação na solução. Em pesquisa bibliográfica, não encontramos nenhum trabalho sobre a equação de transporte com este enfoque, que será o objeto deste estudo. De fato, em [Abreu, 1997] e [Barros, 1990], nós vemos métodos de cálculo do espectro dos autovalores da aproximação S_N , e para baixas ordens de quadratura, com dois grupos de energia. Num trabalho mais recente, [Abreu, 2002] descreve métodos de geração do espectro de

autovalores em problemas de multigrupo de energia e espalhamento anisotrópico. Em [Ourique *et al.*, 2001], mostramos os primeiros resultados sobre a existência de pontos de bifurcação na solução da aproximação S_N , para baixas ordens de quadratura e anisotropia linear, na placa plana homogênea. Façamos aqui uma discussão sobre o meio material com o qual o nêutron colide. Um meio é homogêneo se suas propriedades físicas são uniformes, isto é, não variam no espaço. Por exemplo, se um meio é constituído de dois materiais diferentes, como grafite e água, então este meio é chamado de meio heterogêneo. Em meios heterogêneos, o problema é dividido em regiões, tais que em cada região, as propriedades do material são uniformes. Um problema de transporte no qual é feita a divisão do meio material em regiões com propriedades físicas uniformes é chamado de problema multiregião. Na interface entre regiões de diferentes materiais, condições de continuidade do fluxo são estabelecidas [Stacey, 2001]. Neste trabalho, vamos considerar a seção de choque macroscópica total como parâmetro de controle e analisar como a variação deste parâmetro modifica a solução da aproximação S_N em problemas estacionários, sem fonte externa, na placa plana homogênea, com seção de choque diferencial de espalhamento anisotrópica. Nós determinamos que certos valores da seção de choque macroscópica total são pontos de bifurcação. Na vizinhança de um ponto de bifurcação existem pontos tais que os autovalores da matriz de transporte S_N são todos reais, enquanto em outros pontos, existem autovalores complexos. Esta mudança dos autovalores corresponde à uma mudança no comportamento da solução da aproximação S_N . Vamos mostrar também a influência deste parâmetro na medida do condicionamento da matriz de transporte S_N . Para ilustrar a discussão, mostramos a solução numérica de alguns problemas e tabelamos os autovalores da matriz de transporte S_N . Para uniformizar a apresentação dos dados tabelados, nós utilizamos seis casas decimais para os números reais com valor absoluto maior ou igual do que a unidade, enquanto para números reais com valor absoluto menor do que a unidade, nós usamos o formato normalizado. Além disto, fizemos a análise computacional dos coeficientes dos polinômios característicos da matriz de transporte S_N para pequenos valores da ordem de quadratura para ilustrar as propriedades verificadas numericamente.

Ademais, fizemos a análise da influência do parâmetro N_c , definido como parâmetro de condução-radiação, na solução das aproximações S_N do problema não-linear de trans-

ferência radiativa acoplado com condução de calor, que será chamado de problema condutivo-radiativo. [Siewert e Thomas, 1991] apresentaram um método numérico de solução do problema condutivo-radiativo, com resultados em quatro problemas de referência, com dados físicos bem determinados, em uma placa plana de dimensão unitária e com $N_c = 0.05$. Porém, relatavam que a solução era limitada aos problemas com placas de espessura unitária e o parâmetro N_c de ordem 10^{-2} . Mais tarde, [Siewert, 1995] resolveu estes problemas, com condições de contorno incluindo reflexão especular e difusa, com a utilização do método de Newton, obtendo resultados para espessuras maiores do que a unidade e valores de N_c da ordem de 10^{-4} . Para valores crescentes da ordem de quadratura, observava-se um número crescente de dígitos significativos exatos na solução do problema condutivo-radiativo. Porém, não havia a demonstração de que a solução obtida pelo método de fato convergia para a solução exata do problema. Em nosso estudo, utilizamos o método LTS_N combinado com o método da decomposição, ver [Adomian, 1988], utilizado por [Vargas, 1998] na solução deste problema. O método da decomposição pode ser utilizado na solução de problemas lineares e não-lineares; quando utilizado na resolução de problemas não-lineares, o método de Adomian decompõe um problema definido por um operador não linear num componente linear e outro componente não-linear. Após a decomposição do componente linear em uma parte cuja inversa é simples de ser determinada, a equação que modela o problema é escrita de tal modo que a parte linear do operador, cuja inversa é simples, é mantida do lado esquerdo, enquanto os demais termos são escritos do lado direito. Deste modo, a solução formal é obtida pela aplicação do operador inverso à equação. Em seguida, a solução desejada é escrita como uma série de funções, que serão determinadas através de condições de contorno e outras condições dadas no problema. No estudo de problemas modelados por equações não-lineares, em muitos casos, são feitas hipóteses que simplificam as equações, resultando em aproximações destes problemas por equações lineares, por exemplo, a equação do pêndulo [Glendinning, 1994]. Tais simplificações, às vezes necessárias devido à complexidade do problema, são válidas sob certas restrições e, por isto, a sua solução deve ser interpretada dentro destes limites. Uma das vantagens do método de Adomian na solução de problemas não-lineares é o fato de não fazer o uso de simplificações que linearizem o problema: a solução de Adomian é a solução do problema não-linear exato, e não de uma aproximação linear do problema.

Porém, uma vez que a solução de Adomian é expressa por uma série, na prática, obtém-se uma aproximação da solução do problema, pois é necessário truncar a série num número finito de termos.

Através de implementação computacional do método \mathcal{LTS}_N combinado com o método da decomposição, nossos resultados iniciais nos levaram a conjecturar a existência de um ponto de bifurcação para um certo valor de N_c . Por estas razões, nós analisamos este problema com este enfoque: determinar a influência do parâmetro N_c na solução do problema condutivo-radiativo numa placa plana, e a possível existência de pontos de bifurcação da solução. A metodologia usada no estudo do problema linear e não-linear foi a mesma. Além de revisão bibliográfica sobre o tema, nós resolvemos numericamente uma grande quantidade de problemas, fazendo variar o parâmetro de controle num certo intervalo e calculando a solução nos pontos da discretização. Os resultados numéricos incluídos no texto foram obtidos através da implementação computacional de programas em *Fortran 90*. Também foram implementadas programas desenvolvidos no *Maple* (chamados de procedimentos), o que nos possibilitou a obtenção de alguns resultados simbólicos em problemas do capítulo (3) desta tese com pequenas ordens de quadratura. O trabalho está organizado do seguinte modo: na seção 1.2, mostramos os resultados de [Mika, 1961] e [Case e Zweifel, 1967], nos quais vemos os primeiros trabalhos de análise da influência de um parâmetro na solução exata da equação de transporte, sendo determinada uma relação entre um parâmetro da seção de choque diferencial de espalhamento e o número de autovalores discretos da equação. No capítulo (2), definimos algumas quadraturas angulares utilizadas nas aproximações da equação de transporte; no capítulo (3), analisamos a influência da seção de choque macroscópica total na solução da aproximação S_N para problemas numa placa plana homogênea, com um grupo de energia, sem fonte externa. Fizemos a extensão do estudo para problemas com dois grupos de energia. No capítulo (4), analisamos a influência do parâmetro N_c na solução do problema condutivo-radiativo, numa placa plana, com espalhamento anisotrópico e condições de contorno de Dirichlet, bem como reflexão especular e difusa. No capítulo (5), nós apresentamos as conclusões e as perspectivas para trabalhos futuros.

1.2 Resultados Históricos

Nesta seção, apresentamos alguns resultados históricos importantes sobre a influência de parâmetros na solução da equação de transporte. Em [Duderstadt e Hamilton, 1976], vemos que o transporte de nêutrons monoenergéticos numa placa plana, em um problema estacionário, é descrito pela equação

$$\mu \frac{\partial \Psi(x, \mu)}{\partial x} + \sigma_T \Psi(x, \mu) = \int_{-1}^{+1} k_s(\mu', \mu) \Psi(x, \mu') d\mu' + S(x, \mu) \quad (1.1)$$

onde $\mu \in [-1; +1]$, $x \in [0; X]$, X é o comprimento da placa. A função $\Psi(x, \mu)$, definida como fluxo angular de nêutrons, é o número médio de nêutrons na posição x com ângulo θ entre o vetor velocidade do nêutron e o eixo x ; por definição $\mu = \cos(\theta)$. A função $k_s(\mu', \mu)$ é a seção de choque diferencial de espalhamento. A equação (1.1) é conhecida como equação de transporte; o termo integral desta equação representa a soma de todos os nêutrons que viajando em direções arbitrárias μ' após atingirem o alvo (núcleos do meio) passam a viajar numa direção μ de interesse. O primeiro termo à esquerda da equação (1.1) representa o termo de fuga líquida na fronteira da placa; o segundo termo à esquerda da equação (1.1) representa a perda devido às colisões que ocorrem entre os nêutrons e os núcleos-alvo. O segundo termo à direita da equação (1.1) representa uma fonte externa de nêutrons, por exemplo, um processo de fissão. Na ausência de uma fonte externa, o problema de transporte é dito ser homogêneo. As condições de contorno para um problema numa placa são da forma

$$\Psi(0, \mu) = g_1(\mu) \quad \mu > 0, \quad (1.1a)$$

$$\Psi(X, \mu) = g_2(\mu) \quad \mu < 0. \quad (1.1b)$$

Tais condições representam o fluxo de nêutrons que incidem no contorno da placa. Um caso particular é o transporte de nêutrons monoenergéticos, com espalhamento isotrópico, isto é, quando a seção de choque diferencial de espalhamento é uma constante. Fazendo uma mudança de variável conveniente, o problema é descrito pela equação [Case e Zweifel,

1967]

$$\mu \frac{\partial \Psi(x, \mu)}{\partial x} + \Psi(x, \mu) = \frac{c}{2} \int_{-1}^{+1} \Psi(x, \mu') d\mu' + \underline{S}(x, \mu). \quad (1.2)$$

Nesta equação, x é medido em unidade de livre caminho médio (*mean free path*), que é a distância média percorrida por um nêutron no meio antes de colidir com um núcleo-alvo. O parâmetro c é o número médio de nêutrons secundários produzidos após a colisão de um nêutron com o alvo. De fato, imediatamente após a colisão, podem ocorrer várias reações como espalhamento, absorção ou fissão. Se $c = 0$, então dizemos que o meio é absorvedor puro: o nêutron colide com o alvo e é absorvido ("morre"). Uma reação de fissão produz em média 2.5 nêutrons secundários; uma reação de espalhamento produz em média 1 nêutron por colisão. A equação homogênea de transporte é

$$\mu \frac{\partial \Psi(x, \mu)}{\partial x} + \Psi(x, \mu) = \frac{c}{2} \int_{-1}^{+1} \Psi(x, \mu') d\mu'. \quad (1.3)$$

Pela forma da equação (1.3), a dependência espacial pode ser eliminada com a procura de soluções da forma

$$\Psi_\nu(x, \mu) = \phi_\nu(\mu) e^{-\frac{x}{\nu}}. \quad (1.4)$$

Em analogia com as Equações Diferenciais Ordinárias, chamamos ϕ_ν de autofunções e os correspondentes ν de autovalores. Inserindo a solução (1.4) na equação homogênea, calculamos que as autofunções devem satisfazer a equação

$$\left(1 - \frac{\mu}{\nu}\right) \phi_\nu(\mu) = \frac{c}{2} \int_{-1}^{+1} \phi_\nu(\mu') d\mu'. \quad (1.5)$$

Já que (1.5) é uma equação linear homogênea em $\phi_\nu(\mu)$, a normalização é arbitrária. É conveniente escolher

$$\int_{-1}^{+1} \phi_\nu(\mu') d\mu' = 1. \quad (1.6)$$

Após a multiplicação por ν , vemos que a solução da equação (1.5) é

$$(\nu - \mu)\phi_\nu(\mu) = \frac{c\nu}{2}. \quad (1.7)$$

Na equação (1.7), temos que $\mu \in [-1, +1]$; se $\nu \notin [-1, +1]$, então a solução é simplesmente a função racional e contínua $\phi_\nu(\mu) = \frac{c\nu}{2} \frac{1}{\nu - \mu}$. Porém, se $\nu \in [-1, +1]$, ocorre uma singularidade no ponto $\nu = \mu$. A solução geral desta equação é

$$\phi_\nu(\mu) = \frac{c\nu}{2} P \frac{1}{\nu - \mu} + \lambda(\nu)\delta(\nu - \mu), \quad (1.8)$$

onde P denota o valor principal de Cauchy e δ é a função delta de Dirac, que por definição satisfaz $\int_{-\infty}^{+\infty} f(\nu)\delta(\nu - \mu) = f(\mu)$, e $\lambda(\nu)$ é uma função a ser determinada pelas condições de contorno. A condição de normalização implica que os autovalores ν neste caso são as raízes da equação :

$$1 - \frac{c\nu}{2} \int_{-1}^{+1} \frac{d\mu}{\nu - \mu} = 0. \quad (1.9)$$

Definindo a função $\Lambda(\nu) = 1 - \frac{c\nu}{2} \int_{-1}^{+1} \frac{d\mu}{\nu - \mu}$, vemos que os autovalores ν são as raízes da equação $\Lambda(\nu) = 0$. Analisando as propriedades da função $\Lambda(\nu)$, temos o seguinte resultado:

- a) Se $c < 1$, então $\Lambda(\nu)$ tem duas raízes $\pm\nu_0$ reais;
- b) Se $c > 1$, então $\Lambda(\nu)$ tem duas raízes $\pm\nu_0$ imaginárias puras.

Se $\nu \in [-1; +1]$, então todo ν é autovalor e em correspondência temos um contínuo de autofunções para todo valor de ν real pertencente ao intervalo $[-1; +1]$. No trabalho de [Case e Zweifel, 1967], é demonstrado que a solução do problema de transporte dentro de um volume V limitado por uma superfície convexa S é unicamente determinado, dados:

- a) o fluxo angular inicial em V ;
- b) as fontes dentro de V ;
- c) o fluxo incidente na fronteira S .

No caso particular da equação de transporte homogênea, isto é, sem fonte externa e monoenergética, a solução de Case é uma solução analítica, isto é, uma solução exata

para a equação de transporte, embora sujeita às severas restrições citadas, quais sejam: é uma equação que modela um problema estacionário, com simetria azimutal, com um grupo de energia, em uma placa plana homogênea e sem fonte externa. Frisemos que, no caso geral, a solução exata da equação de transporte não é conhecida. Em [Mika, 1961] vemos o estudo sobre a dependência dos autovalores da equação de transporte, no caso em que o núcleo de espalhamento é anisotrópico. Por um procedimento análogo ao visto acima para o caso isotrópico, o autor supõe que a seção diferencial de espalhamento possa ser expandida em uma série truncada de polinômios de Legendre, isto é,

$$k_s(\mu', \mu) = \frac{1}{4\pi} \sum_{k=0}^L b_k P_k(\mu') P_k(\mu). \quad (1.10)$$

e $b_0 = 1$. Com esta hipótese, a equação de transporte no caso de simetria plana tem a forma:

$$\mu \frac{\partial \Psi(x, \mu)}{\partial x} + \Psi(x, \mu) = \frac{c}{2} \sum_{k=0}^L b_k P_k(\mu) \int_{-1}^{+1} P_k(\mu') \Psi(x, \mu') d\mu'. \quad (1.11)$$

Tabela 1.1 – Número de autovalores discretos da equação de transporte

L	c	b_k	M
0	$\forall c$		1
1	$c=1$	$\forall b_1$	1
	$\forall c$	$b_1 < 0$	1
	$c \leq 1 + 1/b_1$	$b_1 > 0$	1
	$c > 1 + 1/b_1$	$b_1 > 0$	2
2	$c=1$	$\forall b_1 \text{ e } b_2$	1
	$c \neq 1$		≤ 3

Supondo uma solução da forma dada em (1.4), os autovalores discretos são as

raízes da equação característica

$$\Omega(z) = 0, \tag{1.12}$$

para $z \notin [-1; +1]$, onde a função $\Omega(z)$ é uma função analítica no plano complexo com corte ao longo do eixo real. O número de autovalores discretos, igual a $2M$, para a equação acima depende dos valores do parâmetro c e dos coeficientes b_k , e está mostrado na tabela (1.1), de acordo com [Mika, 1961]. Os resultados de Case e Mika sobre a influência de um parâmetro da equação de transporte em problemas monoenergéticos, independentes do tempo, foram uma das motivações para o nosso estudo. De fato, embora com as restrições citadas, estes resultados são os primeiros que estabelecem a influência de um parâmetro na solução da equação de transporte. Em nosso estudo, vamos estabelecer a influência de parâmetros de controle na solução das aproximação S_N em problemas estacionários, monoenergéticos e também com dois grupos de energia, na placa plana homogênea e sem fonte externa.

CAPÍTULO 2

QUADRATURAS ANGULARES

Neste capítulo, vamos mostrar algumas fórmulas de quadraturas que podem ser utilizadas para aproximações do termo integral que aparece na equação de transporte. Deste modo, obtemos uma aproximação da equação íntegro-diferencial (1.1); como estas fórmulas de quadraturas são calculadas sobre a variável μ , elas são chamadas de quadraturas angulares.

Seja f uma função real de uma variável definida num intervalo $[a; b]$. Uma quadratura é uma técnica numérica de calcular aproximadamente a integral definida de f neste intervalo por uma soma da forma

$$\int_a^b f(x)dx = \sum_{i=1}^N f(x_i)\omega_i + E_N, \quad (2.1)$$

onde os pontos $x_i \in [a; b]$ são chamados de valores discretos ou nós, ω_i são os pesos, $i = 1, \dots, N$, N é a ordem da quadratura e E_N é o erro na aproximação. Isto é, uma quadratura resulta de uma discretização do intervalo de integração em N pontos chamados de nós, avaliação da função nos nós e uma aproximação da integral por uma soma. O erro na aproximação depende da ordem da quadratura, da função a ser integrada, e dos nós. No estudo da equação de transporte, estamos interessados em quadraturas da variável angular μ , que pertence ao intervalo $[-1; +1]$. As várias fórmulas de quadratura existentes originam o que chamamos de aproximação em ordenadas discretas ou aproximação S_N da equação de transporte. Alguns exemplos de quadraturas são descritas a seguir:

2.1 Quadratura Angular de Gauss-Legendre

1. Os valores discretos $\mu_i, i = 1, \dots, N$ são as raízes do polinômio de Legendre de grau N , isto é, são as raízes da equação

$$P_N(\mu) = 0. \quad (2.2)$$

2. Os pesos da quadratura $\omega_i, i = 1, \dots, N$ são determinados de tal forma que a fórmula de quadratura dê o valor exato, isto é, com $E_N = 0$ para a integral

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} P_l(\mu) d\mu = \delta_{l,0}, \quad (2.3)$$

para $l = 0, \dots, (N - 1)$. Esta quadratura tem grau de precisão igual a $(2N - 1)$, isto é, o valor de $\int_{-1}^{+1} P(\mu) d\mu$ é exato, se $P(\mu)$ for um polinômio de grau $\leq (2N - 1)$, ver [Stroud, 1974].

2.2 Quadratura Angular de Yvon (Duplo P_N ou DP_N)

1. Os valores discretos $\mu_i, i = 1, \dots, (2N + 2)$ são as raízes do polinômio de Legendre de ordem $N + 1$, isto é, as raízes de

$$P_{N+1}(2\mu - 1) = 0, \quad (2.4)$$

com sinais positivos e negativos.

2. Os pesos da quadratura $\omega_i, i = 1, \dots, (2N + 2)$ são determinados como a solução do sistema

$$\sum_{n=1}^{N+1} P_l(2\mu_n - 1) \omega_n = \delta_{l,0}, \quad (2.5)$$

para $l = 0, \dots, N$ que valem para os valores positivos e negativos de μ_i .

Em problemas de penetração profunda em meios heterogêneos e problemas nos quais o espalhamento tem alta ordem de anisotropia, é recomendável o uso da quadratura de

Gauss-Legendre, devido à necessidade de cálculo de momentos para ordens mais elevadas. Em problemas de cálculo do fluxo com alto grau de anisotropia próximo às fronteiras do domínio, é recomendável o uso da quadratura DP_N , ver [Stacey, 2001]. Para ilustrar, consideremos a quadratura angular de Gauss-Legendre de ordem 2 para a equação de transporte com espalhamento isotrópico. A aproximação S_2 resultante para um problema numa placa plana tem nós μ_i e pesos ω_i calculados da seguinte forma:

- a) os valores discretos μ_i , $i = 1, 2$ são as raízes do polinômio de Legendre de grau 2, dado por $P_2(\mu) = \frac{1}{2}(3\mu^2 - 1)$, isto é, são as raízes da equação

$$\frac{1}{2}(3\mu^2 - 1) = 0 \quad (2.6)$$

- b) os pesos das quadraturas ω_i , $i = 1, 2$, são determinados de modo que a quadratura dê o valor exato para as integrais

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} P_l(\mu) d\mu = \delta_{l,0} \quad (2.7)$$

para $l = 0, 1$, isto é,

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} 1 d\mu = 1 \quad (2.8)$$

e

$$\frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} \mu d\mu = 0, \quad (2.9)$$

o que nos leva ao sistema

$$\frac{1}{2}(\omega_1 + \omega_2) = 1 \quad (2.10)$$

$$\frac{1}{2}(\omega_1\mu_1 + \omega_2\mu_2) = 0. \quad (2.11)$$

Da equação (2.6), segue que $\mu_1 = \sqrt{3}/3$, $\mu_2 = -\mu_1$, enquanto que das equações (2.10) e (2.11) tem-se que $\omega_1 = \omega_2 = 1$. Valores dos nós e dos pesos da quadratura de Gauss-Legendre podem ser encontrados na literatura [Stroud, 1974], [Bell e Glasstone, 1970], [Stacey, 2001], ou gerados automaticamente, usando rotinas do *Fortran* 90, técnica que foi utilizada em nosso trabalho, pois esta quadratura é largamente utilizada na solução de problemas na área de Fenômenos de Transporte. Em particular, observemos que os nós da quadratura de Gauss-Legendre distribuem-se de modo uniforme no intervalo $[-1, +1]$; por outro lado, outras quadraturas tem nós mais concentrados na vizinhança da singularidade $\mu = 0$ da equação de transporte, ver [Pitkäranta e Scott, 1983]. Quadraturas alternativas geradas a partir da discretização da variável angular μ em elementos finitos descontínuos podem ser encontrados em [Barros, 1997].

