

Solução ADO para a Equação de Transferência Radiativa em Geometria Bidimensional com a Função de Fase na Forma Exata

Maiara Mentges¹

Programa de Pós Graduação em Matemática Aplicada, UFRGS, Porto Alegre, RS

Tiago G. Cortelini²

Bacharelado em Matemática, UFRGS, Porto Alegre, RS

Liliane B. Barichello³, Rudnei D. da Cunha⁴

Instituto de Matemática e Estatística, UFRGS, Porto Alegre, RS

Resumo Neste trabalho, uma solução para o problema de transferência radiativa em geometria cartesiana bidimensional, com a representação da função de fase na forma exata, é proposta. A formulação utiliza o método ADO-Nodal sendo que diferentemente de trabalhos anteriores, onde expansões truncadas em Polinômios de Legendre eram utilizadas para expressar a função de fase, aqui a mesma é representada pela fórmula exata. Meios com grau de anisotropia arbitrário podem ser considerados. Para justificar a relevância do presente estudo a função de fase de Henyey-Greenstein expandida em polinômios de Legendre é comparada com sua formulação exata. Com isso fica evidenciada a vantagem de utilizar a expansão com valores maiores de L para que o erro entre as duas representações seja menor possível. Resultados numéricos foram obtidos para um problema teste e comparados com a resolução via Método de Diferenças Finitas. A potencialidade do método ADO com a função de fase na forma exata fica indicada uma vez que os resultados obtidos apresentaram concordância satisfatória, redução do tempo computacional e maior generalidade na formulação ADO podendo ser aplicada em diferentes áreas.

Palavras-chave Problemas Bidimensionais de Transferência Radiativa, Função de Fase Exata, Método ADO-Nodal, Método de Diferenças Finitas.

1 Introdução

A Teoria de Transporte tem como objetivo investigar a distribuição das partículas em um meio, levando em consideração o movimento das mesmas e suas interações com o mesmo [17]. A modelagem matemática desse sistema é dada pela equação linear de Boltzmann, também conhecida como equação de transporte [6]. Essa equação apresenta um alto grau de complexidade, uma vez que a mesma é composta por sete variáveis independentes: três coordenadas espaciais (que determinam a posição das partículas), duas variáveis angulares (que definem a direção na qual as partículas estão migrando), uma variável de energia e uma variável temporal.

Neste trabalho abordamos a aplicação da equação de Boltzmann linear na modelagem de problemas de radiação, que nesse caso é designada como equação de transferência radiativa (ETR). Muitas das aplicações tradicionais da ETR, por exemplo na radiação térmica, são amplamente

¹maiara.mentges@hotmail.com

²tiagogusbertic@gmail.com

³lbaric@mat.ufrgs.br

⁴rudnei.cunha@ufrgs.br

conhecidas por serem observadas em fenômenos naturais, como a radiação solar ou a transferência de calor por radiação [15]. Além das aplicações já mencionadas, a análise da radiação térmica desempenha um papel cada vez mais importante na medicina, sendo aplicada em exames médicos, como por exemplo a tomografia ótica [12].

Visto a vasta área de aplicação de estudos envolvendo a interação de um determinado tipo de radiação com a matéria, é necessário que cada fenômeno seja classificado de acordo com o tipo de interação e a matéria com a qual a interação ocorre [17]. Para descrever matematicamente o padrão angular de espalhamento uma função, denominada função de fase, é utilizada. Na literatura existem diversos estudos sobre as diferentes formas de representar a função de fase, uma dessas representações é a função de fase de Henyey-Greenstein [11]. Essa representação é frequentemente usada em ótica biomédica, uma vez que descreve com uma boa aproximação a interação média da luz com o tecido [14].

Um tratamento da função de fase, comumente utilizado, consiste em uma aproximação em termos de uma expansão truncada de polinômios de Legendre [7]. No entanto, é possível encontrar na literatura trabalhos que versam sobre as limitações dessa aproximação, ressaltando que o truncamento da série de Legendre bem como a necessidade de incluir um grande número de termos para fornecer uma boa aproximação são algumas das desvantagens dessa aproximação, podendo limitar a precisão dos cálculos [8]. Outra possibilidade para a representação da função de fase, evitando-se a utilização da expansão, é a formulação exata.

