Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics, v. 11, n. 1, 2025.

Trabalho apresentado no XLIII CNMAC, Centro de Convenções do Armação Resort - Porto de Galinhas - PE, 2024

Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics

Quadraturas Adaptativas na Avaliação de Soluções Particulares em Problemas de Transporte de Partículas

Fernando Groff[1] Pedro A. B. Antunes[2] Liliane B. Barichello[3]
IME/UFRGS, Porto Alegre, RS

A equação de transporte de partículas é uma equação fundamental na modelagem de diversos fenômenos, como transferência radiativa e transporte de nêutrons [3, 4]. Devido a sua complexidade, aproximações em ordenadas discretas são utilizadas para simplificar o tratamento dos operadores integrais angulares presentes no modelo. Em casos especiais, essa abordagem permite reduzir o problema a um sistema de equações diferenciais cuja solução pode ser obtida analiticamente. Contudo, a avaliação da solução particular [1], onde os termos de fonte externa podem ser dos mais variados tipos, requer a avaliação de operadores integrais na variável espacial.

Nesse contexto, a implementação de quadraturas adequadas se torna imperativo. Quando os termos de fonte externa são conhecidos, esquemas de quadratura adaptativos [2] podem ser utilizados para aproximar os operadores integrais. Tendo em vista a flexibilidade e a precisão desses esquemas, bem como o interesse em problemas de transporte não homogêneos, neste trabalho investigamos a aplicação de uma quadratura adaptativa na avaliação da solução particular da equação de transferência radiativa unidimensional

$$\mu\frac{\partial}{\partial\tau}I\left(\tau,\mu\right)+I\left(\tau,\mu\right)=\frac{\omega}{2}\sum_{l=0}^{L}\beta_l P_l\left(\mu\right)\int_{-1}^{1}P_l\left(\mu'\right)I\left(\tau,\mu'\right)d\mu'+S\left(\tau,\mu\right), \tag{1}$$

onde I é a intensidade, $\tau\in(0,\tau_0)$ é a variável espacial, $\mu\in[-1,1]$ é a variável angular, $\omega\in(0,1)$ é o albedo de espalhamento, β_l são os coeficientes da expansão da função de fase em polinômios de Legendre, L é o grau de anisotropia e S é a fonte externa de radiação.

Tomando uma discretização angular com N nós $\mu_k\in(0,1]$ e N pesos w_k, expressamos a solução particular em ordenadas discretas, derivada via função de Green, na forma [1]

$$I_p\left(\tau,\pm\mu_k\right)=\sum_{j=1}^{N}C_j^{+}\left(0,\tau\right)\phi\left(\nu_j,\pm\mu_k\right)+C_j^{-}\left(\tau_0,\tau\right)\phi\left(\nu_j,\mp\mu_k\right), \tag{2}$$

sendo $C_j^{\pm}$ as funções

$$C_j^{\pm}\left(x,y\right)=\frac{\pm1}{\mathcal{N}\left(\nu_j\right)}\sum_{k=1}^{N}w_k\int_x^y\left[S\left(\tau',\mu_k\right)\phi\left(\nu_j,\pm\mu_k\right)+S\left(\tau',-\mu_k\right)\phi\left(\nu_j,\mp\mu_k\right)\right]e^{\mp(y-\tau')/\nu_j}d\tau', \tag{3}$$

ν_j os autovalores, $\phi\left(\nu_j,\pm\mu_k\right)$ as autofunções e $\mathcal{N}\left(\nu_j\right)$ as integrais de normalização. Para o cálculo das integrais espaciais em (3), consideramos o esquema de quadratura duplamente adaptativo CQUAD [2]. Esse esquema utiliza ordens crescentes da quadratura de Clenshaw-Curtis para aproximar a integral em cada intervalo. Uma estimativa do erro é obtida a partir da norma L^2 da

[1] fernando.groff@ufrgs.br
[2] pedrobineloantunes@gmail.com
[3] lbaric@ufrgs.br

diferença entre os polinômios interpoladores de ordens sucessivas. Se essa diferença for muito grande ou se a ordem máxima da quadratura já tiver sido aplicada, o intervalo é bissetado. O algoritmo CQUAD é capaz de tratar diversos tipos de integrandos (contendo singularidades, por exemplo), sendo adequado para uma implementação de propósito geral.

Na Tabela 1, apresentamos resultados para a radiação incidente (relativa à solução particular),

$$G_p(\tau) = 2\pi \int_{-1}^{1} I_p(\tau,\mu)\, d\mu \approx 2\pi \sum_{j=1}^{N} \left[C_j^{+}(0,\tau) + C_j^{-}(\tau_0,\tau)\right] \sum_{k=1}^{N} w_k \left[\phi(\nu_j,\mu_k) + \phi(\nu_j,-\mu_k)\right], \quad (4)$$

calculada em meio altamente espalhador e com termo fonte relevante em problemas com incidência de radiação colimada [3]. Esses valores comparam os resultados obtidos calculando-se as integrais em (3) de forma exata e pela quadratura adaptativa com tolerância de 10^{-12} para os erros absoluto e relativo. Em ambos os casos, consideramos a discretização angular via quadratura de Gauss-Legendre no semi-intervalo $(0, 1]$ com $N = 40$. Como é possível observar, os resultados apresentam ótima concordância, com erros relativos inferiores à tolerância solicitada.

Os testes aqui apresentados fazem parte de investigação mais geral de quadraturas adaptativas e devem ser comparados com outras abordagens e esquemas de quadratura para aplicação em problemas de interesse na área de segurança nuclear envolvendo os chamados momentos multiplicativos [4]. Os intervalos de definição das quadraturas e sua adaptabilidade podem afetar significativamente a acurácia dos resultados finais.

Tabela 1: Radiação incidente G_p calculada com $\tau_0 = 1$, $\omega = 0.9$, $\beta_l = (2l+1)\, g^l$, $g = 0.8$, $L = 99$ e $S(\tau,\mu) = \frac{\omega}{4\pi} \sum_{l=0}^{L} \beta_l P_l(\mu)\, e^{-\tau}$.

τ	0	0.2	0.4	0.6	0.8	1
Exato	0.298172	0.517300	0.675539	0.792538	0.875735	0.926364
CQUAD	0.298172	0.517300	0.675539	0.792538	0.875735	0.926364
Erro relativo	4.97E-13	6.03E-14	3.73E-14	9.88E-14	5.72E-14	2.16E-13

Agradecimentos

Os autores agradecem à CAPES e ao CNPq por financiamento parcial a este trabalho.

Referências

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

[2] P. Gonnet. “Increasing the Reliability of Adaptive Quadrature Using Explicit Interpolants”. Em: **ACM Transactions on Mathematical Software** 37 (2010), pp. 1–32. DOI: 10.1145/1824801.1824804.

[3] F. Groff, L. B. Barichello e E. Sauter. “A Concise and Accurate Solution for Radiative Transfer Problems Relevant in Hyperthermia Models”. Em: **Proceedings of CHT-21 ICHMT International Symposium on Advances in Computational Heat Transfer**. Begellhouse, 2021, pp. 445–460. DOI: 10.1615/ICHMT.2021.CHT-21.360.

[4] I. Pázsit e L. Pál. “Multiplicity theory beyond the point model”. Em: **Annals of Nuclear Energy** 154 (2021), pp. 108–119. DOI: 10.1016/j.anucene.2020.108119.