CAPÍTULO 3

ANÁLISE ESPECTRAL DA APROXIMAÇÃO S_N

Neste capítulo, vamos analisar a influência da seção de choque macroscópica total sobre os autovalores da matriz de transporte S_N , como definimos no capítulo (1), usando quadraturas de Gauss - Legendre. Como hipóteses gerais, vamos supor problemas estacionários, sem fonte externa, numa placa plana homogênea, com condições de contorno determinadas. Especificamente, vamos estudar com detalhe os seguintes problemas:

- a) monoenergéticos e com seção de choque diferencial de espalhamento com anisotropia de grau 1;
- b) monoenergéticos e com seção de choque diferencial de espalhamento com anisotropia de grau 2;
- c) com 2 grupos de energia e com seção de choque diferencial de espalhamento isotrópica.

Neste capítulo, faremos uma análise matemática da influência do parâmetro seção de choque macroscópica total sobre a solução da aproximação S_N . Porém, por simplicidade e para o melhor entendimento, usaremos a mesma notação e a denominação usual para os termos da equação de transporte. Nós vamos resolver numericamente alguns problemas particulares para pequenas ordens de quadratura, cujos resultados estão incluídos no texto, embora os resultados tenham sido obtidos também para elevadas ordens de quadratura, através de implementação computacional. Inicialmente, nós escreveremos a formulação da aproximação S_N em notação matricial. Lembremos que a equação de transporte unidimensional é

$$\mu \frac{\partial \psi(x, \mu)}{\partial x} + \sigma_T \psi(x, \mu) = \int_{-1}^1 k_s(\mu', \mu) \psi(x, \mu') d\mu'. \quad (3.1)$$

Por simplicidade, vamos supor que a seção de choque diferencial de espalhamento possa ser expandida em uma série de polinômios de Legendre até o termo de grau igual a L :

$$k_s(\mu', \mu) = \sum_{l=0}^L \frac{(2l+1)\sigma_{sl}}{2} P_l(\mu) P_l(\mu'), \quad (3.2)$$

onde σ_{sl} , $l = 0, \dots, L$, são números reais positivos, $\sigma_{sl} > \sigma_{sj}$, se $l < j$. Dizemos que a seção de choque diferencial de espalhamento, ou simplesmente, que o espalhamento tem anisotropia L . No caso particular em que $L = 0$, o espalhamento é dito ser isotrópico. Para obter a aproximação S_N , o termo integral à direita da equação (3.1) é aproximado por uma quadratura de Gauss-Legendre de ordem N , resultando para $i, j = 1, \dots, N$, o sistema de equações diferenciais ordinárias

$$\mu_j \frac{d\psi_j(x)}{dx} + \sigma_T \psi_j(x) = \sum_{i=1}^N \psi_i(x) k_{ij} \omega_i, \quad (3.3)$$

onde N é um número natural par, ω_i são os pesos da quadratura, $\psi_i(x) = \psi(x, \mu_i)$ denota a solução avaliada na direção μ_i , que corresponde à i -ésima raiz do polinômio de Legendre de ordem N , para $i = 1, \dots, N$ e $k_{ij} = k_s(\mu_i, \mu_j)$, para $i, j = 1, \dots, N$. As condições de contorno são escritas na forma

$$\psi_i(0) = g_1(\mu_i) \quad \mu_i > 0, \quad (3.3a)$$

$$\psi_i(X) = g_2(\mu_i) \quad \mu_i < 0. \quad (3.3b)$$

Estas equações de contorno representam a solução incidente nas duas fronteiras da placa, na metade das $\frac{N}{2}$ direções, ver figura (3.1). Na forma usual, as direções discretas são



Figura 3.1 – Fluxo incidente na fronteira da placa.

ordenadas em forma decrescente, i.e.,

$$-1 < \mu_N < \mu_{N-1} < \dots < \mu_{\frac{N}{2}+1} < 0 < \mu_{\frac{N}{2}} < \dots < \mu_1 < 1, \quad (3.4)$$

e têm a propriedade $\mu_i = -\mu_{N-i+1}$, $i = 1, \dots, N$; os pesos w_i da quadratura de Gauss-Legendre são calculados pela fórmula

$$w_i = \frac{2}{(1 - \mu_i^2) \left(P'_N(\mu_i) \right)^2}, \quad (3.5)$$

onde $P'_N(\mu_i)$ denota o valor da derivada de $P_N(\mu)$ com respeito a μ , calculada em $\mu = \mu_i$. Devido a simetria das raízes dos polinômios de Legendre, os pesos têm a propriedade $w_i = w_{N-i+1}$, para $i = 1, \dots, N$. O sistema de equações (3.3) pode ser escrito na seguinte forma matricial:

$$\frac{d\bar{\psi}(x)}{dx} = M\bar{\psi}(x). \quad (3.6)$$

Nesta equação, $\bar{\psi}(x) = [\psi_1(x) \ \psi_2(x) \ \dots \ \psi_N(x)]^t$, * que representa a solução calculada nas N direções discretas e a matriz M , definida como matriz de transporte S_N , é dada por

$$M = \mu^{-1}(W - \sigma_T I_N). \quad (3.7)$$

Na equação (3.7), temos $\mu^{-1} = \text{diag}(1/\mu_i)$, que é uma matriz diagonal de ordem N , I_N é a matriz identidade de ordem N e a matriz W , de ordem N , tem coeficientes $W(i, j) = k_{ij}w_j$. A solução formal do sistema de equações (3.6) é

$$\bar{\psi}(x) = \exp(Mx)\bar{\psi}(0). \quad (3.8)$$

Destacamos que a solução (3.8) é uma função contínua da variável espacial. Em relação à variável angular ela só está definida para algumas direções, chamadas de direções discretas. Porém, somente $\frac{N}{2}$ componentes de $\bar{\psi}(0)$ são conhecidas através da Eq.(3.3a), logo devemos usar a condição de contorno em $x = X$, ver Eq.(3.3b), para determinarmos completamente a solução em qualquer ponto da placa. Conhecidos todos os componentes do

*A notação $\bar{\psi}(x) = [\psi_1(x) \ \psi_2(x) \ \dots \ \psi_N(x)]^t$ denota o vetor transposto.

vetor $\bar{\psi}(0)$, podemos calcular o vetor $\bar{\psi}(x)$, para qualquer posição x . Em muitas aplicações [Vargas, 1998], [da Silva, 2002], estamos interessados em calcular o fluxo escalar, definido por

$$f(x) = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^N \psi_i(x) \omega_i \quad (3.9)$$

que será referido como a solução da aproximação S_N . De fato, o fluxo escalar é definido pela integral [Banoczi e Kelley, 1996]

$$f(x) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 \psi(x, \mu') d\mu', \quad (3.10)$$

i.e., a Eq.(3.9) é uma aproximação por uma quadratura de Gauss-Legendre do fluxo escalar definido pela Eq.(3.10), que não pode ser calculado analiticamente, pois o fluxo angular não é conhecido. Devido às limitações da aritmética finita dos sistemas de ponto flutuante, ocorrem problemas computacionais de *overflow* na avaliação da solução nos métodos numéricos baseados na aproximação S_N , em problemas com placas de grandes dimensões e para elevados valores de N devido à avaliação da exponencial, o que exige uma mudança de base das soluções. Uma das técnicas que permite minimizar o esforço computacional na avaliação desta exponencial é a diagonalização da matriz de transporte, ver [Segatto *et al.*, 1999]. No método \mathcal{LTS}_N , a solução dada pela equação (3.8) é implementada da seguinte forma: definimos o vetor coluna $\bar{\psi}(x) = [\psi_1(x), \psi_2(x), \dots, \psi_N(x)]^t$, onde $\psi_i(x) = \psi(x, \mu_i)$, $i = 1, \dots, N$ e, para cada $x \in [0, X]$, calculamos $\bar{\psi}(x)$ através da fórmula:

$$\bar{\psi}(x) = B(x) \bar{\psi}^*(0), \quad (3.11)$$

onde a matriz $B(x)$ é determinada para cada x e o vetor $\bar{\psi}^*(0)$ é determinado a partir das condições de contorno e da mudança de base na solução [Barichello e Vilhena, 1993], para evitar problema de *overflow* da aritmética finita. Para ilustrar o uso do método \mathcal{LTS}_N , consideremos o seguinte problema de ordenadas discretas:

$$\mu_j \frac{d\psi_j(x)}{dx} + \sigma_T \psi_j(x) = \sum_{i=1}^N \psi_i(x) k_{ij} \omega_i, \quad (3.12)$$

numa placa homogênea $0 < x < 100$, e condições de contorno

$$g_1(\mu_i) = 1 \quad \mu_i > 0, \quad (3.12a)$$

$$g_2(\mu_i) = 0 \quad \mu_i < 0. \quad (3.12b)$$

Suponhamos a seção de choque diferencial de espalhamento linearmente anisotrópica, i.e., tomamos $L = 1$ na Eq.(3.2), resultando

$$k_{ij} = \frac{\sigma_{s0}}{2} + \frac{3\sigma_{s1}}{2}\mu_i\mu_j \quad (3.13)$$

para $i, j = 1, \dots, N$. Em nosso exemplo, vamos considerar os componentes da seção de choque diferencial de espalhamento $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$, e a seção de choque macroscópica total $\sigma_T = 1.0$. Nós apresentamos na tabela (3.1) [†] a solução obtida através do método LTS_N , para valores crescentes de N , de modo a observar a convergência.

Tabela 3.1 – Fluxo escalar com $\sigma_T = 1.0$, $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$.

x	LTS_2	LTS_4	LTS_8	LTS_{16}	LTS_{32}	LTS_{64}
0	0.817256	0.822256	0.822836	0.822956	0.822984	0.822992
50	0.169912E - 1	0.165374E - 1	0.164701E - 1	0.164561E - 1	0.164528E - 1	0.164511E - 1
100	0.129181E - 3	0.123526E - 3	0.122496E - 3	0.122283E - 3	0.122232E - 3	0.122207E - 3

Comparando, vemos que os valores obtidos são praticamente iguais aos obtidos pelos métodos $SGF - S_N$ e DDS_N , [Barros e Larsen, 1990], e DS_N [Vargas, 1998]. Nossos resultados indicam a convergência para a solução, quando N cresce. Analisando a solução calculada com valores mais elevados da ordem de quadratura, podemos afirmar que nossos resultados estão corretos com pelo menos quatro dígitos significativos. Nosso interesse na próxima seção será analisar os autovalores da matriz de transporte S_N , isto é, se são reais ou complexos e, em caso de mudança da sua natureza, determinar os pontos de bifurcação.

[†]Na tabela (3.1), 0.166912E - 1 significa 0.166912×10^{-1} .

3.1 Resultados para Seção de Choque Diferencial de Espalhamento com Anisotropia de Grau 1

Nesta seção, vamos analisar a influência da seção de choque macroscópica total σ_T na solução da aproximação S_N . Considerando σ_T como um parâmetro de controle, nós vamos estudar como a variação de σ_T modifica os autovalores da matriz de transporte S_N e, em consequência, a solução da aproximação S_N . Consideremos o problema de ordenadas discretas

$$\mu_j \frac{d\psi_j(x)}{dx} + \sigma_T \psi_j(x) = \sum_{i=1}^N \omega_i k_{ij} \psi_i(x), \quad (3.14)$$

com condições de contorno

$$g_1(\mu_i) = 1, \quad \mu_i > 0 \quad (3.14a)$$

$$g_2(\mu_i) = 0, \quad \mu_i < 0 \quad (3.14b)$$

numa placa homogênea $0 \leq x \leq 100$, anisotropia linear ($L = 1$), isto é, a seção de choque diferencial de espalhamento é dada por

$$k_{ij} = k_s(\mu_i, \mu_j) = \frac{\sigma_{s0}}{2} + \frac{3\sigma_{s1}}{2} \mu_i \mu_j. \quad (3.15)$$

Na equação (3.15), os parâmetros σ_{s0} e σ_{s1} são reais, $\sigma_{s0} > \sigma_{s1} > 0$. O modelo (3.15) para a seção de choque diferencial de espalhamento é uma primeira aproximação mais complexa que o caso isotrópico, é uma função positiva para todo par (μ', μ) e é uma função simétrica, isto é, $k_s(\mu_i, \mu_j) = k_s(\mu_j, \mu_i)$. Suponhamos uma aproximação com ordem de quadratura $N = 2$. O sistema de equações diferenciais (3.14) é escrito como

$$\frac{d}{dx} \begin{bmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{bmatrix} = M \begin{bmatrix} \psi_1(x) \\ \psi_2(x) \end{bmatrix}, \quad (3.16)$$

onde a matriz de transporte S_2 é dada por

$$M = \frac{1}{\mu_1} \begin{bmatrix} (0.5 \sigma_{s0} + 1.5 \sigma_{s1} \mu_1^2) - \sigma_T & 0.5 \sigma_{s0} - 1.5 \sigma_{s1} \mu_1^2 \\ -0.5 \sigma_{s0} + 1.5 \sigma_{s1} \mu_1^2 & \sigma_T - (0.5 \sigma_{s0} + 1.5 \sigma_{s1} \mu_1^2) \end{bmatrix}. \quad (3.17)$$

Lembremos que $\mu_1 = \sqrt{3}/3$, $\mu_2 = -\mu_1$, $\omega_1 = \omega_2 = 1$. Temos então que os autovalores da matriz M dependem do parâmetro σ_T da seguinte forma:

a) se $\sigma_T > \sigma_{s0}$ ou $\sigma_T < \sigma_{s1}$, então os autovalores de M são reais diferentes de zero.

Devido a propriedade da matriz de transporte S_N , ver seção (3.3), eles aparecem de maneira simétrica, isto é, aos pares com sinais contrários;

b) se $\sigma_{s1} < \sigma_T < \sigma_{s0}$, então a matriz M admite autovalores imaginários puros, logo o sistema (3.16) apresenta soluções oscilatórias;

c) os pontos $\sigma_T = \sigma_{s0}$ e $\sigma_T = \sigma_{s1}$ são pontos de bifurcação.

O ponto $\sigma_T = \sigma_{s0}$ é referido como um ponto de bifurcação. Na vizinhança de σ_{s0} existem valores do parâmetro de controle σ_T para os quais a matriz de transporte S_2 tem autovalores reais (desde que $\sigma_T > \sigma_{s0}$), enquanto para outros valores de σ_T a matriz de transporte S_2 tem autovalores imaginários puros (desde que $\sigma_T < \sigma_{s0}$). Esta mudança dos autovalores corresponde a uma passagem de soluções não-oscilatórias para soluções oscilatórias da aproximação S_2 . Para provar tal resultado, observemos que a equação característica de M é

$$x^2 - tr(M)x + det(M) = 0 \quad (3.18)$$

onde $tr(M) = M(1,1) + M(2,2)$. Devido à simetria das raízes de $P_2(\mu)$, temos $tr(M) = 0$. Da equação (3.18), decorre que os autovalores de M são reais, se e somente se $det(M) < 0$. Mas $det(M) < 0$, se e somente se $(\sigma_T^2 - (\sigma_{s0} + 3\sigma_{s1}\mu_1^2)\sigma_T + 3\sigma_{s0}\sigma_{s1}\mu_1^2) > 0$. As raízes da equação quadrática $\sigma_T^2 - (\sigma_{s0} + 3\sigma_{s1}\mu_1^2)\sigma_T + 3\sigma_{s0}\sigma_{s1}\mu_1^2 = 0$ são $\sigma_T = \sigma_{s0}$ e $\sigma_T = \sigma_{s1}$. Se $\sigma_T > \sigma_{s0}$, então $det(M) < 0$ e os autovalores de M são reais e simétricos. Para $\sigma_{s1} < \sigma_T < \sigma_{s0}$, temos $det(M) > 0$, os autovalores de M são imaginários puros. Em resumo, o ponto $\sigma_T = \sigma_{s0}$ é um ponto de bifurcação. Na figura (3.2) mostramos esquematicamente a dependência dos autovalores em função do parâmetro de controle σ_T , para $N = 2$.



Figura 3.2 – Autovalores da matriz de transporte S_2 em função de σ_T , $L = 1$.

A figura (3.2) é um resumo dos resultados obtidos pela análise acima, para quaisquer valores de σ_{s1} e σ_{s0} . A seguir, nós mostramos a resolução numérica de problemas em que os coeficientes utilizados foram : $\sigma_{s1} = 0.8$, $\sigma_{s0} = 0.99$ e o parâmetro de controle σ_T variável no intervalo $[0.7; 1.2]$, com passo na discretização do intervalo igual a 0.001. Para ilustrar, apresentamos agora a solução de três diferentes problemas na placa plana $0 \leq x \leq 100$, resultantes da aproximação do problema em ordenadas discretas com $N = 2$, onde a solução é o fluxo escalar definido pela Eq.(3.9).

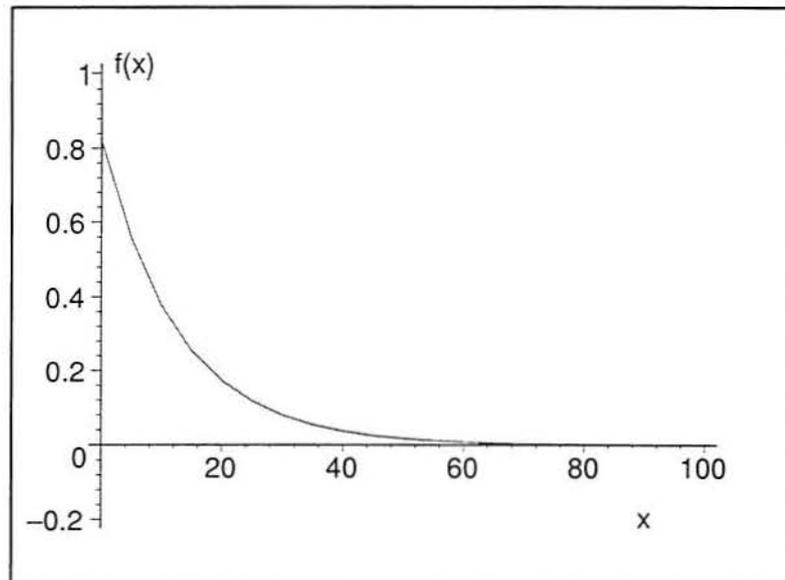


Figura 3.3 – Fluxo escalar com $\sigma_T = 1$, $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$, $N = 2$.

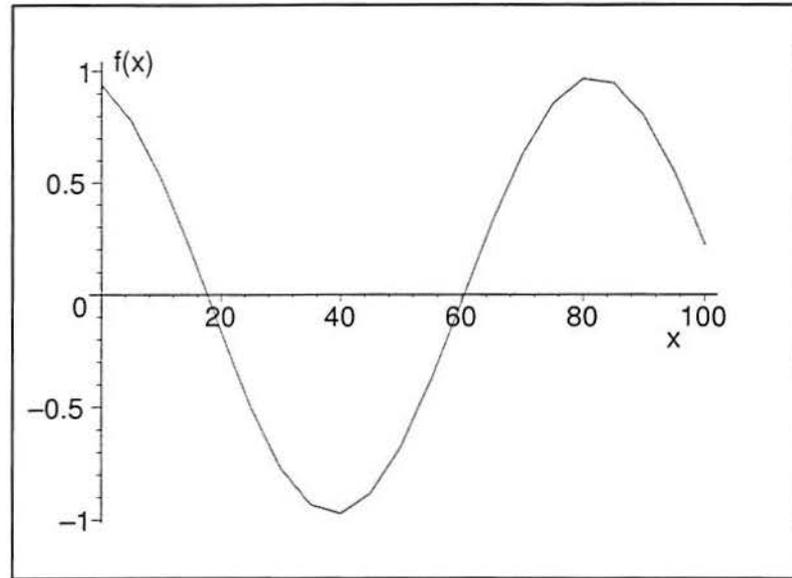


Figura 3.4 – Fluxo escalar com $\sigma_T = 0.98$, $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$,
 $N = 2$.

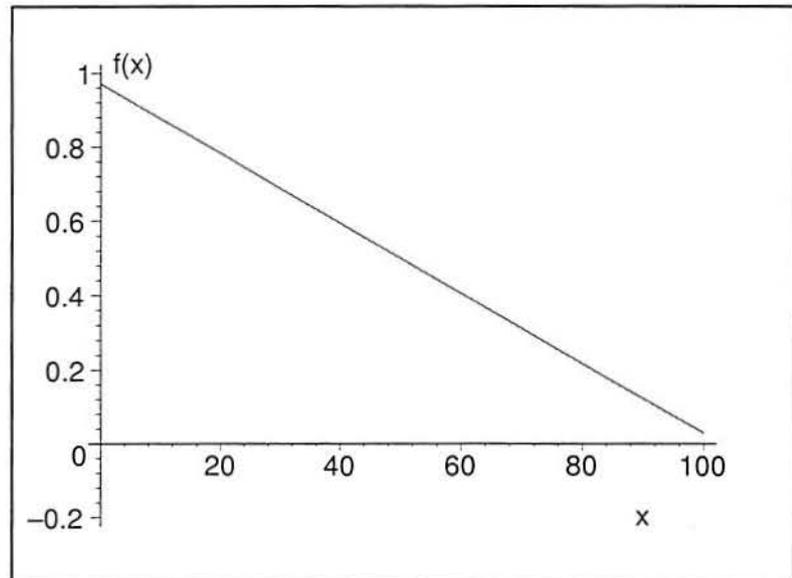


Figura 3.5 – Fluxo escalar com $\sigma_T = 0.99$, $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$,
 $N = 2$.