Para o tratamento do domínio angular da equação, nesse trabalho, utilizamos o método de ordenadas discretas juntamente com o método ADO (sigla do inglês *Analytical Discrete Ordinates*) que tem por objetivo resolver analiticamente o sistema de equações oriundo do tratamento das variáveis espaciais das equações em ordenadas discretas. Quando aplicado em problemas bidimensionais a formulação ADO é conhecida como ADO-Nodal ([2], [3]). O método ADO-Nodal parte da integração da equação sobre um nodo, onde o modelo é reduzido a equações unidimensionais avaliadas separadamente nas variáveis espaciais x e y , que são resolvidas pelo método ADO.

O método ADO-Nodal já vem sendo utilizado em problemas de transferência radiativa com espalhamento anisotrópico, onde a função de fase é aproximada em termos da expansão truncada de polinômios de Legendre [4]. O presente trabalho propõem uma abordagem para a ETR bidimensional com espalhamento anisotrópico, resolvida pelo método ADO-Nodal, que descreva a função de fase pela forma exata. Essa proposta além de evitar aproximações da função de fase também resulta um problema de autovalores com uma formulação mais simplificada. E, devido a generalização da nova formulação, a mesma pode ser utilizada em diferentes aplicações da teoria de transporte, apenas alterando a lei de espalhamento de acordo com o problema a ser abordado.

2 Formulação Matemática

Consideramos um domínio retangular R , com $x \in [0, a]$ e $y \in [0, b]$, uma aproximação em ordenadas discretas da ETR, para o caso monoenergético e estacionário, é escrita para a intensidade de radiação na região r e na direção $\Omega = (\mu, \eta, \xi)$, na forma ([17], [15])

$$\mu_i \frac{\partial}{\partial x} I(x, y, \Omega_i) + \eta_i \frac{\partial}{\partial y} I(x, y, \Omega_i) + \beta I(x, y, \Omega_i) = \kappa I_b(x, y) + \frac{\sigma_s}{4\pi} \sum_{n=1}^M w_n I(x, y, \Omega_n) p(\Omega_n \cdot \Omega_i), \quad (1)$$

para $i = 1, \dots, M$, onde M é a quantidade de direções discretas na esfera unitária e (w_n) são os pesos determinados pelo esquema de quadratura escolhido.

O coeficiente de extinção do meio é representado por $\beta = \kappa + \sigma_s$, de modo que κ é o coeficiente de absorção e σ_s o coeficiente de espalhamento; $I_b(r)$ é a intensidade de radiação de corpo negro;

$p(\Omega_n \cdot \Omega_i)$ é a função de fase de espalhamento da transferência radiativa a partir da direção de entrada Ω_i para a direção de saída Ω_n que pode ser expressa em termos de uma expansão truncada de polinômios de Legendre [7], como

$$p(\Omega_n \cdot \Omega_i) = p(\cos\Theta) = \sum_{l=0}^L C_l P_l(\cos\Theta), \tag{2}$$

onde C_l são os coeficientes da expansão e são determinados de acordo com o lei de espalhamento a ser utilizada; L é a ordem da expansão da função de fase; P_l representa o polinômio de Legendre de grau l ; e Θ é o ângulo formado entre as direções de entrada e saída.

A representação da função de fase conforme a equação (2) é uma aproximação, que pode ser utilizada para diversas leis de espalhamento, devendo-se determinar o coeficiente C_l de acordo com a lei abordada. Para a função de Henyey-Greenstein, por exemplo, o termo $C_l = (2l + 1)g^l$ onde g é o fator de anisotropia, $g \in (-1, 1)$ [8]. Em geral, a aproximação representada na equação (2) visa expressar de forma aproximada as fórmulas exatas das funções de fase. A função de espalhamento de Henyey-Greenstein é definida pela seguinte formulação exata [11]

$$p_{HG}(\Theta) = \frac{1 - g^2}{[1 + g^2 - 2g\cos\Theta]^{\frac{3}{2}}}. \tag{3}$$

Se $g = 0$, então o meio é dito isotrópico, isso significa que o fóton tem a mesma probabilidade de se espalhar em qualquer direção. Quando g assume valores positivos ($0 < g < 1$) indica espalhamento para frente e em casos de valores negativos ($-1 < g < 0$), espalhamento para trás [5].

Buscando explorar a representação da função de fase na forma exata, ao invés de utilizar a expansão finita em polinômios de Legendre, desenvolvemos uma solução pelo método ADO-Nodal para a equação de transferência radiativa com a função de espalhamento expressa de forma genérica.