Fisicamente, a solução mostrada no gráfico da figura (3.4) não tem sentido, pois o fluxo escalar não pode ser negativo, embora a solução matemática do problema esteja correta. Por outro lado, a solução do primeiro problema, ver figura (3.3), está dentro do esperado, já que o fluxo escalar deve tender a zero, quando x tende à fronteira $X = 100$, devido à condição de contorno (3.14b). O mesmo vale para a solução do terceiro problema, ver figura (3.5). No gráfico da figura (3.5), com $\sigma_T = \sigma_{s0} = 0.99$ ocorre um ponto de bifurcação. Na vizinhança deste ponto, ocorre a passagem de solução não-oscilatória, ver figura (3.3), para uma solução oscilatória, ver figura (3.4).

3.1.1 Resultados Numéricos para $N = 4$.

Para $N = 4$, analogamente ao caso anterior com $N = 2$, vamos mostrar que $\sigma_T = \sigma_{s0}$ é um ponto de bifurcação para o problema e ocorrem intervalos nos quais a matriz de transporte S_N apresenta autovalores complexos e outros nos quais os autovalores são todos reais. Para ilustrar, mostramos a seguir resultados numéricos, com diferentes valores para os coeficientes da seção de choque diferencial de espalhamento. De fato, queremos mostrar que a existência de pontos de bifurcação não depende dos valores particulares destes coeficientes. Primeiramente, nós calculamos alguns autovalores; no programa que usamos para efetuar os cálculos, os coeficientes da seção de choque diferencial de espalhamento (σ_{s0} e σ_{s1}), a seção de choque macroscópica total (σ_T) e a ordem de quadratura (N) são lidos num arquivo de dados, a matriz de transporte S_N é montada e seus autovalores são calculados. Na tabela (3.2), mostramos os resultados de um primeiro exemplo no qual mostramos a influência de σ_T nos autovalores de M . Vamos denotar por λ_i o i -ésimo autovalor de M . Com relação à tabela (3.2), vemos que:

- a) se $\sigma_T < 0.64$, então a matriz de transporte S_4 tem quatro autovalores complexos;
- b) se $0.64 < \sigma_T < 0.8$, então a matriz de transporte S_4 tem todos os autovalores reais;
- c) se $0.8 < \sigma_T < 0.99$, então a matriz de transporte S_4 tem um par de autovalores imaginários puros e um par de autovalores reais;
- d) se $\sigma_T > 0.99$, então os autovalores matriz de transporte S_4 são todos reais.

Tabela 3.2 – Autovalores da matriz de transporte S_4 com $L = 1$,
 $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$.

σ_T	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4
0.61	$-0.718018 + 0.210476I$	$-0.718018 - 0.210476I$	$0.718018 + 0.210476I$	$0.718018 - 0.210476I$
0.62	$-0.720075 + 0.167355I$	$-0.720075 - 0.167355I$	$0.720075 + 0.167355I$	$0.720075 - 0.167355I$
0.63	$0.722181 + 0.103901I$	$0.722181 - 0.103901I$	$-0.722181 + 0.103901I$	$-0.722181 - 0.103901I$
0.64	0.810044	-0.810044	-0.638614	0.638614
0.66	0.944295	-0.944295	-0.513134	0.513134
0.68	-1.032321	1.032321	-0.433949	0.433949
0.70	1.107136	-1.107136	-0.367764	0.367764
0.72	1.175344	-1.175344	-0.307516	0.307516
0.74	1.239611	-1.239611	-0.249727	0.249727
0.76	1.301304	-1.301304	-0.191339	0.191338
0.80	-1.419859	-1.419859	-8.127106E-5I	8.127106E-5I
0.82	1.477572	-1.477572	-0.110530I	0.110530I
0.84	-1.534593	1.534593	0.144822I	-0.144822I
0.86	-1.591096	1.591096	-0.163051I	0.163051I
0.90	1.703035	-1.703035	-0.171243I	0.171243I
0.92	-1.758642	1.758642	0.163766I	-0.163766I
0.94	-1.814092	1.814091	0.148078I	-0.148078I
0.96	-1.869431	1.869431	0.121522I	-0.121522I
0.98	-1.924694	1.924694	-0.737859E-1I	0.737859E-1I
0.99	-1.952307	1.952307	-0.154534E-4	0.154534E-4
1.00	1.979912	-1.979912	-0.771515E-1	0.771515E-1
1.10	-2.255986	2.255986	-0.302543	0.302543
1.20	-2.532994	2.532993	-0.468987	0.468987
1.40	-3.091511	3.091509	-0.767183	0.767182
1.50	-3.373030	3.373029	-0.907567	0.907567

Se os coeficientes[†] da seção de choque diferencial de espalhamento forem $\sigma_{s0} = 0.9$, $\sigma_{s1} = 0.7$, obtém-se um resultado análogo conforme vemos na tabela abaixo.

[†]Na tabela (3.2), o valor $-8.127106E - 5I$ significa $-8.127106 \times 10^{-5}I, I = \sqrt{-1}$.

Tabela 3.3 – Autovalores da matriz de transporte S_4 com $L = 1$,

$$\sigma_{s_0} = 0.9, \sigma_{s_1} = 0.7.$$

σ_T	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4
0.50	$-0.623717 + 0.306632I$	$-0.623717 - 0.306632I$	$0.623717 - 0.306632I$	$0.623717 - 0.306632I$
0.52	$-0.626706 - 0.267881I$	$-0.626706 + 0.267881I$	$0.626706 + 0.267881I$	$0.626706 - 0.267881I$
0.54	$-0.629948 - 0.214089I$	$-0.629948 + 0.214089I$	$0.629948 + 0.214089I$	$0.629948 - 0.214089I$
0.56	$0.633706 - 0.127114I$	$0.633706 + 0.127114I$	$-0.633706 + 0.127114I$	$-0.633706 - 0.127114I$
0.58	-0.768761	0.768761	0.504982	-0.504982
0.60	-0.874857	0.874857	0.405741	-0.405741
0.62	0.954899	-0.954899	-0.331919	0.331919
0.64	1.025220	-1.025220	0.266317	-0.266317
0.68	1.152444	-1.152444	0.133687	-0.133687
0.70	1.212436	-1.212436	$0.142987E - 3$	$-0.142987E - 3$
0.72	1.271014	-1.271014	$-0.116093I$	$0.116093I$
0.76	1.385457	-1.385457	$-0.171725I$	$0.171725I$
0.80	-1.497760	1.497760	$0.182441I$	$-0.182441I$
0.84	-1.608947	1.608947	$-0.163437I$	$0.163437I$
0.88	1.719593	-1.719593	$0.104877I$	$-0.104877I$
0.92	-1.830034	1.830034	-0.113901	0.113901
0.96	1.940479	-1.940479	-0.211056	0.211056
1.00	-2.051049	2.051049	-0.288442	0.288442
1.02	-2.106407	2.106407	-0.324114	0.324113

Com relação à tabela (3.3), vemos que:

- se $\sigma_T < 0.57$, então a matriz de transporte S_4 tem quatro autovalores complexos;
- se $0.57 < \sigma_T < 0.7$, então a matriz de transporte S_4 tem todos os autovalores reais;
- se $0.7 < \sigma_T < 0.9$, então a matriz de transporte S_4 tem um par de autovalores imaginários puros e um par de autovalores reais;
- se $\sigma_T > 0.9$, então os autovalores da matriz de transporte S_4 são todos reais.

Podemos enunciar o seguinte resultado sobre os autovalores da matriz de transporte S_N , para ordem de quadratura $N = 4$ e anisotropia linear, em função do parâmetro de controle σ_T :

- a) existe um valor $s_{N0} < \sigma_{s1}$ tal que se $\sigma_T < s_{N0}$, então a matriz de transporte S_4 tem quatro autovalores complexos;
- b) se $s_{N0} < \sigma_T < \sigma_{s1}$, então a matriz de transporte S_4 tem todos os autovalores reais;
- c) se $\sigma_{s1} < \sigma_T < \sigma_{s0}$, então a matriz de transporte S_4 tem um par de autovalores imaginários puros e um par de autovalores reais;
- d) se $\sigma_T > \sigma_{s0}$, então os autovalores da matriz de transporte S_4 são todos reais.

Em geral, a natureza dos autovalores da matriz de transporte S_4 depende do parâmetro σ_T conforme a figura (3.6) :

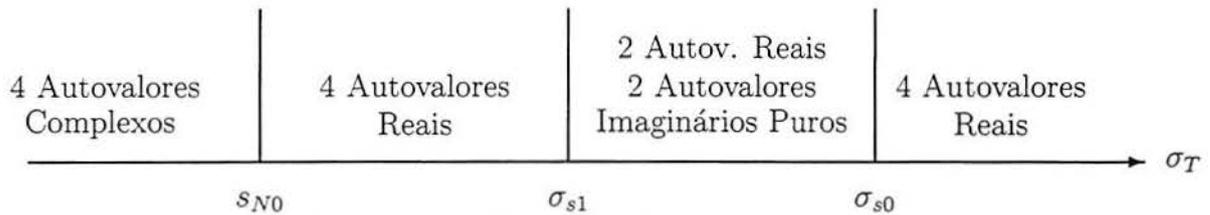


Figura 3.6 – Autovalores da matriz de transporte S_4 em função de σ_T , $L = 1$.

Para justificar estes resultados, consideremos M , a matriz de transporte resultante da aproximação S_4 e seção de choque diferencial de espalhamento dada por (3.15). Os autovalores de M são as raízes da equação característica

$$x^4 + a_2x^2 + a_0 = 0, \quad (3.19)$$

onde:

- a) $a_2 = 3\sigma_{s1}(\sigma_T - \sigma_{s0}) - 10\sigma_T^2 + 6.111111108\sigma_{s0}\sigma_T$;
- b) $a_0 = 11.66666665\sigma_T^3(\sigma_T - \sigma_{s0} - \sigma_{s1}) + 11.66666664\sigma_{s0}\sigma_{s1}\sigma_T^2$.

Analisando a_2 e a_0 como funções de σ_T , vemos que $a_2 < 0$, enquanto a_0 tem duas raízes reais positivas, se $\sigma_{s1} < \sigma_{s0}$, para $\sigma_T > 0$. Fazendo $x = w^2$, obtemos a equação característica na forma

$$w^2 + a_2w + a_0 = 0. \quad (3.20)$$

As raízes da equação (3.20) são $w = (-a_2 \pm \sqrt{a_2^2 - 4a_0})/2$. Nos valores testados, $a_2 < 0$, enquanto o sinal de a_0 depende de σ_T . De fato, se $\sigma_{s1} < \sigma_T < \sigma_{s0}$, então $a_0 < 0$; se $\sigma_T < \sigma_{s1}$ ou $\sigma_T > \sigma_{s0}$, então $a_0 > 0$. Logo, se:

- a) $a_2^2 - 4a_0 > 0$ e $a_0 > 0$, então as raízes de (3.20) são reais positivas e os autovalores de M são todos reais;
- b) $a_2^2 - 4a_0 > 0$ e $a_0 < 0$, então as raízes de (3.20) são reais simétricas. Então, M tem dois autovalores reais e dois autovalores imaginários puros;
- c) $a_2^2 - 4a_0 < 0$, então as raízes de (3.20) são complexas e os autovalores de M são todos complexos.

Em particular, para $\sigma_{s0} = 0.99$ e $\sigma_{s1} = 0.8$, vemos que uma das raízes de $a_2^2 - 4a_0 = 0$ é o valor $\sigma_T \simeq 0.636 = s_{N0}$, como vimos na tabela (3.2). Se $\sigma_{s0} = 0.9$ e $\sigma_{s1} = 0.7$, vemos que uma das raízes de $a_2^2 - 4a_0 = 0$ é o valor $\sigma_T \simeq 0.570 = s_{N0}$, como vimos na tabela (3.3).

Em resumo, o ponto $\sigma_T = \sigma_{s0}$ é um ponto de bifurcação, isto é, se $\sigma_T < \sigma_{s0}$, então M tem autovalores complexos, enquanto se $\sigma_T > \sigma_{s0}$, então todos os autovalores de M são reais. Geometricamente, podemos ver na seqüência de gráficos do polinômio característico da matriz de transporte S_4 a influência do parâmetro σ_T , considerando os coeficientes $\sigma_{s0} = 0.99$ e $\sigma_{s0} = 0.8$. Nos gráficos das figuras (3.7) e (3.8), vemos duas raízes complexas e duas reais, enquanto no gráfico da figura (3.10) vemos a existência de quatro raízes reais. O gráfico da figura (3.9) corresponde ao ponto de bifurcação, com duas raízes reais simétricas próximas de $x = 2$, e outras duas raízes próximas de zero, em conformidade com a tabela (3.2). Observemos que os pontos de intersecção do polinômio característico da figura (3.8) são os autovalores reais correspondentes ao valor de $\sigma_T = 0.9$, apresentados na tabela (3.2).

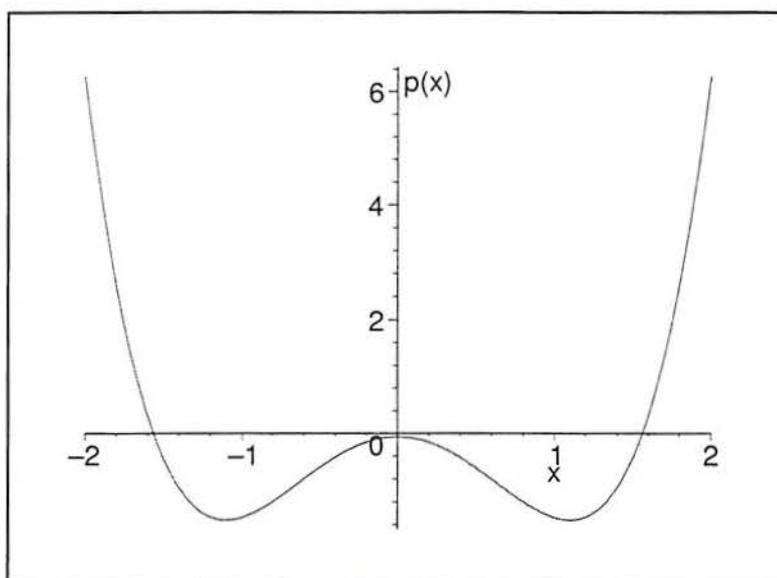


Figura 3.7 – Polinômio característico , $N = 4$, $\sigma_T = 0.85$, $\sigma_{s0} = 0.99$,
 $\sigma_{s1} = 0.8$.

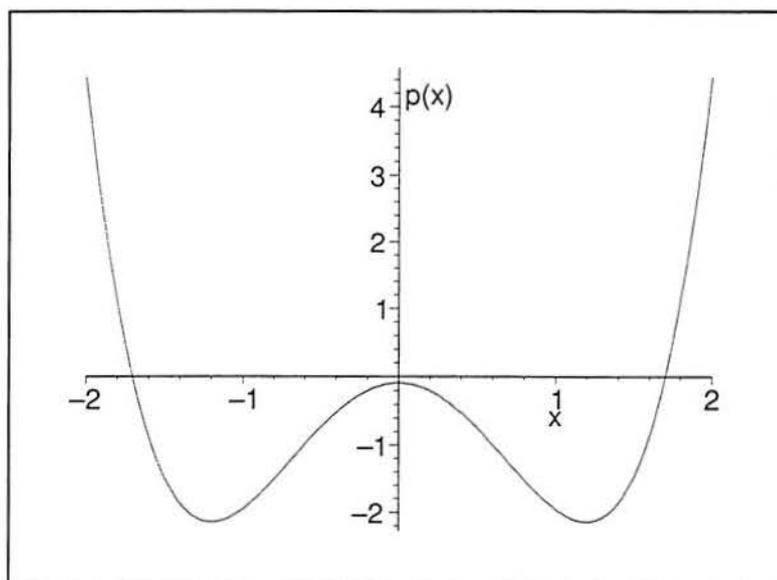


Figura 3.8 – Polinômio característico, $N = 4$, $\sigma_T = 0.9$, $\sigma_{s0} = 0.99$,
 $\sigma_{s1} = 0.8$.

Além disto, analisando os gráficos das figuras (3.7) à (3.10), vemos que os autovalores reais aumentam em valor absoluto, à medida que o parâmetro σ_T aumenta.

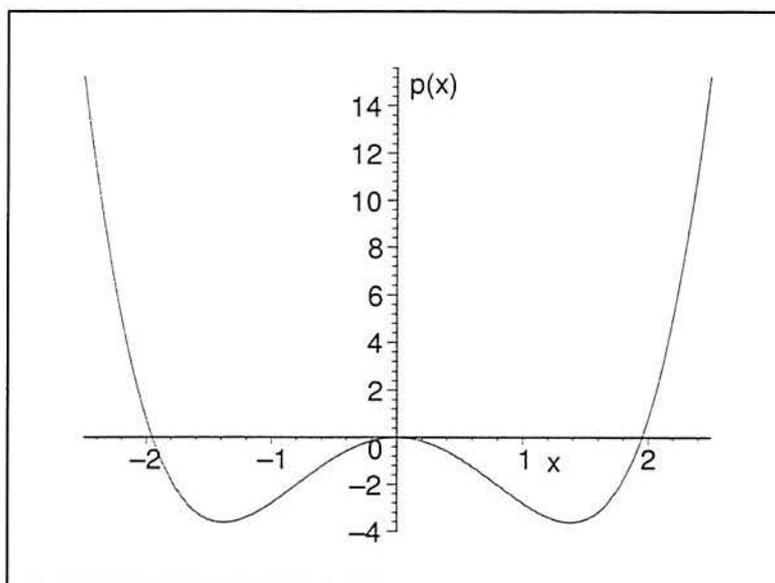


Figura 3.9 – Polinômio característico, $N = 4$, $\sigma_T = 0.99$, $\sigma_{s0} = 0.99$,
 $\sigma_{s1} = 0.8$.

Cada gráfico acima foi gerado da seguinte forma: nós desenvolvemos um programa no *Maple*, calculamos a matriz de transporte S_N , definimos o seu polinômio característico $p(x)$ e esboçamos os gráficos numa vizinhança da origem que permite visualizar as intersecções com o eixo x , que são os autovalores da matriz de transporte S_N . Nós observamos que os autovalores calculados através das rotinas do *IMSL/FORTRAN*, que foram tabelados neste trabalho, são bastante próximos dos autovalores obtidos através das rotinas do *Maple*, por isto os resultados obtidos com o *Maple* para os gráficos dos polinômios característicos foram considerados confiáveis, como vemos comparando os gráficos das figuras acima com a tabela (3.2). Na próxima seção, vamos mostrar os resultados para ordem de quadratura $N = 8$.

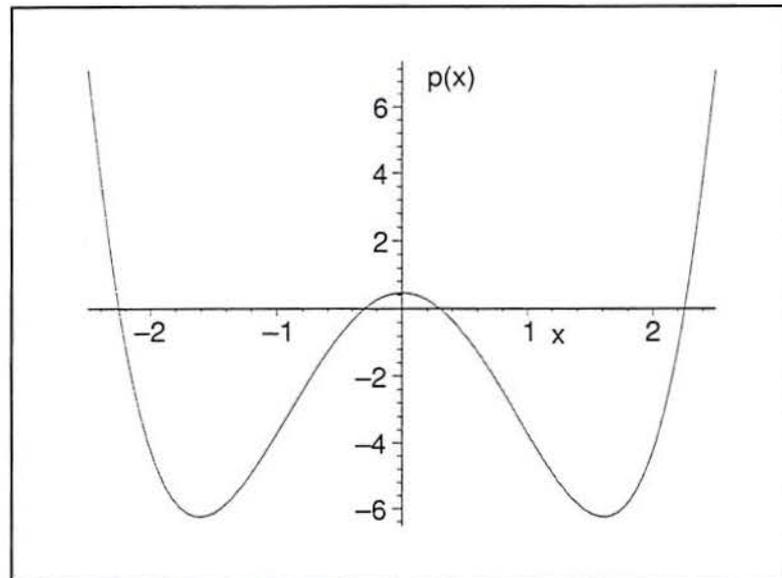


Figura 3.10 – Polinômio característico, $N = 4$, $\sigma_T = 1.1$, $\sigma_{s0} = 0.99$,
 $\sigma_{s1} = 0.8$.

3.1.2 Resultados Numéricos para $N = 8$

Nesta seção, vamos mostrar o cálculo de autovalores da matriz de transporte S_N com ordem de quadratura $N = 8$, e mostrar a existência de pontos de bifurcação para certos valores de σ_T . Nós vamos apresentar também os coeficientes do polinômio característico da matriz de transporte S_8 , em função seção de choque σ_T e dos coeficientes σ_{sl} da seção de choque diferencial de espalhamento. O estudo destes coeficientes permite justificar os resultados obtidos numericamente e foram obtidos com o uso do *Maple*. Inicialmente, vemos na tabela abaixo os autovalores calculados, com os mesmos coeficientes da seção de choque diferencial de espalhamento do primeiro exemplo visto na seção anterior.

De acordo com a tabela (3.4), vemos que:

- a) se $\sigma_T < 0.66$, então a matriz de transporte S_8 tem quatro autovalores complexos e quatro autovalores reais;
- b) se $0.66 < \sigma_T < 0.8$, então a matriz de transporte S_8 tem todos os autovalores reais;

- c) se $0.8 < \sigma_T < 0.99$, então a matriz de transporte S_8 tem um par de autovalores imaginários puros e seis autovalores reais;
- d) se $\sigma_T > 0.99$, então os autovalores da matriz de transporte S_8 são todos reais.

Tabela 3.4 – Autovalores da matriz de transporte S_8 com $L = 1$,
 $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$.

σ_T	$\lambda_{1,2}$	$\lambda_{3,4}$	$\lambda_{5,6}$	$\lambda_{7,8}$
0.61	± 2.327145	$0.652262 \pm 0.160982I$	$-0.652262 \pm 0.160982I$	± 0.787296
0.62	± 2.384347	$0.637039 \pm 0.141845I$	$-0.637039 \pm 0.141845I$	± 0.821150
0.63	± 2.441213	$0.623168 \pm 0.120649I$	$0.623168 \pm 0.120649I$	± 0.852758
0.64	± 2.497788	$0.610710 \pm 0.941183E - 1I$	$-0.610710 \pm 0.941183E - 1I$	± 0.881938
0.66	± 2.610193	± 0.529024	± 0.649234	± 0.934599
0.68	± 2.721791	± 0.436591	± 0.704568	± 0.982121
0.70	± 2.832750	± 0.368423	± 0.739320	± 1.026409
0.72	± 2.943201	± 0.307677	± 0.768636	± 1.068555
0.74	± 3.053240	± 0.249748	± 0.795532	± 1.109219
0.76	± 3.162947	± 0.191319	± 0.821122	± 1.148819
0.80	± 3.381602	$\pm 0.301079E - 2I$	± 0.870218	± 1.225857
0.82	± 3.490638	$\pm 0.110565I$	± 0.894163	± 1.263626
0.84	± 3.599526	$\pm 0.144847I$	± 0.917863	± 1.301041
0.90	± 3.925543	$\pm 0.171258I$	± 0.988063	± 1.411845
0.92	± 4.034060	$\pm 0.163778I$	± 1.011281	± 1.448453
0.94	± 4.142522	$\pm 0.148088I$	± 1.034437	± 1.484952
0.96	± 4.250941	$\pm 0.121532I$	± 1.057548	± 1.521365
0.99	± 4.413505	$\pm 0.651605E - 3I$	± 1.091253	± 1.575861
1.00	± 4.467679	$\pm 0.771513E - 1$	± 1.103677	± 1.594002
1.10	± 5.009219	± 0.302548	± 1.218749	± 1.775051
1.20	± 5.550670	± 0.468945	± 1.333811	± 1.956009

Tendo como coeficientes da seção de choque diferencial de espalhamento os mesmos valores do segundo exemplo da seção anterior, obtemos os resultados tabelados abaixo. De acordo com a tabela (3.5), vemos que:

- a) se $\sigma_T < 0.59$, então a matriz de transporte S_8 tem quatro autovalores complexos e quatro autovalores reais;
- b) se $0.59 < \sigma_T < 0.7$, então a matriz de transporte S_8 tem todos os autovalores reais;
- c) se $0.7 < \sigma_T < 0.9$, então a matriz de transporte S_8 tem um par de autovalores imaginários puros e seis autovalores reais;
- d) se $\sigma_T > 0.9$, então os autovalores da matriz de transporte S_8 são todos reais.

Tabela 3.5 – Autovalores da matriz de transporte S_8 com $L = 1$,
 $\sigma_{s0} = 0.9$, $\sigma_{s1} = 0.7$.

σ_T	$\lambda_{1,2}$	$\lambda_{3,4}$	$\lambda_{5,6}$	$\lambda_{7,8}$
0.56	± 2.149074	± 0.747940	$0.555710 \pm 0.120004I$	$-0.555710 \pm 0.120004I$
0.57	± 2.205789	± 0.777518	$0.542602 \pm 0.940523E - 1I$	$-0.542602 \pm 0.940521E - 1I$
0.58	± 2.262203	± 0.804936	$0.530741 \pm 0.549655E - 1I$	$-0.530741 \pm 0.549655E - 1I$
0.59	± 2.318354	± 0.830595	± 0.576610	± 0.463150
0.60	± 2.374275	± 0.854880	± 0.609540	± 0.410031
0.62	± 2.485540	± 0.900459	± 0.649536	± 0.332699
0.64	± 2.596180	± 0.943294	± 0.680303	± 0.266476
0.66	± 2.706332	± 0.984316	± 0.707727	± 0.202594
0.68	± 2.816100	± 1.024087	± 0.733521	± 0.133689
0.70	± 2.925559	± 1.062965	± 0.758393	$\pm 0.243483E - 03$
0.72	± 2.980194	± 1.082146	± 0.770601	$\pm 0.851212E - 1I$
0.74	± 3.143793	± 1.138921	± 0.806622	$\pm 0.152198I$
0.78	± 3.361393	± 1.213360	± 0.853780	$\pm 0.181053I$
0.82	± 3.578584	± 1.286904	± 0.900394	$\pm 0.176656I$
0.86	± 3.795510	± 1.359911	± 0.946712	$\pm 0.141197I$
0.88	± 3.903907	± 1.396285	± 0.969804	$\pm 0.104877I$
0.90	± 4.012278	± 1.432601	± 0.992867	$\pm 0.242117E - 3$
0.92	± 4.120619	± 1.468873	± 1.015909	± 0.113901
0.94	± 4.228950	± 1.505115	± 1.038937	± 0.166866
0.96	± 4.337264	± 1.541336	± 1.061956	± 0.211055

Observamos que a mudança dos autovalores tem um comportamento semelhante nos dois exemplos resolvidos acima. De modo geral, os autovalores de M são as raízes da equação característica

$$x^8 + a_6x^6 + a_4x^4 + a_2x^2 + a_0 = 0, \quad (3.21)$$

onde:

- a) $a_6 = -35.9999999999\sigma_T^2 + 2.99999999990\sigma_{s1}\sigma_T + 12.3746938777\sigma_{s0}\sigma_T - 2.99999999979\sigma_{s0}\sigma_{s1}$;
- b) $a_4 = 70.8759183592\sigma_{s0}\sigma_{s1}\sigma_T^2 - 120.371428569\sigma_{s0}\sigma_T^3 + 197.999999999\sigma_T^4 - 70.8759183620\sigma_{s1}\sigma_T^3$;
- c) $a_2 = 281.914285705\sigma_{s0}\sigma_T^5 - 232.885714257\sigma_{s0}\sigma_{s1}\sigma_T^4 - 343.199999997\sigma_T^6 + 232.885714265\sigma_{s1}\sigma_T^5$;
- d) $a_0 = \sigma_T^6(183.857142855\sigma_T^2 - (183.857142840\sigma_{s1} + 183.857142849\sigma_{s0})\sigma_T + 183.857142833\sigma_{s0}\sigma_{s1})$;

Como podemos ver, o polinômio característico da matriz de transporte S_8 tem somente potências pares de x . No primeiro exemplo, com $\sigma_{s0} = 0.99$ e $\sigma_{s1} = 0.8$, verificamos a existência do valor $s_{N0} \simeq 0.66$, tal que se $\sigma_T < s_{N0}$, a matriz M tem quatro autovalores complexos. Analisando os coeficientes do polinômio característico da matriz de transporte S_8 , vemos que:

- a) $a_8 = 1$;
- b) $a_6 < 0$, para todo σ_T ;
- c) $a_4 > 0$, para todo σ_T ;
- d) $a_2 < 0$, para todo σ_T ;
- e) $a_0 < 0$, se $0.8 < \sigma_T < 0.99$, e $a_0 > 0$, se $\sigma_T < 0.8$ ou $\sigma_T > 0.99$.

As duas últimas desigualdades ($a_2 < 0$ e $a_0 < 0$) explicam a existência de autovalores complexos no intervalo $(0.8, 0.99)$. No segundo exemplo, com $\sigma_{s0} = 0.9$ e $\sigma_{s1} = 0.7$, obtivemos $s_{N0} \simeq 0.58$, e os coeficientes do polinômio característico de M se comportam

de modo análogo ao descrito acima. Pela simetria, vemos que o número máximo de raízes reais positivas (e também de raízes reais negativas) desta equação é igual a 4. Deste modo, se a_0 e a_2 forem negativos, a equação (3.21) terá raízes complexas. Em geral, se σ_{s0} e σ_{s1} forem tais que $a_0 < 0$ para todo $\sigma_{s1} < \sigma_T < \sigma_{s0}$, então neste intervalo a matriz de transporte S_8 tem 2 autovalores complexos. De fato, o sinal do coeficiente a_0 depende do sinal da expressão:

$$\delta_{a_0} = 183.857142855\sigma_T^2 - (183.857142840\sigma_{s1} + 183.857142849\sigma_{s0})\sigma_T + 183.857142833\sigma_{s0}\sigma_{s1} \quad (3.22)$$

Para que a expressão (3.22) tenha duas raízes reais diferentes, basta que σ_{s0} e σ_{s1} sejam tais que a seguinte condição seja satisfeita:

$$183.857142855\sigma_T^2 - (183.857142840\sigma_{s1} + 183.857142849\sigma_{s0})\sigma_T + 183.857142833\sigma_{s0}\sigma_{s1} > 0 \quad (3.23)$$

A condição (3.23) é sempre verificada, para os valores dos coeficientes σ_{s0} e σ_{s1} utilizados nos nossos exemplos. Se a condição (3.23) for satisfeita, é garantida a existência de um intervalo $J \subset (\sigma_{s1}, \sigma_{s0})$ no qual a matriz de transporte S_8 tem autovalores complexos. Podemos afirmar que a influência de σ_T sobre os autovalores de M , para o caso de $N = 8$, pode ser resumida na figura abaixo:

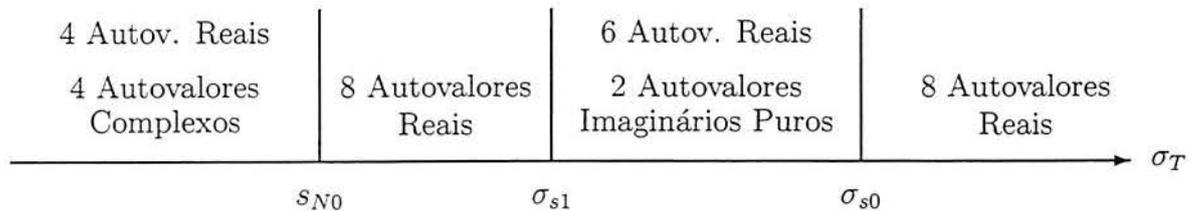


Figura 3.11 – Autovalores da matriz de transporte S_8 em função de σ_T , $L = 1$.

Novamente, constatamos a existência de um ponto de bifurcação para $\sigma_T = \sigma_{s0}$. Vemos então que os autovalores da matriz de transporte S_8 podem ser reais, mesmo que a seção de choque macroscópica total seja menor que um dos coeficientes da seção de choque diferencial de espalhamento, a saber, σ_{s1} . Isto é, soluções fisicamente aceitáveis podem ocorrer, se $\sigma_T < \sigma_{s1}$. Os resultados acima foram verificados *numericamente* para elevadas ordens de quadratura, até $N = 512$. Com respeito ao comportamento da solução na vizinhança do ponto de bifurcação σ_{s0} , nossos resultados indicam que a matriz de transporte S_N é mal-condicionada, se os valores de σ_T estiverem numa determinada vizinhança de σ_{s0} . A expressão mal-condicionada significa que no cálculo computacional dos autovalores

da matriz de transporte S_N pequenos ruídos podem levar a resultados ruins, se a seção de choque macroscópica total estiver próxima de σ_{s0} . Com o objetivo de demonstrar esta afirmação, nós calculamos, a seguir, o condicionamento da matriz de transporte S_N , em função de σ_T . Fazemos antes uma breve discussão sobre o número de condicionamento de uma matriz. O número de condicionamento de uma matriz A é uma informação sobre a sensibilidade da resolução de um sistema de equações lineares sujeito à uma perturbação. Isto é, suponhamos dois sistemas $Ax = b$ e $Ax_\epsilon = b_\epsilon$, onde ϵ denota o vetor perturbação de b , isto é, $b_\epsilon = b + \epsilon$, onde ϵ é um vetor com componentes de pequena magnitude. Quanto maior for o número de condicionamento de A , maior será a diferença entre as soluções e, quando acontece isto, dizemos que A é uma matriz mal-condicionada; se, por outro lado, o número de condicionamento de A for pequeno, a solução do sistema perturbado (com vetor b_ϵ) é próxima do sistema não-perturbado. Do ponto de vista prático, isto quer dizer que na resolução de um sistema de equações lineares, um pequeno erro (um ruído) na medição de um dado do vetor de entrada, pode provocar uma grande alteração na solução do sistema e levar a resultados completamente diferentes do esperado, se a matriz for mal-condicionada. Usando a definição de número de condicionamento de uma matriz dada na Eq.(A.6), nós calculamos o número de condicionamento da matriz de transporte S_N , com $N = 4$, em função do parâmetro de controle σ_T . No gráfico da figura (3.12), vemos que a matriz de transporte S_4 é mal-condicionada na vizinhança dos pontos de bifurcação. Para gerar este gráfico, nós usamos um procedimento do *Maple* desenvolvido por nós que tem como parâmetros a ordem de quadratura, os coeficientes da seção de choque diferencial de espalhamento e a seção de choque macroscópica total. Para cada valor do parâmetro de controle $\sigma_T = 0.7 + 0.0001i$, com $i = 1, \dots, 4000$, nós calculamos o número de condicionamento da matriz de transporte S_4 . Nas vizinhanças dos pontos σ_{s1} e σ_{s0} , o número de condicionamento é muito grande, por isto, no eixo vertical do gráfico da figura (3.12) é medido o logaritmo decimal do condicionamento. A geração deste gráfico no *Maple* exigiu aproximadamente 120s de *CPU* num *Pentium II*, 233 *MHz*, com 32MB de *RAM*.

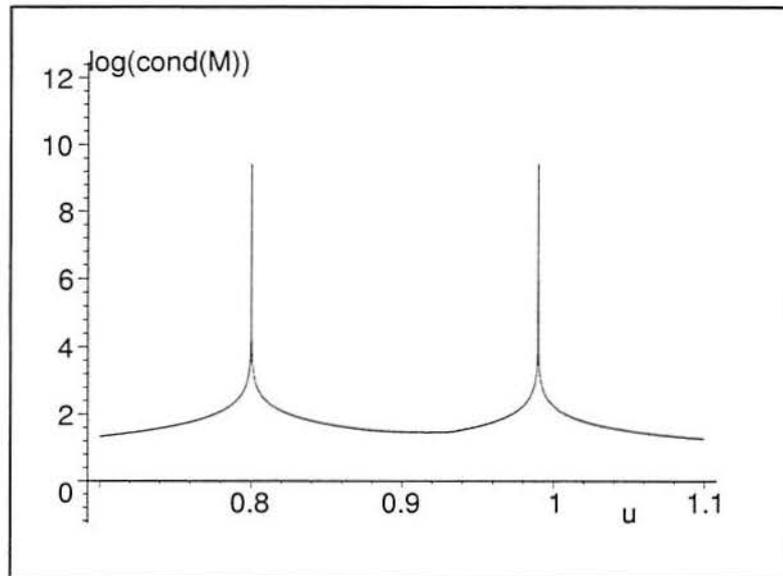


Figura 3.12 – Condicionamento como função de $u = \sigma_T$, $L = 1$, $N = 4$, $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$.

3.2 Resultados para Seção de Choque Diferencial de Espalhamento com Anisotropia de Grau 2

Nesta seção, vamos estender o estudo da influência da seção de choque macroscópica total σ_T sobre os autovalores da matriz de transporte S_N , em problemas em que a seção de choque diferencial de espalhamento tem anisotropia de grau 2, isto é:

$$k(\mu', \mu) = \sum_{l=0}^2 \frac{2l+1}{2} \sigma_{sl} P_l(\mu) P_l(\mu'), \quad (3.24)$$

onde $\sigma_{sl} \in \mathfrak{R}$, o conjunto dos números reais, $\sigma_{s0} > \sigma_{s1} > \sigma_{s2} > 0$. Neste estudo, devemos supor que $N \geq 4$, pois em S_2 os nós μ_i são as raízes de $P_2(\mu)$, logo se tomarmos $N = 2$, os resultados seriam os mesmos obtidos para $L = 1$, para qualquer valor de σ_{s2} . Analogamente ao desenvolvimento realizado na seção (3.1), nós calculamos a matriz de transporte S_N definida pela Eq.(3.7) e os correspondentes autovalores, em função de σ_T . Em particular, obtivemos a dependência dos autovalores da matriz de transporte com baixas ordens de quadratura, com diferentes coeficientes para a seção de choque diferencial de espalhamento. Vamos inicialmente calcular autovalores para ordem de quadratura

$N = 4$ e depois analisar o polinômio característico da matriz de transporte S_4 , o que é feito em (3.2.1), para a ilustração dos resultados verificados numericamente. Depois, o mesmo é feito em (3.2.2) para ordem de quadratura $N = 8$.

3.2.1 Resultados Numéricos para $N = 4$

Como na seção anterior, para ilustrar numericamente, mostramos na tabela (3.6) os resultados para quadratura de ordem igual a 4, em função de σ_T , a seção de choque macroscópica total. Uma análise da tabela (3.6) mostra a seguinte dependência dos autovalores da matriz de transporte S_4 :

- a) se $\sigma_T < 0.5$, então M tem 2 autovalores reais e 2 imaginários puros;
- b) se $0.5 < \sigma_T < 0.77$, então M tem 4 autovalores complexos;
- c) se $0.77 < \sigma_T < 0.8$, então M tem 4 autovalores reais;
- d) se $0.8 < \sigma_T < 0.99$, então M tem 2 autovalores reais e 2 autovalores imaginários puros;
- e) se $\sigma_T > 0.99$, então M tem 4 autovalores reais.

Destacamos a existência do intervalo $J = (0.77, 0.8)$ tal que para $\sigma_T \in J$, os autovalores de M são todos reais. Observamos também a simetria dos autovalores reais, para todos os valores de σ_T . Como na seção anterior, vemos que $\sigma_T = \sigma_{s0}$ é um ponto de bifurcação. Isto é, na vizinhança de σ_{s0} , existem valores de σ_T para os quais todos os autovalores de M são reais (desde que $\sigma_T > \sigma_{s0}$), enquanto para outros valores de σ_T , a matriz M tem autovalores imaginários puros (desde que $\sigma_T < \sigma_{s0}$). Antes de analisarmos o caso geral, consideremos a seção de choque diferencial de espalhamento com coeficientes $\sigma_{s0} = 0.9$, $\sigma_{s1} = 0.7$ e $\sigma_{s2} = 0.5$. Então podemos ver na tabela (3.7) os autovalores de M .

Tabela 3.6 – Autovalores da matriz de transporte S_4 com $L = 2$,
 $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$, $\sigma_{s2} = 0.5$.

σ_T	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4
0.46	0.623626I	-0.623626I	-0.315381	0.315381
0.48	0.600078I	-0.600078I	0.225300	-0.225300
0.50	0.566765I	-0.566765I	0.274954E-4I	-0.274954E-4I
0.52	0.514601I	-0.514601I	0.245542I	-0.245542I
0.54	0.748634E-1+0.407560I	0.748634E-1-0.407560I	-0.748634E-1+0.407560I	-0.748634E-1-0.407560I
0.56	0.152788+0.421650I	0.152788-0.421650I	-0.152788+0.421650I	-0.152788-0.421650I
0.58	0.195681+0.427411I	0.195681-0.427411I	-0.195681+0.427411I	-0.195681-0.427411I
0.60	0.227303+0.426614I	0.227303-0.426614I	-0.227303+0.426614I	-0.227303-0.426614I
0.62	-0.253137+0.419948I	-0.253137-0.419948I	0.253137+0.419948I	0.253137-0.419948I
0.64	-0.275432+0.407535I	-0.275432-0.407535I	0.275432+0.407535I	0.275432-0.407535I
0.66	-0.295304+0.389065I	-0.295304-0.389065I	0.295304+0.389065I	0.295304-0.389065I
0.68	0.313345+0.363725I	0.313345-0.363725I	-0.313345+0.363725I	-0.313345-0.363725I
0.72	0.344813+0.284422I	0.344813-0.284422I	-0.344813+0.284422I	-0.344813-0.284422I
0.74	0.358016+0.219362I	0.358016-0.219362I	-0.358016+0.219362I	-0.358016-0.219362I
0.77	0.482072	-0.262466	-0.482072	0.262466
0.78	0.564589	-0.183228	-0.564589	0.183228
0.79	0.625894	-0.116815	-0.625894	0.116815
0.81	0.726290	0.999823E-1I	-0.999823E-1I	-0.726290
0.84	0.853302	0.165701I	-0.165701I	-0.853302
0.87	0.967240	0.183628I	-0.183628I	-0.967240
0.90	1.074133	0.181004I	-0.181004I	-1.074133
0.93	1.176627	0.162128I	-0.162128I	-1.176627
0.96	1.276134	0.123229I	-0.123229I	-1.276134
0.99	1.373499	0.173755E-4	-0.173755E-4	-1.373499
1.02	1.469268	0.137545	-0.137545	-1.469268
1.05	1.563812	0.203299	-0.203287	-1.563812

Uma análise da tabela (3.7) mostra que:

- se $\sigma_T < 0.5$, então M tem 2 autovalores reais e 2 autovalores imaginários puros;
- se $0.5 < \sigma_{st} < 0.7$, então M tem 4 autovalores complexos;
- se $0.7 < \sigma_T < 0.9$, então M tem 2 autovalores reais e 2 autovalores imaginários puros;
- se $\sigma_T > 0.9$, então M tem 4 autovalores reais.