2.1 Solução ADO-Nodal: lei de espalhamento exata

Primeiramente, vamos considerar nosso problema de transporte definido em um domínio retangular R com um vértice posicionado na origem do sistema cartesiano e dividido em $r = 1, \dots, R$ regiões retangulares. Cada uma das r regiões é delimitada por $x \in [a_{h-1}^r, a_h^r]$ e $y \in [b_{k-1}^r, b_k^r]$ com $0 \leq a_{h-1}^r < a_h^r \leq a$ e $0 \leq b_{k-1}^r < b_k^r \leq b$, onde $h = 1, \dots, H$ e $k = 1, \dots, K$ indicando o número de divisões em cada uma das variáveis espaciais.

No caso do problema integrado em y , as direções Ω_i são ordenadas seguindo [2]. De modo que, para $i = 1, \dots, \frac{M}{2}$ as direções tem coordenadas $\mu_i > 0$ e para $i = \frac{M}{2} + 1, \dots, M$ as direções tem coordenadas $\mu_i < 0$. E, $\eta_i = \eta_i + \frac{M}{2}$.

Considerando o ordenamento acima detalhado, a equação (1) pode ser reescrita como:

$$\begin{aligned} & \mu_i \frac{\partial}{\partial x} I(x, y, \Omega_i) + \eta_i \frac{\partial}{\partial y} I(x, y, \Omega_i) + \beta I(x, y, \Omega_i) = \\ & \kappa I_b(x, y) + \frac{\sigma_{sr}}{4\pi} \sum_{n=1}^{\frac{M}{2}} w_n \left[I(x, y, \Omega_n) p(\Omega_n \cdot \Omega_i) + I\left(x, y, \Omega_{n+\frac{M}{2}}\right) p\left(\Omega_{n+\frac{M}{2}} \cdot \Omega_i\right) \right] \end{aligned} \tag{4}$$

e

$$\begin{aligned} & -\mu_i \frac{\partial}{\partial x} I\left(x, y, \Omega_{i+\frac{M}{2}}\right) + \eta_i \frac{\partial}{\partial y} I\left(x, y, \Omega_{i+\frac{M}{2}}\right) + \beta I\left(x, y, \Omega_{i+\frac{M}{2}}\right) = \kappa I_b(x, y) + \\ & \frac{\sigma_{sr}}{4\pi} \sum_{n=1}^{\frac{M}{2}} w_n \left[I(x, y, \Omega_n) p\left(\Omega_n \cdot \Omega_{i+\frac{M}{2}}\right) + I\left(x, y, \Omega_{n+\frac{M}{2}}\right) p\left(\Omega_{n+\frac{M}{2}} \cdot \Omega_{i+\frac{M}{2}}\right) \right], \end{aligned} \tag{5}$$

para $i = 1, \dots, \frac{M}{2}$.

Integramos as equações (4) e (5) em relação a y e obtemos equações unidimensionais. A partir disso, é possível o uso do método ADO para resolução do problema homogêneo associado. Primeiramente descartamos os termos de fonte das equações unidimensionais anteriormente obtidas e propomos as soluções em termos de autofunções e exponenciais para o problema homogêneo na região r , com $r = 1, \dots, R$, para $i = 1, \dots, M$.

$$I_{yr}^H(x, \Omega_i) = \Phi_{yr}(\nu_r, \Omega_i)e^{\frac{-x}{\nu_r}}, \tag{6}$$

Substituindo (6) nas versões homogêneas das equações unidimensionais e, após uma série de manipulações algébricas, obtemos o seguinte problema de autovalores:

$$[B_{yr}A_{yr}] X_{yr} = \lambda_{yr}X_{yr}, \tag{7}$$

onde o autovalor λ_r é tal que

$$\lambda_{yr} = \frac{1}{\nu_r^2}. \tag{8}$$

Ainda

$$A_{yr} = \left[\beta_r - \frac{\sigma_{sr}}{4\pi} W \left(P_{y_{n,i}} + P_{y_{n+\frac{M}{2},i}} \right) \right] M_y^{-1} \tag{9}$$

e

$$B_{yr} = \left[\beta_r - \frac{\sigma_{sr}}{4\pi} W \left(P_{y_{n,i}} - P_{y_{n+\frac{M}{2},i}} \right) \right] M_y^{-1}, \tag{10}$$

sendo as matrizes P_y formadas pela função de fase avaliada em todas as direções. As matrizes W e M_y , ambas diagonais, são formadas, respectivamente, pelos pesos e nós da quadratura.