Tabela 3.7 – Autovalores da matriz de transporte S_4 com $L = 2$,

$$\sigma_{s0} = 0.9, \sigma_{s1} = 0.7, \sigma_{s2} = 0.5.$$

σ_T	λ_1	λ_2	λ_3	λ_4
0.46	0.660599I	-0.600599I	0.227917	-0.227917
0.48	0.642204I	-0.642204I	0.158406	-0.158406
0.49	0.630984I	-0.630984I	0.111187	-0.111187
0.51	0.603799I	-0.603799I	0.109970I	-0.109970I
0.52	0.587418I	-0.587418I	0.155085I	-0.155085I
0.54	0.547304I	-0.547304I	0.220132I	-0.220132I
0.56	0.491614I	-0.491614I	0.277858I	-0.277858I
0.57	0.450467I	-0.450467I	0.313708I	-0.313708I
0.59	-0.872729E-1+0.371117I	-0.872729E-1-0.371117I	0.872729E-1+0.371117I	0.872729E-1-0.371117I
0.60	0.115283+0.362800I	0.115283-0.362800I	-0.115283+0.362800I	-0.115283-0.362800I
0.65	-0.193388+0.286083I	-0.193388-0.286083I	0.193388+0.286083I	0.193388-0.286083I
0.69	-0.211354+0.109561I	-0.211354-0.109561I	0.211354+0.109561I	0.211354-0.109561I
0.72	0.480440	-0.480440	0.169771I	-0.169771I
0.74	0.584720	-0.584720	0.196941I	-0.196941I
0.78	0.756337	-0.756337	0.206777I	-0.206777I
0.82	0.907333	-0.907333	0.188940I	-0.188940I
0.85	1.013684	-1.013684	0.159164I	-0.159164I
0.88	1.116315	-1.116315	0.106162I	-0.106162I
0.89	1.149897	-1.149897	0.762814E-1I	0.762814E-1I
0.91	1.216296	-1.216296	0.786061E-1	-0.786061E-1
0.92	1.249160	-1.249160	0.112746	-0.112746
0.96	1.378788	-1.378788	0.205614	-0.205614
1.00	1.506124	-1.506124	0.277753	-0.277753

Neste caso, não ocorre a existência de um intervalo no qual a matriz M tem somente autovalores reais, como no caso anterior. Novamente, verificamos a existência de bifurcação para $\sigma_T = \sigma_{s0} = 0.9$. Para analisar de modo geral, consideremos o polinômio característico da matriz de transporte S_4 , que é dado por

$$p(x) = x^4 + a_2x^2 + a_0, \quad (3.25)$$

onde:

$$\begin{aligned} \text{a) } a_0 &= 11.666666664\sigma_T^2((\sigma_{s0}(\sigma_{s1} + \sigma_{s2}) + \sigma_{s1}\sigma_{s2}) + \sigma_T^2 - \sigma_T(\sigma_{s0} + \sigma_{s1} + \sigma_{s2})) \\ &\quad - 11.666666664\sigma_T\sigma_{s0}\sigma_{s1}\sigma_{s2}; \end{aligned}$$

$$\text{b) } a_2 = 6.111111108\sigma_T\sigma_{s0} + 3\sigma_{s1}(\sigma_T - \sigma_{s0}) + 3.888888887\sigma_T\sigma_{s2} - 10\sigma_T^2.$$

No intervalo em que foram calculados os autovalores da tabela (3.6), com os valores $\sigma_{s0} = 0.99$, $\sigma_{s1} = 0.8$ e $\sigma_{s2} = 0.5$ analisando os sinais dos coeficientes a_2 e a_0 , obtemos:

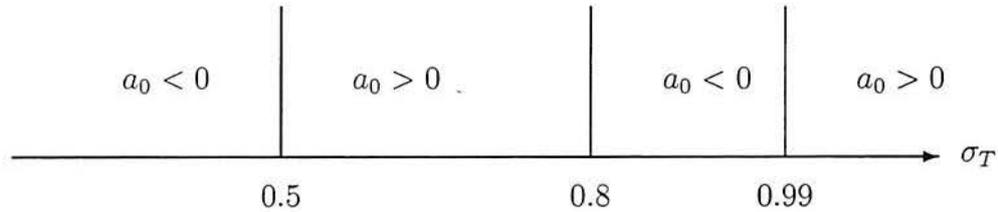


Figura 3.13 – Variação de a_0 em função de σ_T , $N = 4$, $L = 2$

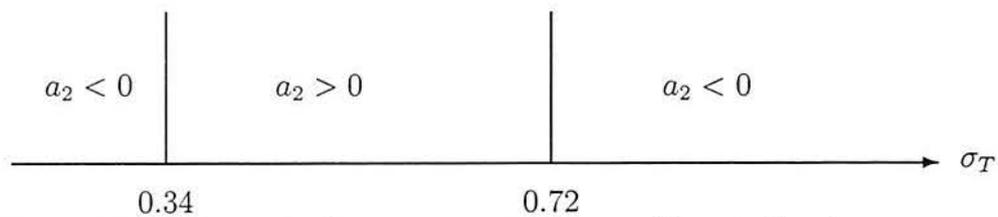


Figura 3.14 – Variação de a_2 em função de σ_T , $N = 4$, $L = 2$

Nos intervalos em que dois coeficientes sucessivos não-nulos do polinômio característico tem o mesmo sinal, a matriz de transporte S_4 tem autovalores complexos. Se $\sigma_T \in (0.5, 0.72)$, por exemplo, temos $a_0 > 0$ e $a_2 > 0$, ou se $\sigma_T \in (0.8, 0.99)$, então temos $a_2 < 0$ e $a_0 < 0$, logo M tem autovalores complexos, em conformidade com a tabela (3.6). No intervalo em que foram calculados os autovalores da tabela (3.7), com os coeficientes $\sigma_{s0} = 0.9$ e $\sigma_{s1} = 0.7$ e $\sigma_{s2} = 0.5$, obtemos um resultado análogo. Por exemplo, se $\sigma_T \in (0.5, 0.7)$, temos $a_2 > 0$ e $a_0 > 0$, logo M tem autovalores complexos, em conformidade com a tabela (3.7). Observemos que no primeiro exemplo, a matriz de transporte S_4 tem somente autovalores reais, para $\sigma_T \in (0.77, 0.8)$, enquanto no segundo exemplo não constatamos a existência de um intervalo em que M tem somente autovalores reais. Nos dois modelos estudados, vemos que $\sigma_T = \sigma_{s0}$ é um ponto de bifurcação.

3.2.2 Resultados Numéricos para $N = 8$

Em problemas com anisotropia de grau 2, nós verificamos uma maior complexidade no comportamento dos autovalores da matriz de transporte S_N para valores mais

elevados da ordem de quadratura. Para ilustrar, nós apresentamos na tabela (3.8) os autovalores de M em problemas com $N = 8$. Os coeficientes σ_{sI} da seção de choque diferencial de espalhamento são os mesmos da seção anterior com $N = 4$. Devido à simetria, os autovalores foram tabelados aos pares, que corresponde à ordem dos resultados apresentados pelo programa desenvolvido em *Fortran 90* para o cálculo dos autovalores.

Tabela 3.8 – Autovalores da matriz de transporte S_8 com $L = 2$,

$$\sigma_{s0} = 0.99, \sigma_{s1} = 0.8, \sigma_{s2} = 0.5.$$

σ_T	$\lambda_{1,2}$	$\lambda_{3,4}$	$\lambda_{5,6}$	$\lambda_{7,8}$
0.44	± 0.949636	$\pm 0.984462I$	$-0.445681 \pm 0.661932E - 1I$	$0.445681 \pm 0.661932E - 1I$
0.45	± 0.993529	$\pm 0.961334I$	$-0.432563 \pm 0.189504E - 1I$	$0.432563 \pm 0.189504E - 1I$
0.46	± 1.037145	$\pm 0.936616I$	± 0.347171	± 0.489890
0.48	± 1.124710	$\pm 0.882100I$	± 0.233903	± 0.532874
0.50	± 1.213802	$\pm 0.819732I$	$\pm 0.673235E - 7$	± 0.565315
0.52	± 1.305064	$\pm 0.746369I$	$\pm 0.234109I$	± 0.594822
0.54	± 1.398721	$\pm 0.651129I$	$\pm 0.350224I$	± 0.623165
0.56	± 1.494753	$0.953848E - 1 \pm 0.498203I$	$-0.953848E - 1 \pm 0.498203I$	± 0.651042
0.60	± 1.693230	$0.235382 \pm 0.472935I$	$-0.235382 \pm 0.472935I$	± 0.706696
0.62	± 1.795180	$0.270035 \pm 0.452994I$	$-0.270035 \pm 0.452994I$	± 0.734858
0.66	± 2.003217	$0.316080 \pm 0.399936I$	$-0.316080 \pm 0.399936I$	± 0.792540
0.70	± 2.211530	$0.343595 \pm 0.325618I$	$-0.343595 \pm 0.325618I$	± 0.852814
0.74	± 2.430070	$0.357421 \pm 0.210529I$	$-0.357421 \pm 0.210529I$	± 0.916520
0.76	± 2.538155	$0.358627 \pm 0.994742E - 1I$	$-0.358627 \pm 0.994742E - 1I$	± 0.949860
0.77	± 2.592332	± 0.450469	± 0.263739	± 0.966920
0.78	± 2.646586	± 0.523202	± 0.183326	± 0.984242
0.79	± 2.700909	± 0.573055	± 0.116822	± 1.001822
0.80	± 2.755294	± 0.613641	$\pm 0.413252E - 7$	± 1.019655
0.82	± 2.864223	± 0.680158	$\pm 0.132370I$	± 1.056044
0.85	± 3.027933	± 0.759892	$\pm 0.174691I$	± 1.112247
0.90	± 3.301360	± 0.865207	$\pm 0.181008I$	± 1.209168
0.94	± 3.520419	± 0.935768	$\pm 0.151880I$	± 1.288462
0.98	± 3.739633	± 0.999252	$\pm 0.741030E - 1I$	± 1.368431
0.99	± 3.794451	± 1.014337	$\pm 0.190198E - 7I$	± 1.388463
1.00	± 3.849274	± 1.029170	$\pm 0.768455E - 1$	± 1.408497
1.02	± 3.958928	± 1.058171	± 0.137545	± 1.448556
1.05	± 4.123422	± 1.100299	± 0.203286	± 1.508567
1.10	± 4.397581	± 1.167808	± 0.293170	± 1.608234

Analisando os resultados da tabela (3.8), podemos observar que :

- a) se $\sigma_T < 0.46$, então M tem 6 autovalores complexos e 2 autovalores reais;
- b) se $0.46 < \sigma_T < 0.50$, então M tem 2 autovalores imaginários puros e 6 autovalores reais;
- c) se $0.50 < \sigma_T < 0.77$, então M tem 4 autovalores complexos e 4 autovalores reais;
- d) se $0.77 < \sigma_T < 0.8$, então M tem 8 autovalores reais;
- e) se $0.80 < \sigma_T < 0.99$, então M tem 2 autovalores imaginários puros e 6 autovalores reais;
- f) se $\sigma_T > 0.99$, então M tem 8 autovalores reais.

Com o objetivo de demonstrar que as nossas conclusões não dependem deste modelo em particular, nós calculamos os autovalores de M também para outros valores de σ_{sl} , como mostra a tabela abaixo. Da tabela (3.9), vemos que:

- a) se $\sigma_T < 0.42$, então M tem 6 autovalores complexos e 2 autovalores reais;
- b) se $0.42 < \sigma_T < 0.50$, então M tem 2 autovalores imaginários puros e 6 autovalores reais;
- c) se $0.50 < \sigma_T < 0.70$, então M tem 4 autovalores complexos e 4 autovalores reais;
- d) se $0.70 < \sigma_T < 0.90$, então M tem 2 autovalores imaginários puros 6 autovalores reais;
- e) se $\sigma_T > 0.90$, então M tem 8 autovalores reais.

O polinômio característico da matriz M é:

$$p(x) = x^8 + a_6x^6 + a_4x^4 + a_2x^2 + a_0, \quad (3.26)$$

onde:

$$\begin{aligned} \text{a) } a_0 = & -183.8571423\sigma_T^7\sigma_{s0} - 183.8571415\sigma_T^7\sigma_{s1} - 183.8571419\sigma_T^7\sigma_{s2} + \\ & 183.8571404\sigma_T^6(\sigma_{s0}\sigma_{s1} + \sigma_{s0}\sigma_{s2} + \sigma_{s1}\sigma_{s2}) - 183.8571398\sigma_T^5\sigma_{s0}\sigma_{s1}\sigma_{s2} \\ & + 183.8571431\sigma_T^8; \end{aligned}$$

- b) $a_2 = 185.6081600\sigma_T^3\sigma_{s0}\sigma_{s1}\sigma_{s2} - 343.19999995\sigma_T^6 - 232.8857120\sigma_T^4\sigma_{s0}\sigma_{s1}$
 $- 185.6081618\sigma_T^4\sigma_{s0}\sigma_{s2} - 185.6081607\sigma_T^4\sigma_{s1}\sigma_{s2} + 281.9142853\sigma_T^5\sigma_{s0}$
 $+ 232.8857126\sigma_T^5\sigma_{s1} + 246.8938767\sigma_T^5\sigma_{s2};$
- c) $a_4 = -97.02448943\sigma_T^3\sigma_{s2} + 198\sigma_T^4 + 35.15510176\sigma_T^2\sigma_{s0}\sigma_{s2} - 35.15510145\sigma_T\sigma_{s0}\sigma_{s1}\sigma_{s2}$
 $+ 35.15510158\sigma_T^2\sigma_{s1}\sigma_{s2} - 70.87591805\sigma_T^3\sigma_{s1} - 120.3714284\sigma_T^3\sigma_{s0}$
 $+ 70.87591774\sigma_T^2\sigma_{s0}\sigma_{s1};$
- d) $a_6 = -36\sigma_T^2 - 3\sigma_{s0}\sigma_{s1} + 11.71836735\sigma_T\sigma_{s2} + 12.37469387\sigma_T\sigma_{s0} + 3\sigma_T\sigma_{s1}.$

Tabela 3.9 – Autovalores da matriz de transporte S_8 com $L = 2$,
 $\sigma_{s0} = 0.9$, $\sigma_{s1} = 0.7$, $\sigma_{s2} = 0.5$.

σ_T	$\lambda_{1,2}$	$\lambda_{3,4}$	$\lambda_{5,6}$	$\lambda_{7,8}$
0.40	$\pm 1.051267I$	± 0.872588	$-0.424729 \pm 0.529180E - 1I$	$0.424729 \pm 0.529180E - 1I$
0.42	$\pm 1.014463I$	± 0.953115	± 0.455326	± 0.365094
0.46	± 1.117728	$\pm 0.925427I$	± 0.525577	± 2.326390
0.48	± 1.203741	$\pm 0.873547I$	± 0.553792	± 0.159782
0.50	± 1.292675	$\pm 0.816695I$	± 0.581187	$\pm 0.344355E - 7$
0.52	± 1.384534	$\pm 0.754332I$	± 0.608312	$\pm 0.153921I$
0.56	± 1.576332	± 0.662774	$\pm 0.605073I$	$\pm 0.269010I$
0.60	± 1.777043	± 0.718520	$\pm 0.389356I$	$\pm 0.389356I$
0.64	± 1.984265	± 0.776488	$0.189202 \pm 0.314594I$	$-0.189202 \pm 0.314594I$
0.68	± 2.195951	± 0.837565	$0.215261 \pm 0.181033I$	$-0.215261 \pm 0.181033I$
0.69	± 2.249380	± 0.853419	$0.210143 \pm 0.107883I$	$-0.210143 \pm 0.107883I$
0.70	± 2.302974	± 0.869529	± 0.320540	$\pm 0.584625E - 7$
0.72	± 2.410585	± 0.902550	± 0.454223	$\pm 0.169852I$
0.76	± 2.627128	± 0.971898	± 0.605432	$\pm 0.206411I$
0.78	± 2.735889	± 1.008175	± 0.662169	$\pm 0.206818I$
0.80	± 2.844890	± 1.045414	± 0.711966	$\pm 0.200777I$
0.84	± 3.063420	± 1.122251	± 0.797401	$\pm 0.170940I$
0.88	± 3.282426	± 1.201263	± 0.870334	$\pm 0.106163I$
0.90	± 3.392044	± 1.241251	± 0.903638	$\pm 0.188241E - 7I$
0.92	± 3.501717	± 1.281420	± 0.935380	± 0.112746
0.94	± 3.611429	± 1.321689	± 0.965858	± 0.163757

Podemos afirmar que os autovalores da matriz de transporte S_8 dependem da seção de choque macroscópica total σ_T da seguinte forma:

- a) se $\sigma_{s1} < \sigma_T < \sigma_{s0}$, então M tem 2 autovalores imaginários puros e 6 autovalores reais.

b) se $\sigma_T > \sigma_{s0}$, então M tem 8 autovalores reais.

De fato, analisando o sinal dos coeficientes do polinômio característico em função de σ_T , para os dois exemplos, cujos autovalores estão tabelados acima, concluímos que para obtemos que se $\sigma_{s1} < \sigma_T < \sigma_{s0}$, então $a_0 < 0$ e $a_2 < 0$, logo M tem autovalores complexos. Se $\sigma_T > \sigma_{s0}$, então $a_0 > 0$, $a_2 < 0$, $a_4 > 0$ e $a_6 < 0$, e a matriz M tem 8 autovalores reais, em conformidade com as tabelas (3.8) e (3.9). Quanto à influência do parâmetro de controle na natureza dos autovalores de M , o resultado acima mostra que existe um intervalo de variação da seção de choque macroscópica total, a saber $(\sigma_{s1}, \sigma_{s0})$, no qual M tem autovalores complexos, enquanto para valores maiores do que o coeficiente σ_{s0} , todos os autovalores da matriz de transporte S_8 são reais. Portanto, o ponto $\sigma_T = \sigma_{s0}$ é um ponto de bifurcação.

3.3 Paridade dos Autovalores da Matriz de Transporte S_N

Os autovalores da matriz de transporte S_N quando N é par aparecem aos pares, isto é, dado um autovalor o seu negativo também é. Esta propriedade, que o seu polinômio característico $p(x)$ contém somente potências pares de x , estabelecida por Abreu [Abreu, 1997], foi verificada computacionalmente. A seguir, apresentamos uma demonstração desta propriedade com o uso de uma técnica simples que explora diretamente a simetria das raízes dos polinômios de Legendre.

Proposição 1 *Sejam M a matriz definida pela equação (3.7), com N par e $p(x)$ o polinômio característico de M , em um problema com seção de choque diferencial de espalhamento linearmente anisotrópica. Então:*

$$p(x) = x^N + a_{N-2}x^{N-2} + \dots + a_2x^2 + a_0. \quad (3.27)$$

Prova. Para $N = 2$, segue da equação (3.18), já que $tr(M) = 0$. Para $N = 4$ escrevemos o polinômio característico de M como:

$$p(x) = x^4 + q_1x^3 + q_2x^2 + q_3x + q_4, \quad (3.28)$$

onde

- a) $q_1 = -T_1$,
- b) $q_2 = -\frac{1}{2}(q_1 T_1 + T_2)$,
- c) $q_3 = -\frac{1}{3}(q_2 T_1 + q_1 T_2 + T_3)$,
- d) $q_4 = -\frac{1}{4}(q_3 T_1 + q_2 T_2 + q_1 T_3 + T_4)$,

onde $T_i = \text{tr}(M^i)$, para $i = 1, \dots, 4$. Devido a simetria das raízes do polinômio de Legendre, segue que $T_1 = \text{tr}(M) = 0$, pois $M(5 - i, 5 - i) = -M(i, i)$, para $i = 1, \dots, 4$. Resta demonstrar que $T_3 = 0$, donde seguirá que $q_3 = 0$, pois $q_3 = -\frac{1}{3}T_3$. Se $M(i, j) = M_{ij}$ denota o elemento genérico de M , então a matriz $M^2 = M * M$ é a matriz cujo elemento genérico é $M_i^j(2) = \sum_{k=1}^4 M_{ik} M_{kj}$ e $M^3 = M * M^2$ é a matriz cujo elemento genérico é $M_i^j(3) = \sum_{k=1}^4 M_{ik} M_k^j(2)$. Assim, obtemos $\text{tr}(M^3) = \sum_{l=1}^4 M_l^l(3) = M_1^1(3) + M_2^2(3) + M_3^3(3) + M_4^4(3)$. Desenvolvendo, obtemos: $\text{tr}(M^3) = M_{11}(\sum_{k=1}^4 M_{1k} M_{k1}) + M_{12}(\sum_{k=1}^4 M_{2k} M_{k1}) + M_{13}(\sum_{k=1}^4 M_{3k} M_{k1}) + M_{14}(\sum_{k=1}^4 M_{4k} M_{k1}) + M_{21}(\sum_{k=1}^4 M_{1k} M_{k2}) + M_{22}(\sum_{k=1}^4 M_{2k} M_{k2}) + M_{23}(\sum_{k=1}^4 M_{3k} M_{k2}) + M_{24}(\sum_{k=1}^4 M_{4k} M_{k2}) + M_{31}(\sum_{k=1}^4 M_{1k} M_{k3}) + M_{32}(\sum_{k=1}^4 M_{2k} M_{k3}) + M_{33}(\sum_{k=1}^4 M_{3k} M_{k3}) + M_{34}(\sum_{k=1}^4 M_{4k} M_{k3}) + M_{41}(\sum_{k=1}^4 M_{1k} M_{k4}) + M_{42}(\sum_{k=1}^4 M_{2k} M_{k4}) + M_{43}(\sum_{k=1}^4 M_{3k} M_{k4}) + M_{44}(\sum_{k=1}^4 M_{4k} M_{k4})$. Seja $S_1 = M_1^1(3) + M_4^4(3)$. Demonstremos que $S_1 = 0$. Agrupando os termos, vem: $S_1 = M_{11}(M_{11}M_{11} + M_{12}M_{21} + M_{13}M_{31} + M_{14}M_{41}) + M_{12}(M_{21}M_{11} + M_{22}M_{21} + M_{23}M_{31} + M_{24}M_{41}) + M_{13}(M_{31}M_{11} + M_{32}M_{21} + M_{33}M_{31} + M_{34}M_{41}) + M_{14}(M_{41}M_{11} + M_{42}M_{21} + M_{43}M_{31} + M_{44}M_{41}) + M_{42}(M_{21}M_{14} + M_{22}M_{24} + M_{23}M_{34} + M_{24}M_{44}) + M_{43}(M_{31}M_{14} + M_{32}M_{24} + M_{33}M_{34} + M_{34}M_{44}) + M_{44}(M_{41}M_{14} + M_{42}M_{24} + M_{43}M_{34} + M_{44}M_{44})$. Segue da definição de M que $M(i, j) = -M(5 - i, 5 - j)$, para $i, j = 1, \dots, 4$, donde podemos escrever que

$$S_1 = M_{11}(M_{11}M_{11} + M_{12}M_{21} - M_{13}M_{24} - M_{14}M_{14}) + M_{12}(M_{21}M_{11} + M_{22}M_{21} - M_{23}M_{24} - M_{24}M_{14}) + M_{13}(-M_{24}M_{11} - M_{23}M_{21} + M_{22}M_{24} + M_{21}M_{14}) + M_{14}(-M_{14}M_{11} - M_{13}M_{21} + M_{12}M_{24} + M_{11}M_{14}) - M_{11}(M_{11}M_{14} + M_{12}M_{24} - M_{13}M_{21} - M_{14}M_{11}) - M_{13}(M_{21}M_{14} + M_{22}M_{24} - M_{23}M_{21} - M_{24}M_{11}) - M_{12}(-M_{24}M_{14} - M_{23}M_{24} + M_{22}M_{21} + M_{21}M_{11}) - M_{11}(-M_{14}M_{14} - M_{13}M_{24} + M_{12}M_{21} + M_{11}M_{11}).$$

Simplificando os termos, obtemos que $S_1 = 0$. De modo análogo, podemos provar que $S_2 = 0$, onde $S_2 = M_2^2(3) + M_3^3(3)$, donde $\text{tr}(M^3) = 0$. Logo, o polinômio característico da matriz de transporte das aproximações S_N , para $N = 4$, é $p(x) = x^4 + a_2 x^2 + a_0$. Para

$N \geq 6$, a prova é análoga. Uma consequência imediata desta propriedade do polinômio característico da matriz de transporte é que os autovalores da matriz de transporte S_N são simétricos, se forem reais.

3.4 Análise da Aproximação S_N com Multigrupos de Energia

Nos modelos mais realistas utilizados nas aplicações, a influência da energia sobre a seção de choque macroscópica total é bastante importante, e uma das técnicas utilizadas para o tratamento da variável energia é dividir o espectro de energia em grupos, nos quais a seção de choque macroscópica total é considerada constante. A aproximação S_N numa placa homogênea $[0; X]$, com G grupos de energia, sem fonte externa, é escrita como

$$\mu_m \frac{d\psi_{m,g}}{dx} + \sigma_{T,g} \psi_{m,g}(x) = \sum_{g'=1}^G \left[\sum_{l=0}^L \left(\frac{2l+1}{2} \sigma_{s,g',g} P_l(\mu_m) \sum_{n=1}^N P_l(\mu_n) \psi_{n,g'} \omega_n \right) \right] \quad (3.29)$$

onde $\psi_{m,g}(x) = \psi_g(x, \mu_m)$, para $g = 1, 2, \dots, G$ e $m = 1, 2, \dots, N$. Nesta seção, vamos analisar como se comportam os autovalores da matriz de transporte S_N , estudando a aproximação S_N numa placa plana homogênea, com seção de choque diferencial de espalhamento isotrópica e com mais de um grupo energia. Analogamente ao caso monoenergético, as condições de contorno em $\psi_{m,g}(0)$ para $\mu_m > 0$ e $\psi_{m,g}(X)$ para $\mu_m < 0$, são especificadas. Definindo o vetor $\bar{\psi}(x) = [\psi_{11}(x)\psi_{21}(x) \cdots \psi_{N1}(x) \cdots \psi_{1G}(x)\psi_{2G}(x) \cdots \psi_{NG}(x)]^t$, o sistema de equações (3.29) pode ser escrito na forma matricial como

$$\frac{d\bar{\psi}(x)}{dx} = M\bar{\psi}(x) \quad (3.30)$$

onde $M_{GN \times GN}$, também denominada matriz de transporte S_N , é uma matriz composta de G^2 blocos $A_{N \times N}$, onde $A_{g',g}(i, j) = \frac{\sigma_{s,g',g} \omega_j}{2\mu_i} - \frac{\sigma_{T,g} \delta_{ij} \delta_{g'g}}{\mu_i}$. Os autovalores da matriz de transporte S_N dependem dos valores da seção de choque macroscópica total $\sigma_{T,g}$ do grupo g , e de sua relação com os coeficientes $\sigma_{s,g',g}$. Para obter tal relação, a metodologia que utilizamos para analisarmos a dependência dos autovalores em função de $\sigma_{T,g}$ é a mesma utilizada no estudo do problema monoenergético. Nós vamos calcular os autovalores e estabelecer uma relação entre os autovalores de M e as seções de choque macroscópicas dos grupos de energia $g = 1$ e $g = 2$.

3.4.1 Resultados Numéricos para $N = 2$, $G = 2$

Consideremos a aproximação S_2 para o problema numa placa plana finita, com $G = 2$ grupos de energia; denotemos por σ_{Tg} a seção de choque macroscópica total do grupo g , $g = 1, 2$, e $\sigma_{s,g',g}$ os coeficientes da seção de choque diferencial de espalhamento entre os grupos de energia 1 e 2. Neste caso, a matriz M do sistema (3.30) aparece como

$$M = \begin{bmatrix} \frac{\sigma_{s,1,1}\omega_1}{2\mu_1} - \frac{\sigma_{T,1}}{\mu_1} & \frac{\sigma_{s,1,1}\omega_2}{2\mu_1} & \frac{\sigma_{s,2,1}\omega_1}{2\mu_1} & \frac{\sigma_{s,2,1}\omega_2}{2\mu_1} \\ \frac{\sigma_{s,1,1}\omega_1}{2\mu_2} & \frac{\sigma_{s,1,1}\omega_2}{2\mu_2} - \frac{\sigma_{T,1}}{\mu_2} & \frac{\sigma_{s,2,1}\omega_1}{2\mu_2} & \frac{\sigma_{s,2,1}\omega_2}{2\mu_2} \\ \frac{\sigma_{s,1,2}\omega_1}{2\mu_1} & \frac{\sigma_{s,1,2}\omega_2}{2\mu_1} & \frac{\sigma_{s,2,2}\omega_1}{2\mu_1} - \frac{\sigma_{T,2}}{\mu_1} & \frac{\sigma_{s,2,2}\omega_2}{2\mu_1} \\ \frac{\sigma_{s,1,2}\omega_1}{2\mu_2} & \frac{\sigma_{s,1,2}\omega_2}{2\mu_2} & \frac{\sigma_{s,2,2}\omega_1}{2\mu_2} & \frac{\sigma_{s,2,2}\omega_2}{2\mu_2} - \frac{\sigma_{T,2}}{\mu_2} \end{bmatrix}. \quad (3.31)$$

Então, o polinômio característico da matriz de transporte S_2 é

$$p(x) = x^4 + a_2x^2 + a_0, \quad (3.32)$$

onde os coeficientes são:

a) $a_2 = 3\sigma_{T1}(\sigma_{s,1,1} - \sigma_{T1}) + 3\sigma_{T2}(3\sigma_{s,2,2} - \sigma_{T2})$,

b) $a_0 = 9\sigma_{T1}\sigma_{T2}(\sigma_{T1}\sigma_{T2} + \sigma_{s,1,1}\sigma_{s,2,2} - \sigma_{s,1,2}\sigma_{s,2,1} - \sigma_{T2}\sigma_{s,1,1} - \sigma_{T1}\sigma_{s,2,2})$.

Podemos ver na tabela (3.10) que podem ocorrer somente autovalores reais, bem como autovalores imaginários puros, dependendo dos dados de cada problema. Analisando os resultados obtidos, nós concluímos que:

a) se $\sigma_{T1} > \sigma_{s,1,1} + \sigma_{s,1,2}$ e $\sigma_{T2} > \sigma_{s,2,1} + \sigma_{s,2,2}$, então M tem autovalores reais.

b) se $\sigma_{T1} < \sigma_{s,1,1} + \sigma_{s,1,2}$ e $\sigma_{T2} < \sigma_{s,2,1} + \sigma_{s,2,2}$, então M tem autovalores imaginários puros.

Devemos enfatizar que esta é uma hipótese que foi verificada *numericamente*, e ainda não demonstrada analiticamente. Vamos estudar na próxima seção o caso com $N = 4$ e $G = 2$.

Tabela 3.10 – Autovalores da matriz de transporte S_2 , $G = 2$.

Dados	$\lambda_{1,2}$	$\lambda_{3,4}$
$\sigma_{T1} = 1.000; \sigma_{T2} = 1.000; \sigma_{s,1,1} = 0.99; \sigma_{s,1,2} = 0.005; \sigma_{s,2,1} = 0.008; \sigma_{s,2,2} = 0.98$	± 0.263034	± 0.144268
$\sigma_{T1} = 0.950; \sigma_{T2} = 1.000; \sigma_{s,1,1} = 0.99; \sigma_{s,1,2} = 0.005; \sigma_{s,2,1} = 0.008; \sigma_{s,2,2} = 0.98$	± 0.248885	$\pm 0.340505I$
$\sigma_{T1} = 0.950; \sigma_{T2} = 1.000; \sigma_{s,1,1} = 0.94; \sigma_{s,1,2} = 0.005; \sigma_{s,2,1} = 0.008; \sigma_{s,2,2} = 0.98$	± 0.261804	± 0.141276
$\sigma_{T1} = 0.950; \sigma_{T2} = 0.950; \sigma_{s,1,1} = 0.99; \sigma_{s,1,2} = 0.005; \sigma_{s,2,1} = 0.008; \sigma_{s,2,2} = 0.98$	$\pm 0.350325I$	$\pm 0.277079I$
$\sigma_{T1} = 1.000; \sigma_{T2} = 0.982; \sigma_{s,1,1} = 0.98; \sigma_{s,1,2} = 0.008; \sigma_{s,2,1} = 0.008; \sigma_{s,2,2} = 0.98$	± 0.262617	$\pm 0.554575E - 1I$
$\sigma_{T1} = 0.994; \sigma_{T2} = 1.000; \sigma_{s,1,1} = 0.99; \sigma_{s,1,2} = 0.005; \sigma_{s,2,1} = 0.008; \sigma_{s,2,2} = 0.98$	± 0.257975	$\pm 0.733275E - 1$
$\sigma_{T1} = 0.994; \sigma_{T2} = 0.986; \sigma_{s,1,1} = 0.99; \sigma_{s,1,2} = 0.005; \sigma_{s,2,1} = 0.008; \sigma_{s,2,2} = 0.98$	± 0.183972	$\pm 0.645744E - 1I$
$\sigma_{T1} = 0.994; \sigma_{T2} = 0.987; \sigma_{s,1,1} = 0.99; \sigma_{s,1,2} = 0.005; \sigma_{s,2,1} = 0.008; \sigma_{s,2,2} = 0.98$	± 0.188756	$\pm 0.545334E - 1I$
$\sigma_{T1} = 0.994; \sigma_{T2} = 0.988; \sigma_{s,1,1} = 0.99; \sigma_{s,1,2} = 0.005; \sigma_{s,2,1} = 0.008; \sigma_{s,2,2} = 0.98$	± 0.193712	$\pm 0.434092E - 1I$
$\sigma_{T1} = 0.994; \sigma_{T2} = 0.989; \sigma_{s,1,1} = 0.99; \sigma_{s,1,2} = 0.005; \sigma_{s,2,1} = 0.008; \sigma_{s,2,2} = 0.98$	± 0.198812	$\pm 0.299226E - 1I$
$\sigma_{T1} = 0.994; \sigma_{T2} = 0.990; \sigma_{s,1,1} = 0.99; \sigma_{s,1,2} = 0.005; \sigma_{s,2,1} = 0.008; \sigma_{s,2,2} = 0.98$	± 0.204029	$\pm 0.379907E - 7I$
$\sigma_{T1} = 0.996; \sigma_{T2} = 0.990; \sigma_{s,1,1} = 0.99; \sigma_{s,1,2} = 0.005; \sigma_{s,2,1} = 0.008; \sigma_{s,2,2} = 0.98$	± 0.208693	$\pm 0.638375E - 1$

3.4.2 Resultados Numéricos para $N = 4$, $G = 2$

Para $N = 4$ e $G = 2$, o polinômio característico da matriz de transporte é

$$p(x) = x^8 + a_6x^6 + a_4x^4 + a_2x^2 + a_0, \quad (3.33)$$

onde:

- $a_6 = 6.11111111(\sigma_{T1}\sigma_{s,1,1} + \sigma_{T2}\sigma_{s,2,2}) - 10(\sigma_{T1}^2 + \sigma_{T2}^2);$
- $a_4 = 11.66666667(\sigma_{T1}^4 - \sigma_{T1}^3\sigma_{s,1,1} - \sigma_{T2}^3\sigma_{s,2,2} + \sigma_{T2}^4) + 37.3456790(\sigma_{T1}\sigma_{T2}\sigma_{s,1,1}\sigma_{s,2,2} - \sigma_{T1}\sigma_{T2}\sigma_{s,1,2}\sigma_{s,2,1}) - 61.11111111(\sigma_{T1}^2\sigma_{T2}\sigma_{s,2,2} + \sigma_{T1}\sigma_{T2}^2\sigma_{s,1,1}) + 100(\sigma_{T1}^2\sigma_{T2}^2);$
- $a_2 = 116.6666667\sigma_{T1}^2\sigma_{T2}^2(-\sigma_{T2}^2 + \sigma_{T1}\sigma_{s,1,1} - \sigma_{T1}^2 + \sigma_{T2}\sigma_{s,2,2}) + 71.2962963\sigma_{T1}\sigma_{T2}((\sigma_{T1}^3 - \sigma_{T1}^2\sigma_{s,1,1})\sigma_{s,2,2} + (\sigma_{T2}^3 - \sigma_{T2}^2\sigma_{s,2,2})\sigma_{s,1,1} + (\sigma_{T1}^2 + \sigma_{T2}^2)\sigma_{s,1,2}\sigma_{s,2,1});$
- $a_0 = 136.1111111\sigma_{T1}^3\sigma_{T2}^3(\sigma_{T1}\sigma_{T2} - \sigma_{T2}\sigma_{s,1,1} + \sigma_{s,1,1}\sigma_{s,2,2} - \sigma_{T1}\sigma_{s,2,2} - \sigma_{s,1,2}\sigma_{s,2,1}).$

Assim, vemos que $a_6 < 0$ para todo σ_{Tg} . Pela simetria do polinômio característico, M terá no máximo quatro raízes reais positivas e quatro negativas. Por outro lado, se dois destes coeficientes sucessivos (digamos a_2 e a_4) forem de mesmo sinal, então M terá autovalores complexos. Vamos ilustrar o cálculo dos autovalores de três exemplos, que serão

chamados de exemplos 1, 2 e 3, respectivamente. Inicialmente, consideremos os dados de cada exemplo:

Dados do exemplo 1: $\sigma_{T1} = 1$, $\sigma_{T2} = 1$; $\sigma_{s,1,1} = 0.99$, $\sigma_{s,1,2} = 0.005$; $\sigma_{s,2,2} = 0.98$, $\sigma_{s,2,1} = 0.008$. Com estes dados, os coeficientes do polinômio característico são: $a_0 = 0.217778E - 1$, $a_2 = -1.383926$, $a_4 = 16.192395$, $a_6 = -7.961111$ e $a_8 = 1$.

Dados do exemplo 2: $\sigma_{T1} = 0.95$, $\sigma_{T2} = 1$; $\sigma_{s,1,1} = 0.99$, $\sigma_{s,1,2} = 0.005$; $\sigma_{s,2,2} = 0.98$, $\sigma_{s,2,1} = 0.008$. Com estes dados, os coeficientes do polinômio característico são: $a_0 = -0.980266E - 1$, $a_2 = 0.845283$, $a_4 = 12.978223$, $a_6 = -7.288611$ e $a_8 = 1$.

Dados do exemplo 3: $\sigma_{T1} = 0.95$, $\sigma_{T2} = 0.95$; $\sigma_{s,1,1} = 0.99$, $\sigma_{s,1,2} = 0.005$; $\sigma_{s,2,2} = 0.98$, $\sigma_{s,2,1} = 0.008$. Com estes dados, os coeficientes do polinômio característico são: $a_0 = 0.116063$, $a_2 = 2.322746$, $a_4 = 10.230746$, $a_6 = -6.613056$ e $a_8 = 1$.

Os autovalores correspondentes a estes exemplos estão tabelados abaixo.

Tabela 3.11 – Autovalores da matriz de transporte S_4 , $G = 2$, dos exemplos 1, 2 e 3.

i	Exemplo 1	Exemplo 2	Exemplo 3
1, 2	± 1.990456	± 1.988166	± 1.852525
3, 4	± 1.977521	± 1.842498	± 1.840353
5, 6	± 0.260598	$\pm 0.346283I$	$\pm 0.356620I$
7, 8	± 0.143867	± 0.246820	$\pm 0.280205I$

Na tabela (3.11), a coluna à esquerda indica os índices dos pares de autovalores, pois eles são simétricos quando reais e aos pares conjugados, se forem complexos. Vemos que no exemplo 1, a matriz M tem 8 autovalores reais; no exemplo 2, a matriz M tem 2 autovalores imaginários puros e no exemplo 3, M tem 4 autovalores imaginários puros e os demais reais. De acordo com a tabela (3.11) e o estudo dos coeficientes do polinômio

característico de M , podemos afirmar que:

- a) se $\sigma_{T1} < \sigma_{s,1,1} + \sigma_{s,1,2}$ e $\sigma_{T2} < \sigma_{s,2,1} + \sigma_{s,2,2}$, então M tem no mínimo dois e no máximo quatro autovalores imaginários puros e os demais são autovalores reais;
- b) se $\sigma_{T1} > \sigma_{s,1,1} + \sigma_{s,1,2}$ e $\sigma_{T2} > \sigma_{s,2,1} + \sigma_{s,2,2}$, então todos os 8 autovalores de M são reais.

Isto é, existem pontos de bifurcação, a saber as somas $\sigma_{s,1,1} + \sigma_{s,1,2}$ e $\sigma_{s,2,1} + \sigma_{s,2,2}$. Diferentemente dos resultados da seção anterior, nós devemos aqui considerar as duas seções σ_{T1} e σ_{T2} como parâmetros de controle. Ressaltamos que estas conclusões seguem de resultados numéricos, e ainda carecem de uma demonstração analítica. Vamos analisar na próxima seção o caso com $N = 8$.

3.4.3 Resultados Numéricos para $N = 8$, $G = 2$

Para $N = 8$ e $G = 2$, vamos comparar nossos resultados, calculando os autovalores de M , usando como dados os valores das seções encontrados no trabalho de [Barros, 1990], ver tabela (3.12). Neste trabalho, o autor supõe uma solução análoga à de Case, usando o método de "separação de variáveis", isto é, uma solução da forma $\underline{\psi}(x) = \underline{a}(\nu) \exp(x/\nu)$, levando a uma equação característica cujas raízes são os autovalores ($\frac{1}{\nu}$). Como caso particular, estão tabelados os autovalores para um problema com 2 grupos de energia, ordem de quadratura $N = 8$, que nós consideramos como valores de referência. Devemos observar que os autovalores obtidos por nós são os inversos multiplicativos dos valores de referência. Nós verificamos que os resultados são praticamente iguais, como podemos ver na tabela (3.13). Depois, calculamos os autovalores mantendo os valores das seções de espalhamento dos dois grupos de energia e tomando valores variáveis de σ_{T1} e σ_{T2} .

Tabela 3.12 – Dados para o problema de referência, $N = 8$, $G = 2$.

$\sigma_{T,g}$	$\sigma_{s,g',g}$
$\sigma_{T,1} = 1$	$\sigma_{s,1,1} = 0.990$ $\sigma_{s,2,1} = 0.005$
$\sigma_{T,2} = 1$	$\sigma_{s,1,2} = 0.008$ $\sigma_{s,2,2} = 0.980$

Tabela 3.13 – Comparação com autovalores de referência, com $N = 8$ e $G = 2$.

Autovalores		Autovalores de Referência	
± 4.480263	± 4.464748	± 0.223000	± 0.224000
± 1.597001	± 1.593332	± 0.626000	± 0.628000
± 1.104363	± 1.103531	± 0.905000	± 0.906000
± 0.260598	± 0.143867	± 3.837000	± 6.951000

Como na seção anterior,[§] calculamos os autovalores de M para os três exemplos 1, 2 e 3, com os dados abaixo.

Tabela 3.14 – Dados dos exemplos 1, 2 e 3, com $N = 8$ e $G = 2$.

Dados	Exemplo 1	Exemplo 2	Exemplo 3
σ_{T1}	1.000	0.950	0.950
σ_{T2}	1.000	1.000	0.950
$\sigma_{s,1,1}$	0.990	0.990	0.990
$\sigma_{s,1,2}$	0.005	0.005	0.005
$\sigma_{s,2,1}$	0.008	0.008	0.008
$\sigma_{s,2,2}$	0.980	0.980	0.980

Os resultados obtidos estão tabelados abaixo:

[§]Na tabela (3.13) os autovalores são os inversos dos autovalores de referência.

Tabela 3.15 – Autovalores da matriz de transporte S_g dos exemplos 1, 2 e 3, $G = 2$.

i	Exemplo 1	Exemplo 2	Exemplo 3
1, 2	± 4.480263	± 4.477447	± 4.209398
3, 4	± 4.464748	± 4.196819	± 4.194031
5, 6	± 1.597001	± 1.596324	± 1.506307
7, 8	± 1.593332	± 1.503526	± 1.502899
9, 10	± 1.104363	± 1.104206	± 1.046748
11, 12	± 1.103531	± 1.046166	± 1.046031
13, 14	± 0.260598	$\pm 0.346289I$	$\pm 0.356628I$
15, 16	± 0.143867	± 0.246820	$\pm 0.280206I$

Na tabela (3.15), a primeira coluna é o índice do autovalor, na coluna 2 vemos os autovalores do exemplo 1, na terceira coluna os autovalores do exemplo 2 e na quarta coluna os autovalores do exemplo 3. Podemos verificar que os pontos $\sigma_{s,1,1} + \sigma_{s,1,2}$ e $\sigma_{s,2,1} + \sigma_{s,2,2}$ são pontos de bifurcação. De fato, no exemplo 1 ocorrem somente autovalores reais, no exemplo 2 ocorrem dois autovalores imaginários puros, enquanto no exemplo 3 ocorrem quatro autovalores imaginários puros. Nós calculamos os autovalores da matriz de transporte S_N para outros valores das seções de choque de espalhamento e diferentes ordens de quadratura. Verificamos que o número de autovalores imaginários puros é no máximo igual a 4 e que a conclusão a que chegamos independe dos valores numéricos de $\sigma_{T,g}$ e sim de suas relações com os valores de $\sigma_{s,g',g}$. Além disso, como ilustra a tabela (3.15), os autovalores são simétricos, se forem reais, ou pares conjugados de autovalores imaginários puros. Nós chegamos à seguinte conclusão sobre a influência das seções de choque nos autovalores:

- a) se $\sigma_{s,1,2} < \sigma_{T1} < \sigma_{s,1,1} + \sigma_{s,1,2}$ ou $\sigma_{s,2,1} < \sigma_{T2} < \sigma_{s,2,2} + \sigma_{s,2,1}$, então M tem no mínimo 2 e no máximo 4 autovalores imaginários puros.
- b) se $\sigma_{T1} > \sigma_{s,1,1} + \sigma_{s,1,2}$ e $\sigma_{T2} > \sigma_{s,2,1} + \sigma_{s,2,2}$, então todos os autovalores de M são reais.

Dos resultados obtidos para ordem de quadratura $N \leq 8$, podemos afirmar que os valores de $\sigma_{s,1,1} + \sigma_{s,1,2}$ e $\sigma_{s,2,1} + \sigma_{s,2,2}$ são pontos de bifurcação, porém estes resultados não foram demonstrados analiticamente. Esta relação foi ilustrada *numericamente* tendo sido resolvidos alguns exemplos com coeficientes iguais aos de problemas encontrados na literatura para comparação e validação de nossos resultados. Nós verificamos que a nossa hipótese acima enunciada é válida também para ordens de quadratura mais elevadas ($N \leq 32$) e para outros valores dos coeficientes $\sigma_{s,g',g}$, porém, não encontramos valores de referência para comparação.

O PROBLEMA DE TRANSFERÊNCIA RADIATIVA COM CALOR CONDUTIVO ACOPLADO

4.1 Introdução

Neste capítulo, vamos considerar a análise da influência do parâmetro N_c , relativo ao efeito de dominância no problema de condução-radiação, na solução de um problema estacionário, não-linear, de transferência radiativa acoplada com calor condutivo numa placa plana, que será denominado problema condutivo-radiativo. Nos últimos anos, muitos trabalhos tem se dedicado à solução deste problema. Em [Benassi *et al.*, 1983], é utilizado o método P_N para resolver o problema de transferência radiativa numa placa plana e condições de contorno com reflexão especular e difusa, supondo a distribuição de temperatura no meio constante com espalhamento anisotrópico ($L = 9$) e com quadratura de ordem $N \leq 99$. Em [Siewert e Thomas, 1991], o método P_N , juntamente com splines cúbicas, é utilizado para resolver uma classe de problemas acoplados de transferência radiativa com condução de calor numa placa plana, em que a função de espalhamento tem alto grau de anisotropia ($L = 299$) e com condições de contorno com reflexão especular e difusa, mas apresentava soluções divergentes em problemas para valores crescentes da espessura da placa. Em [Siewert, 1995], os autores apresentam um método computacionalmente mais eficiente para solução de alguns problemas para os quais o método apresentado em 1991 não apresentava bons resultados, em particular quando o valor do parâmetro N_c era da ordem de 10^{-4} e com espessuras maiores do que a unidade. Recentemente, com o uso do método da decomposição de Adomian combinado com o método \mathcal{LTS}_N , [Vargas, 1998] obteve resultados semelhantes aos de [Siewert e Thomas, 1991], para $N_c = 0.05$. Neste trabalho, utilizamos o código de Vargas para testar a influência

do parâmetro N_c desde 0.05 até 0.001, em quatro problemas referenciais, considerados por [Siewert e Thomas, 1991]. Foi observado que o primeiro problema, sem reflexão e com temperatura nula num extremo da placa, foi o mais sensível à variação do N_c , e que o quarto problema, com reflexão e temperatura não-nula, apresentou resultados até $N_c = 0.04$.

A abordagem teórica do problema condutivo-radiativo vem sendo investigada ao longo dos últimos anos. Em particular, no trabalho de [Kelley, 1996], é demonstrada a existência e unicidade da solução para o problema condutivo-radiativo numa placa plana $[0, X]$, com espalhamento isotrópico e condições de contorno de Dirichlet. Este resultado foi generalizado no trabalho de [Vilhena *et al.*, 2002], para o problema condutivo-radiativo, em que as condições de contorno incluem reflexão especular e difusa, e espalhamento anisotrópico. Na próxima seção, vamos escrever as equações que modelam o problema de condutivo-radiativo.

4.2 Efeito de Dominância no Problema Condutivo-Radiativo

O problema de transferência radiativa acoplado com condução de calor é modelado pela equação [Siewert e Thomas, 1991]:

$$\mu \frac{\partial I(x, \mu)}{\partial x} + I(x, \mu) = \frac{\varpi}{2} \sum_{l=0}^L \beta_l P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I(x, \mu') d\mu' + (1 - \varpi) \frac{\sigma n^2}{\pi} T^4(x), \quad (4.1)$$

para $x \in [0, X]$, $\mu \in [-1; 1]$, e com condições de contorno com reflexão especular e difusa definidas pela equações:

$$I(0, \mu) = \varepsilon_1 \frac{\sigma n^2}{\pi} T_1^4 + \rho_1^s I(0, -\mu) + 2\rho_1^d \int_0^1 I(0, -\mu') \mu' d\mu', \quad (4.1a)$$

$$I(X, -\mu) = \varepsilon_2 \frac{\sigma n^2}{\pi} T_2^4 + \rho_2^s I(X, \mu) + 2\rho_2^d \int_0^1 I(X, \mu') \mu' d\mu', \quad (4.1b)$$

para $\mu \in [0; 1]$. Aqui, $x \in [0, X]$ é a variável óptica, μ é o cosseno diretor do ângulo de espalhamento medido no semi-eixo positivo x e ϖ é o albedo para espalhamento simples, n é o índice de refração e $\sigma = 5.6697 * 10^{-8} \text{ Wm}^{-2} \text{ K}^{-4}$ é a constante de Stefan-Boltzmann. Para as condições de contorno, temos $\rho_i^r \geq 0$, para $i = 1, 2$ e $r = s$ ou d que são os

coeficientes de reflexão especular e difusa e $\varepsilon_i = 1 - \rho_i^s - \rho_i^d$, $\varepsilon_i \geq 0$ para $i = 1, 2$ são as emissividades para as duas superfícies. Os coeficientes β_l da função de espalhamento dependem do problema e, em alguns casos, são obtidos por fórmulas de recorrência, ver [Siewert, 1995].

A temperatura $T(x)$ deve satisfazer a equação da energia

$$k\beta \frac{d^2 T(x)}{dx^2} = \frac{dq_r(x)}{dx}, \quad (4.2)$$

onde k é a condutividade térmica e β é o coeficiente de extinção, sujeita às condições de contorno

$$T(0) = T_1, \quad (4.2a)$$

$$T(X) = T_2. \quad (4.2b)$$

A função $q_r(x)$ é o fluxo radiativo, expresso pela integral

$$q_r(x) = 2\pi \int_{-1}^{+1} I(x, \mu') \mu' d\mu'. \quad (4.3)$$

Seguindo a tradição na literatura, este problema é normalizado, considerando-se uma temperatura de referência T_r , e usando-se as seguintes definições:

$$I(x, \mu) = \frac{\sigma n^2 T_r^4}{\pi} I^*(x, \mu), \quad (4.4)$$

$$q_r(x) = \frac{\sigma n^2 T_r^4}{\pi} q^*(x), \quad (4.5)$$

$$T(x) = T_r \theta(x). \quad (4.6)$$

O problema normalizado fica então

$$\mu \frac{\partial I^*(x, \mu)}{\partial x} + I^*(x, \mu) = \frac{\varpi}{2} \sum_{l=0}^L \beta_l P_l(\mu) \int_{-1}^{+1} P_l(\mu') I^*(x, \mu') d\mu' + (1 - \varpi) \theta^4(x), \quad (4.7)$$

para $x \in [0; X]$ e $\mu \in [-1; 1]$, com condições de contorno na forma

$$I^*(0, \mu) = \varepsilon_1 \theta_1^4 + \rho_1^s I^*(0, -\mu) + 2\rho_1^d \int_0^1 I^*(0, -\mu') \mu' d\mu', \quad (4.7a)$$

$$I^*(X, -\mu) = \varepsilon_2 \theta_2^4 + \rho_2^s I^*(X, \mu) + 2\rho_2^d \int_0^1 I^*(X, \mu') \mu' d\mu'. \quad (4.7b)$$

A equação para a temperatura é escrita como

$$\frac{d^2\theta(x)}{dx^2} = \frac{1}{4\pi N_c} \frac{dq_r^*(x)}{dx}, \quad (4.8)$$

onde $N_c = \frac{k\beta}{4\sigma n^2 T_r^3}$ é o parâmetro de condução-radiação. As condições de contorno para a equação da energia (4.8) são:

$$\theta(0) = \theta_1 = \frac{T_1}{T_r} \quad (4.8a)$$

$$\theta(X) = \theta_2 = \frac{T_2}{T_r}. \quad (4.8b)$$

e a função $q_r^*(x)$ é definida pela integral

$$q_r^*(x) = 2\pi \int_{-1}^{+1} I^*(x, \mu') \mu' d\mu'. \quad (4.9)$$

Observemos que se invertermos a ordem de integração em (4.8), obtemos :

$$\frac{d^2\theta(x)}{dx^2} = \frac{1}{2N_c} Q(x), \quad (4.10)$$

onde $Q(x) = 2(1 - \varpi)\theta^4(x) + \varpi g(x) - 2\phi(x)$, com $\phi(x) = \frac{1}{2} \int_{-1}^{+1} I^*(x, \mu') d\mu'$ e a função $g(x) = \sum_{l=0}^L \beta_l P_l(\mu) \int_{-1}^{+1} P_l(\mu') I^*(x, \mu') d\mu'$. Em particular, no caso isotrópico, podemos escrever $Q(x) = \frac{(1-\varpi)}{N_c} (\theta^4(x) - \phi(x))$. Em relação a estas equações para a intensidade $I^*(x, \mu)$ e o calor radiativo $q_r^*(x)$, é importante observar que este problema é não-linear devido ao termo de temperatura na Eq.(4.7). A vantagem da normalização da Eq.(4.1) é a definição do parâmetro N_c , além da simplificação do termo da temperatura (para tanto, basta comparar as Eqs. (4.1) e (4.7)) e das condições de contorno, conforme mostram as Eqs. (4.1a) e (4.1b) quando comparadas com as Eqs. (4.7a) e (4.7b). O parâmetro N_c

nos dá uma informação a respeito da influência da condução e radiação [Özsisik, 1973]:

- a) se N_c está próximo de zero, o fluxo radiativo é dominante;
- b) um valor maior de N_c significa que o fluxo condutivo é dominante.

Para ilustrar esta relação, mostramos na tabela (4.1) a solução de problemas com valores diferentes do parâmetro de condução-radiação, onde vemos que à medida que N_c aumenta, diminui o fluxo radiativo e aumenta o fluxo condutivo. Nesta tabela, as frações Q_r/Q e Q_c/Q representam o fluxo radiativo(Q_r) e o fluxo condutivo(Q_c) dividido pelo fluxo total(Q), respectivamente. Os dados dos coeficientes utilizados em todos os problemas foram $\rho_1^d = \rho_2^d = 0$, $\rho_s^1 = \rho_s^2 = 0$, $\varepsilon_1 = \varepsilon_2 = 1$, $\varpi = 0.9$. A temperatura satisfaz as condições de contorno $\theta_0 = 1$ e $\theta_1 = 0$, a ordem da quadratura é $N = 20$.

Tabela 4.1 – Influência de N_c no problema condutivo-radiativo.

Posição na placa	$x = 0$	$x = 0$	$x = 1$	$x = 1$
N_c	Q_r/Q (em %)	Q_c/Q (em %)	Q_r/Q (em %)	Q_c/Q (em %)
0.02	93.92	6.08	78.28	21.72
0.03	88.44	11.56	73.31	26.69
0.04	83.52	16.48	69.23	30.77
0.05	79.10	20.90	65.27	34.73
0.028	89.49	10.51	74.18	25.82
0.032	87.41	12.59	72.46	27.54
0.036	85.42	14.58	70.81	29.19
0.046	80.82	19.18	67.00	33.00
0.048	79.96	20.04	66.28	33.72
0.050	79.12	20.88	65.58	34.42

Por exemplo, vemos que na fronteira $x = 0$, a porcentagem de fluxo radiativo no fluxo total diminui de 93.92% para 79.10%, enquanto o fluxo condutivo aumenta de 6.08% para 20.90% quando o parâmetro N_c cresce de 0.02 a 0.05. A variação do fluxo

radiativo é maior na fronteira $x = 0$, devido á condição de contorno na temperatura, pois $\theta_0 = \theta(0) = 1$, enquanto que $\theta_1 = \theta(1) = 0$. A solução deste problema foi obtida através do método da decomposição combinado com o método \mathcal{LTS}_N , desenvolvido no trabalho de [Vargas, 1998], o qual será sintetizado aqui.

4.3 O Método de Decomposição

A modelagem S_N aplicada à Eq.(4.7) resulta no conjunto de equações

$$\mu_k \frac{dI_k^*(x)}{dx} + I_k^*(x) = \frac{\varpi}{2} \sum_{l=0}^L \beta_l P_{lk} \sum_{i=1}^N \omega_i P_{li} I_i^*(x) + (1 - \varpi)\theta^4(x), \quad (4.11)$$

para $k = 1, \dots, N$, $P_{lk} = P_l(\mu_k)$ e N par. As condições de contorno ficam

$$I_i^*(0) = \varepsilon_1 \theta_1^4 + \rho_1^s I_{N-i+1}^*(0) + 2\rho_1^d \sum_{j=1}^{N/2} \omega_j \mu_j I_{N-j+1}^*(0), \quad (4.11a)$$

$$I_{N-i+1}^*(x) = \varepsilon_2 \theta_2^4 + \rho_2^s I_i^*(0) + 2\rho_2^d \sum_{j=1}^{N/2} \omega_j \mu_j I_j^*(X), \quad (4.11b)$$

para $i = 1, \dots, N/2$. A equação (4.11) pode ser escrita na forma

$$\frac{dI_k^*(x)}{dx} + \frac{1}{\mu_k} \sum_{l=1}^N (\delta_{kl} - \frac{\varpi}{2} \sum_{l=0}^L \beta_l P_{lk} \omega_i P_{li}) I_i^*(x) = \frac{1 - \varpi}{\mu_k} \theta^4(x). \quad (4.12)$$

Na forma matricial, esta equação pode ser escrita como

$$\frac{d\tilde{I}^*(x)}{dx} + \tilde{O}\tilde{I}^*(x) = \tilde{D}\theta^4(x), \quad (4.13)$$

onde $\tilde{I}^*(x) = [I_1^*(x) \ I_2^*(x) \ \dots \ I_N(x)^*]^t$ é o vetor incógnita, $\tilde{O} = (O_{ik})_{N \times N}$, cujo termo genérico é $O_{ik} = \frac{1}{\mu_k} \sum_{i=1}^{i=N} (\delta_{ki} - \frac{\varpi}{2} \sum_{l=0}^{l=L} \beta_l P_{lk} \omega_i P_{li})$ e $\tilde{D} = [\frac{1-\varpi}{\mu_1} \ \frac{1-\varpi}{\mu_2} \ \dots \ \frac{1-\varpi}{\mu_N}]^t$. Para aplicar o método de decomposição de Adomian, suponhamos que o termo não-linear possa ser representado numa série de funções especiais $A_n(x)$ a serem determinadas, da forma

$$\theta^4(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} A_n(x). \quad (4.14)$$

Substituindo esta expressão na equação (4.13), resulta o seguinte sistema de equações diferenciais :

$$\frac{d\tilde{I}^*(x)}{dx} + \tilde{O}\tilde{I}^*(x) = \tilde{D} \sum_{n=0}^{+\infty} A_n(x). \quad (4.15)$$

A solução desta equação é a combinação linear da solução do sistema de equações homogêneas

$$\frac{d\tilde{I}^*(x)}{dx} + \tilde{O}\tilde{I}^*(x) = 0, \quad (4.16)$$

a qual pode ser obtida pelo método \mathcal{LTS}_N , como visto em [Vilhena e Barichello, 1991] e escrita na forma

$$\tilde{I}_h^*(x) = \sum_{k=1}^N \tilde{P}_k \tilde{F} e^{s_k x}, \quad (4.17)$$

com uma solução particular da forma

$$\tilde{I}_p^*(x) = \sum_{k=1}^N \tilde{P}_k \tilde{D} e^{s_k x} \otimes \sum_{n=0}^{+\infty} A_n(x), \quad (4.18)$$

onde \otimes denota a convolução, ou seja, $\tilde{I}^*(x) = \tilde{I}_h^*(x) + \tilde{I}_p^*(x)$. Supondo agora que a intensidade de radiação $\tilde{I}^*(x)$ possa ser representada numa série da forma

$$\tilde{I}^*(x) = \sum_{n=0}^{+\infty} \tilde{u}_n(x), \quad (4.19)$$

onde cada matriz $\tilde{u}_n(x)$ é uma matriz-coluna com N componentes u_{ni} , para $i = 1, \dots, N$, que serão determinados através de fórmulas de recorrência, ver [Vargas, 1998], nós podemos determinar completamente a solução do problema. Deste modo, após a determinação dos componentes da série, foi feita a implementação computacional com um programa em *Fortran 90*. Neste programa, a série da intensidade de radiação é desenvolvida com dois termos ($\tilde{u}_0(x)$ e $\tilde{u}_1(x)$) e para a temperatura são utilizados três termos ($A_0(x), A_1(x), A_2(x)$). Os valores dos coeficientes da função de espalhamento foram os mesmos utilizados na Ref. [Benassi *et al.*, 1983]. Nós mostramos na tabela (4.2) os dados utilizados na solução de vários problemas com o parâmetro N_c decrescendo da ordem 10^{-2} até 10^{-3} . Para ilustrar o problema que ocorre na implementação do método, mostramos

na tabela (4.3) apenas o fluxo condutivo na posição $x = 0$; como nós só podemos rodar este programa com uma ordem de quadratura $N \leq 20$ devido a uma limitação do computador utilizado para o cálculo, nós apresentamos os resultados obtidos com o valor de $N = 20$. As grandezas calculadas foram o fluxo condutivo definido por

$$Q_c(x) = -\frac{d}{dx}\theta(x), \quad (4.20)$$

o fluxo radiativo definido por

$$Q_r(x) = \frac{1}{4\pi N_c} q_r^*(x), \quad (4.21)$$

onde q_r^* está definido na equação (4.5) e o fluxo total definido por

$$Q(x) = Q_c(x) + Q_r(x). \quad (4.22)$$

Tabela 4.2 – Dados físicos dos problemas.

Problema	ε_1	ε_2	ρ_1^s	ρ_2^s	ρ_1^d	ρ_2^d	θ_1	θ_2	ϖ
1	1.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.0	0.90
2	1.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.5	0.90
3	1.0	1.0	0.0	0.0	0.0	0.0	1.0	0.5	0.95
4	0.6	0.4	0.1	0.2	0.3	0.4	1.0	0.5	0.95

A tabela (4.2) apresenta os dados físicos dos quatro problemas utilizados em nossos testes com o objetivo de determinarmos para quais valores de N_c nós podemos obter resultados com o código utilizado no trabalho de [Vargas, 1998]. Por exemplo, no problema 1, temos $\varepsilon_1 = 1$, $\varepsilon_2 = 1$, $\rho_1^s = 0$, $\rho_2^s = 0$, $\rho_1^d = 0$, $\rho_2^d = 0$, $\theta_1 = 1$, $\theta_2 = 0$ e $\varpi = 0.90$. Para cada um destes problemas, nós calculamos o fluxo condutivo em $x = 0$ com valores variáveis do parâmetro N_c , cujos resultados estão apresentados na tabela (4.3).

Tabela 4.3 – Fluxo condutivo, em $x = 0$, $N = 20$, $L = 0$.

N_c	Problema 1	Problema 2	Problema 3	Problema 4
0.05	0.791845	0.469610	0.481879	0.463067
0.02	0.483433	0.424347	0.454243	0.408122
0.01	-0.484848E-1	0.347176	0.409235	0.314671
0.008	-0.312714	0.301567	0.387283	0.276321
0.006	-0.750946	0.222122	0.350044	0.190754
0.004	-1.677460	0.923157E-1	0.275444	0.503960E-1
0.002	-4.503845	-0.343445	0.736847E-1	-0.383926
0.001	-10.776860	-1.450623	-0.361130	-1.108734

Na tabela (4.3), vemos que o código apresenta resultados para o problema 1, para valores de N_c da ordem de 10^{-2} , enquanto para os problemas 2, 3 e 4 apresenta resultados para valores de N_c da ordem de 10^{-3} . Abaixo, apresentamos uma tabela comparativa com valor do fluxo condutivo em $x = 0$, nos quatro problemas cujos dados físicos estão na tabela (4.2).

Tabela 4.4 – Comparação da solução dos problemas, $N_c = 0.05$.

Solução	Problema 1	Problema 2	Problema 3	Problema 4
[Siewert, 1991], $N = 300$	0.837894, $L = 0$	0.476641, $L = 0$	0.506896, $L = 299$	0.473502, $L = 299$
[Vargas, 1998], $N = 30$	0.793380, $L = 0$	0.499907, $L = 0$	0.502842, $L = 29$	0.466854, $L = 29$
[Ourique, 2002], $N = 20$	0.791845, $L = 0$	0.469610, $L = 0$	0.481879, $L = 0$	0.463067, $L = 0$

Analisando os resultados da tabela (4.4), vemos que a nossa solução do problema 1 tem um desvio da ordem de 5% e a solução do problema 2 tem um desvio da ordem de 1% comparado com os resultados de [Siewert e Thomas, 1991], obtidos com $N = 300$. Comparando com os resultados obtidos por [Vargas, 1998], com ordem de quadratura $N = 30$, nossos resultados são praticamente iguais, com desvio menor do que 1%, con-

forme a tabela (4.4). Para os valores de N_c mais próximos de zero e demais problemas, não encontramos resultados para comparação. A tabela (4.3) mostra um valor negativo para o fluxo condutivo, na posição $x = 0$, para um valor de N_c da ordem de 10^{-2} , no problema 1. Nós supomos que este é um problema numérico, pois de acordo com os resultados de [Vilhena *et al.*, 2002], a solução do problema existe e é única, para qualquer valor de N_c . Isto é, o problema condutivo-radiativo, modelado pela Eq.(4.7) e condições de contorno que incluem reflexão especular e reflexão difusa nas fronteiras da placa, conforme as Eqs.(4.7a) e (4.7b) acoplado com o problema de transferência de calor, ver Eq.(4.8) com as condições de contorno dadas pelas Eqs.(4.8a) e (4.8b), tem solução única, para qualquer valor de N_c . Lembremos que o resultado numérico apresentado pelo código testado nos quatro problemas é uma solução para uma aproximação do problema condutivo-radiativo, modelado pelo método de ordenadas discretas (S_N), aplicação do método $\mathcal{L}TS_N$ e resultado do truncamento da série de Adomian para a temperatura e a intensidade de radiação. Isto é, nossos resultados são soluções obtidas computacionalmente para uma aproximação do problema condutivo-radiativo. Nós devemos observar que ainda não há a demonstração de que a solução obtida pelo método $\mathcal{L}TS_N$ combinado com o método de Adomian converge para a solução exata do problema, quando $N \rightarrow +\infty$. Pelos valores encontrados como solução dos quatro problemas de referência, cujos dados físicos estão na tabela (4.2), vemos que o método não apresenta resultados para valores de N_c da ordem menor ou igual à 10^{-3} , como podemos ver na tabela (4.3). Não verificamos a existência de pontos de bifurcação para o problema condutivo-radiativo, que foi a hipótese inicial para explicar os resultados negativos encontrados para o fluxo condutivo, em problema com N_c desta ordem de grandeza. Analisando as aproximações S_N para o problema de transporte linear, vistas no capítulo (3), vemos que o parâmetro σ_T influencia diretamente a solução das aproximações S_N , ocorrendo bifurcação para um determinado valor desta parâmetro. No estudo realizado neste capítulo, com a modelagem S_N para o problema condutivo-radiativo, vimos que o parâmetro N_c aparece como resultado da normalização da equação de transferência radiativa, sendo um número que indica se o fluxo radiativo ou o fluxo condutivo é dominante, conforme vimos na seção (4.2).

CAPÍTULO 5

ANÁLISE E CONCLUSÕES

A análise dos resultados obtidos através da nossa técnica nos permite chegar às seguintes conclusões:

1. Os resultados do capítulo 3 são análogos àqueles obtidos por [Mika, 1961] e [Case e Zweifel, 1967], para a solução da equação de transporte unidimensional, nos quais é determinada uma relação entre o número de autovalores discretos e um parâmetro da equação. A existência de pontos de bifurcação na solução da aproximação S_N foi verificada numericamente nos problemas monoenergéticos com seção de choque diferencial de espalhamento anisotrópico (em dois casos, com $L = 1$ e $L = 2$) e também num problema com dois grupos de energia, e seção de choque diferencial de espalhamento isotrópica. Os autovalores da matriz de transporte S_N calculados foram tabelados para pequenos valores da ordem de quadratura, por simplicidade. Os coeficientes da seção de choque diferencial de espalhamento utilizados nas seções (3.1.1) , (3.2) e (3.4) do capítulo 3 foram escolhidos por serem os mesmos de exemplos vistos na literatura, ver [Barros, 1990], [Barichello e Vilhena, 1993] e [Abreu, 2002], para podermos comparar e validar nossos resultados, os quais foram obtidos pela implementação computacional de programas por nós desenvolvidos em *Fortran 90*. Nós utilizamos também o programa *Maple* para a obtenção dos coeficientes dos polinômios característicos da matriz de transporte S_N para pequenas ordens de quadratura, tanto nos problemas monoenergéticos quanto no problema com dois grupos de energia. Nós consideramos que os resultados obtidos com o *Maple* são confiáveis, pois comparando as raízes dos polinômios característicos obtidos no *Maple* com os autovalores da matriz de transporte S_N calculados com o *Fortran*

90 para ordem de quadratura $N \leq 8$, os resultados são coincidentes até a sexta casa decimal. A análise dos coeficientes dos polinômios característicos, que possibilitou uma visão mais aprofundada do problema, para baixa ordem de quadratura, mostrou que a existência dos pontos de bifurcação não dependem dos valores escolhidos para os coeficientes σ_{sl} da seção de choque diferencial de espalhamento. No caso monoenergético, nos casos em que $L = 1$, na seção (3.1) e $L = 2$, na seção (3.2), nós analisamos a influência da seção de choque macroscópica total σ_T sobre os autovalores da matriz de transporte S_N e ilustramos para ordens de quadratura $N \leq 8$ que:

- a) se $\sigma_{s1} < \sigma_T < \sigma_{s0}$, então a matriz de transporte S_N tem autovalores complexos;
- b) se $\sigma_T > \sigma_{s0}$, então a matriz de transporte S_N tem somente autovalores reais.

No problema com dois grupos de energia, na seção (3.4), nós verificamos *numericamente*, para ordens de quadratura $N \leq 8$ que:

- a) se $\sigma_{T1} > \sigma_{s,1,1} + \sigma_{s,1,2}$ e $\sigma_{T2} > \sigma_{s,2,1} + \sigma_{s,2,2}$, então a matriz de transporte S_N tem autovalores reais.
- b) se $\sigma_{T1} < \sigma_{s,1,1} + \sigma_{s,1,2}$ e $\sigma_{T2} < \sigma_{s,2,1} + \sigma_{s,2,2}$, então a matriz de transporte S_N tem no mínimo 2 e no máximo 4 autovalores imaginários puros.

Devemos enfatizar que na pesquisa bibliográfica efetuada, não encontramos nenhuma análise como esta na área de Fenômenos de Transporte, e que este trabalho é uma contribuição inicial com este enfoque: a influência de parâmetros de controle sobre a solução da aproximação S_N da equação de transporte unidimensional. Além disto, nós podemos verificar *numericamente* a existência dos pontos de bifurcação para valores elevados da ordem de quadratura ($N \leq 512$), com pequeno esforço computacional, tanto para o problema monoenergético com anisotropia de graus 1 e 2, como para o problema de dois grupos de energia. Estes resultados foram por nós considerados confiáveis, pois foram calculados com rotinas da biblioteca *IMSL* do *Fortran 90*, que são bastante utilizadas pela comunidade científica e acadêmica. Todos os nossos resultados foram obtidos num *Pentium II*, 300 MHz e 32 Mb de *RAM*.

2. Na subseção (3.1.2) do capítulo 3, nós medimos o número de condicionamento da matriz de transporte S_N , em função do parâmetro de controle σ_T . Verificamos um crescimento acentuado do condicionamento na vizinhança do ponto de bifurcação σ_{s0} , como mostramos no gráfico da figura (3.12). Esta técnica não havia sido utilizada ainda no estudo da aproximação S_N , e pode ser uma ferramenta útil na análise da influência de parâmetros de controle também em outros problemas de transporte, para medir a sensibilidade da solução quanto a pequenas variações em alguns dados do problema.

3. No capítulo 4 mostramos o efeito de dominância do parâmetro de condução-radiação N_c no problema condutivo-radiativo. Através de implementação computacional, nós verificamos a diferença na solução de quatro problemas cujos dados físicos estão dados na tabela (4.2), para diferentes valores de N_c , e comparamos a dominância dos fluxos radiativo e condutivo, como mostramos na tabela (4.1): o fluxo condutivo aumenta à medida que o parâmetro N_c aumenta, ao passo que o fluxo radiativo diminui. Além disto, verificamos que é possível calcular numericamente resultados para N_c da ordem de 10^{-2} , em um problema de referência, qual seja, o problema 1 da tabela (4.3), enquanto para os problemas 2, 3 e 4 é possível obter resultados para N_c da ordem de 10^{-3} . Os valores para o fluxo condutivo mostrados na tabela (4.3) sugerem que os resultados negativos obtidos pela combinação dos métodos LTS_N e da decomposição devem ser explicados pela aproximação adotada no truncamento da série que aproxima a intensidade de radiação, com dois termos e da temperatura, com três termos, além da limitação da ordem da quadratura.

Como trabalhos futuros, na análise do problema linear monoenergético, podemos indicar a demonstração analítica de alguns resultados do capítulo 3, e também com outras quadraturas diferentes da quadratura de Gauss-Legendre, que foi utilizada em todo o nosso trabalho. No estudo do problema de multigrupo, nós podemos sugerir uma análise mais completa dos polinômios característicos para demonstração de alguns resultados verificados numericamente e a generalização para um maior número de grupos de energia. Quanto à resolução numérica do problema condutivo-radiativo, podemos indicar como um trabalho futuro aumentar o número de termos da série no método de Adomian e a ordem de quadratura do método LTS_N .

REFERÊNCIAS

Abreu, M. P., 1997. "On the Spectrum of the One-Speed Slab-Geometry Discrete Ordinates Operator in Neutron Transport Theory", **Annals of Nuclear Energy**, vol. 25, pp. 149–164.

Abreu, M. P., 2002. "Numerical Methods for the Generation of the Spectrum of the Multigroup Slab-Geometry Discrete Ordinates Operator in Neutron Transport Theory", **Annals of Nuclear Energy**, vol. 29, pp. 1837–1853.

Adomian, G., 1988. "A Review of the Decomposition Method in Applied Mathematics", **J. Math. Anal. Appl.**, vol. 135(1).

Banoczi, J. M. and Kelley, C. T., 1996. "A Fast Multilevel Algorithm for the Solution of Nonlinear Systems of Conductive-Radiative Heat Transfer Equations", **S. C. Sci. Comp.**, vol. 20, pp. 1214–1229.

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

Barros, R. C., 1990. "A Spectral Nodal Method for the Solution of Discrete Ordinates Problems in One and Two Dimensional Geometry", Doctoral thesis, Nuclear Engineering Department of The University of Michigan, Michigan, USA.

Barros, R. C., 1997. "On the Equivalence of Discontinuous Finite Element Methods and Discrete Ordinates Methods for the Angular Discretization of the Linearized Boltzmann Equation in Slab Geometry", **Annals of Nuclear Energy**, vol. 24(13), pp. 1013–1026.

Barros, R. C. and Larsen, E. W., 1990. "A Numerical Method for One-Group Slab-Geometry Discrete Ordinates Problems with No Spatial Truncation Error", **Nuclear Science and Engineering**, vol. 104, pp. 199–208.

Batistela, C. H. F., 1997. "Estudo de Criticalidade pelo Método LTS_N ", Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Bell, G. B. and Glasstone, S., 1970. "Nuclear Reactor Analysis". Van Nostrand Reinhold Company, New York.

Benassi, M., Cotta, R., and Siewert, C. E., 1983. "The P_N Method for Radiative Transfer Problems with Reflective Boundary Conditions", **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 30(6), pp. 547–553.

Brancher, J. D., 1998. "Formulação Analítica Para Solução do Problema de Ordenadas Discretas pelo Método LTS_N , para Valores de N Grandes", Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalúrgica e de Materiais da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Brown, P. N., Chang, B., and Hanebutte, U. R., 2001. "Spherical Harmonic Solutions of the Boltzmann Transport Equation via Discrete Ordinates", **Progress in Nuclear Energy**, vol. 39(2), pp. 263–284.

Cardona, A. V. and Vilhena, M. T. M. B., 1998. "A Comparative Study of Analytical Solutions for Some One-Dimensional Transport Equation Approximations", **Progress in Nuclear Energy**, vol. 33(3), pp. 289–300.

Case, K. M. and Zweifel, P. F., 1967. "Linear Transport Theory". Addison Wesley, Massachusetts.

da Silva, F. C., 2002, Teoria da Difusão de Nêutrons. Conferência, Pontifícia Universidade Católica do Rio Grande do Sul, Porto Alegre. *1ª Escola de Verão em Teoria de Transporte de Partículas Neutras.*

Duderstadt, J. J. and Hamilton, L. J., 1976. "Nuclear Reactor Analysis". John Wiley & Sons, Inc., New York.

Garcia, R. D. M., 1985. "A Review of the Facile F_N Method in Particle Transport Theory", **Theory and Statistical Physics**, vol. 14, pp. 39–51.

Glendinning, P., 1994. "Stability, Instability and Chaos". Cambridge University Press, New York.

Hauser, E. B., 2002. "Estudo e Solução da Equação de transporte de Nêutrons Bidimensional pelo Método $\mathcal{L}TS_N$ para Elevadas Ordens de Quadratura Angulares: $LTS_N - Diag$ e $LTS_N - DiagExp$ ", Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

Kelley, C. T., 1996. "Existence and Uniqueness of Solutions of Nonlinear of Conductive-Radiative Heat Transfer Equations", **Transport Theory and Statistical Physics**, vol. 25, pp. 249–260.

Mika, J. R., 1961. "Neutron Transport with Anisotropic Scattering", **Nuclear Science and Engineering**, vol. 11, pp. 415–427.

Ourique, L. E., Vilhena, M. T. M. B., and Pazos, R. P., 2001, Qualitative Analysis of the One-Dimensional Steady-State S_N Equations. Technical session on computational modeling of neutral and charged particle transport and thermal hydraulics applied to nuclear science and engineering, UFRJ ,ABMC, Rio de Janeiro. 2nd International Conference on Computational Heat and Mass Transfer.

Pazos, R. P., 2000. "Convergência na Teoria de Transporte Linear", Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia Mecânica (PROMEC), Universidade Federal do Rio Grande do Sul.

Pitkäranta, J. and Scott, L. R., 1983. "Error Estimates for the Combined Spatial and Angular Approximations of the Transport Equation for Slab Geometry", **SIAM Journal Numerical Analysis**, vol. 20(5), pp. 922–950.

Segatto, C. F., Vilhena, M. T. M. B., and Gomes, M. G., 1999. "The One-Dimensional LTS_N Solution In a Slab with High Degree of Quadrature", **Annals of Nuclear Energy**, vol. 26, pp. 925–934.

Siewert, C. E., 1995. "An Improved Iterative Method for Solving a Class of Coupled Conductive- Radiative Heat-Transfer Problems", **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 54(4), pp. 599–605.

Siewert, C. E. and Thomas, J. R., 1991. "A Computational Method for Solving a Class of Coupled Conduction-Radiative Heat Transfer Problem", **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer**, vol. 45, pp. 273–281.

Stacey, W. M., 2001. "Nuclear Reactor Physics". John Wiley & Sons, Inc., New York.

Stroud, H. A., 1974. "Numerical Quadrature and Solution of Ordinary Differential Equations". Springer-Verlag, New York.

Trefethen, L. N. and Bau, D., 1997. "Numerical Linear Algebra". SIAM, Philadelphia.

Vargas, R. M. F., 1998. "Solução Analítica do Problema de Ordenada Discreta pelo Método da Decomposição", Tese de doutorado, Programa de Pós-Graduação em Engenharia de Minas, Metalurgia e Materiais da Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Porto Alegre, RS, Brasil.

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

Vilhena, M. T. M. B., Thompson, M., Pazos, R. P., and Ourique, L. E., 2002. "Qualitative Analysis of the Linear and Nonlinear Radiative Transfer Equation in a Slab", **Progress in Nuclear Energy**. Aceito para publicação.

Özisik, M. N., 1973. "Radiative Transfer and Interactions with Conduction and Convection". Wiley, New York.

APÊNDICE A

NORMAS

A.1 Normas de Vetores

Uma norma é uma função $\| \cdot \| : \mathcal{C}^m \rightarrow \mathfrak{R}$, que a cada vetor $\mathbf{x} = [x_1 \cdots x_m]^t$ do espaço vetorial \mathcal{C}^m associa um número real, interpretado como o comprimento do vetor, e que deve satisfazer as seguintes condições:

1. $\| \mathbf{x} \| \geq 0$, e $\| \mathbf{x} \| = 0$ se e somente se $\mathbf{x} = \mathbf{0}$;
2. $\| \mathbf{x} + \mathbf{y} \| \leq \| \mathbf{x} \| + \| \mathbf{y} \|$;
3. $\| \alpha \mathbf{x} \| = |\alpha| \| \mathbf{x} \|$, $\forall \alpha \in \mathfrak{R}$.

A norma mais usada em cálculos é a norma-2, chamada de norma Euclideana, definida como

$$\| \mathbf{x} \|_2 = \left(\sum_{i=1}^m |x_i|^2 \right)^{1/2} \quad (\text{A.1})$$

que é um caso particular da norma $-p$: $\| \mathbf{x} \|_p = \left(\sum_{i=1}^m |x_i|^p \right)^{1/p}$. Para o caso particular em que $m = 2$, o conjunto $\{ \mathbf{x} \in \mathcal{C}; \| \mathbf{x} \| = 1 \}$ é o círculo unitário. Daqui em diante, usaremos simplesmente norma para significar a norma-2. Isto se justifica, pois as normas são equivalentes do ponto de vista numérico, de acordo com [Trefethen e Bau, 1997]. Usando a norma de vetores, podemos definir a norma de uma matriz induzida pela norma de um vetor. A norma é usada, por sua vez, para definirmos o número de condicionamento de uma matriz.

A.2 Norma de Matrizes

Dada uma matriz $A(m, n)$ e um vetor $\mathbf{x} \in \mathbb{C}^n$, o produto $A\mathbf{x}$ é um vetor $\mathbf{y} \in \mathbb{C}^m$, que pode ser interpretado como a imagem de uma transformação linear de \mathbb{C}^n em \mathbb{C}^m . Dadas as normas $\|\cdot\|_n$ e $\|\cdot\|_m$ no domínio e na imagem de uma transformação linear A , a norma induzida de matrizes, denotada por $\|A\|$, é o menor número real c para o qual é satisfeita a seguinte desigualdade, para todo $\|\mathbf{x}\| \in \mathbb{C}^n$:

$$\|A\mathbf{x}\| \leq c \|\mathbf{x}\|_n. \quad (\text{A.2})$$

Isto é, a norma $\|A\|$ é o supremo das razões

$$\frac{\|A\mathbf{x}\|}{\|\mathbf{x}\|}, \quad (\text{A.3})$$

para todo $\|\mathbf{x}\| \in \mathbb{C}^n$. Devido a propriedade (3) da norma, vemos que a norma de uma matriz A pode ser calculada como:

$$\|A\| = \sup_{\|\mathbf{x}\|=1} \|A\mathbf{x}\|. \quad (\text{A.4})$$

A fórmula (A.4) não tem utilidade do ponto de vista prático, pois não pode ser usada para calcular a norma de uma matriz. De fato, o cálculo da norma é, em geral, uma tarefa complexa computacionalmente. Para termos uma idéia do cálculo, mostremos aqui uma interpretação geométrica deste valor. Consideremos S o círculo unitário no \mathbb{R}^2 , e tomemos uma matriz $A(2, 2)$. A imagem AS é uma elipse no \mathbb{R}^2 , cujos eixos principais tem comprimentos v_1 e v_2 , com $v_1 \geq v_2$, chamados de valores singulares de A ; os vetores unitários \mathbf{u}_i , $i = 1, 2$ nas direções dos eixos principais são vetores singulares à esquerda de A . Os vetores $\mathbf{v}_1, \mathbf{v}_2$ que são as pré-imagens dos eixos principais de AS são os vetores singulares à direita de A , isto é, tais que $A\mathbf{v}_i = v_i\mathbf{u}_i$. Então, temos que $\|A\| = v_1$. Para o cálculo de v_1 , definimos primeiramente a matriz hermitiana de uma matriz A .

Definição 1 *Seja A uma matriz $m \times n$, cujo termo geral é a_{ij} ; a matriz hermitiana conjugada ou adjunta de A , denotada por A^* , é a matriz $n \times m$, cujo termo geral é $\overline{a_{ji}}$, onde a barra denota a conjugação complexa. Se A é uma matriz real, então A^* é a transposta de A .*

Teorema 1 *Os valores singulares não-nulos de uma matriz A são as raízes quadradas dos autovalores não-nulos de A^*A ou AA^* . A norma de A é igual ao maior destes autovalores, isto é,*

$$\| A \| = v_1 . \quad (\text{A.5})$$

Exemplo. Seja $A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$; então $A^* = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 2 & 2 \end{bmatrix}$, e $AA^* = \begin{bmatrix} 5 & 4 \\ 4 & 4 \end{bmatrix}$, e os autovalores de AA^* são $x_1 = 8.5311$ e $x_2 = 0.46887$. Logo, $v_1 = \sqrt{8.5311} = 2.92$, isto é, $\| A \| = 2.92$.

Definição 2 *Seja A uma matriz real ou complexa, $n \times n$, não-singular. Então, o número de condicionamento de A , denotado por $cond(A)$, é definido como :*

$$cond(A) = \| A \| \| A^{-1} \| . \quad (\text{A.6})$$

Exemplo. Seja $A = \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 0 & 2 \end{bmatrix}$; então $cond(A) = 4.26$.

Como observamos anteriormente, o número de condicionamento da matriz dos coeficientes de um sistema de equações lineares é uma medida da sensibilidade deste sistema quanto à pequenas alterações nos dados de entrada. Isto é, em um sistema mal-condicionado, com número de condicionamento muito elevado, pequenas alterações ("ruídos") em dados de entrada podem provocar grandes alterações na solução. Em um sistema bem-condicionado, com menor número de condicionamento, pequenas alterações em dados de entrada provocam mudanças de mesma escala na solução do sistema.