Um procedimento análogo é desenvolvido para a intensidade média na variável x , apenas considerando um ordenamento diferente das direções, conforme proposto por Barichello et al. em[2].

Com a derivação do problema de autovalores, obtemos as soluções homogêneas relacionadas ao problema. No entanto, para que as intensidades médias nas variáveis x e y possam ser definidas, ainda é preciso a determinação das soluções particulares, de equações auxiliares que definem as intensidades desconhecidas nos contornos das regiões e organização do sistema de equações lineares. Essas etapas seguem os procedimentos propostos por Rui et al. [16]. A partir da construção e resolução do sistema de equações lineares, resultados numéricos da formulação ADO-Nodal para a ETR bidimensional com a função de fase avaliada de forma exata podem ser obtidos.

3 Resultados numéricos

Primeiramente, realizamos uma comparação entre as funções de fase representadas pelas equações (2) e (3), para evidenciar a relevância da função de fase expressa de forma exata. A equivalência entre as duas fórmulas é dada a partir da determinação adequada de um valor para L (presente na expansão) de acordo com o valor de g escolhido (presente na representação exata). Desse modo, considerando o caso em que $g = 0.5$, o erro entre a função de fase exata e expandida pode ser observado na Figura 1, para diferentes valores de L .

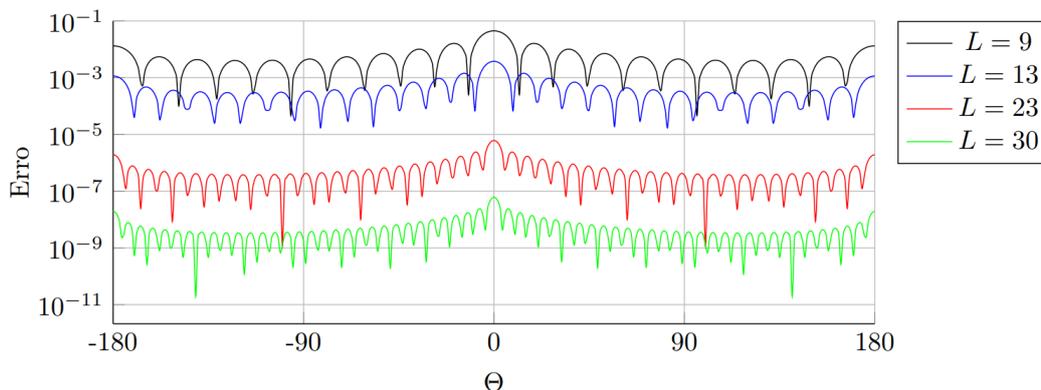


Figura 1: Erro entre a função de fase exata e expandida para diferentes valores de L quando $g = 0.5$ (Fonte: Elaborado pelos autores).

É possível perceber a vantagem de valores maiores de L na expansão para que o erro entre as representações se torne menor. Por exemplo, para $L = 9$, o erro é menor que 10^{-1} , para todos valores de Θ . Já para $L = 30$, temos um erro menor que 10^{-7} . Realizando testes semelhantes ao apresentado, para valores de g maiores que 0.5, percebemos que à medida que o valor de g cresce, precisamos de valores de L mais altos para que o erro entre as duas representações mantenha-se na mesma ordem de magnitude. Com isso, evidenciamos a importância da representação exata da função de fase, uma vez que, assim, evitamos a utilização de uma aproximação que envolva uma grande quantidade de elementos.

Além da comparação tecida entre as duas funções de fase, a seguir são apresentados alguns resultados numéricos obtidos através da solução da equação de transferência radiativa em geometria cartesiana bidimensional com a função de fase representada de forma exata. O problema bidimensional resolvido é definido por um quadrado com espessura ótica igual a 1, dividido por uma malha 4×4 totalizando 16 nodos com tamanho de 0.25×0.25 . Tratando-se de um problema de radiação térmica, as paredes e o meio são mantidos frios e têm poderes emissivos uniformes prescrito de zero, exceto na parede inferior (delimitada pela extensão em que $y = 0$) que é mantida quente e seu poder emissivo constante é igual a $1/\pi$.

Para a resolução do problema, utilizamos a quadratura Simétrica de Nível (LQ_N) (sigla em inglês de *Level Symmetric Quadrature*), onde N é a ordem da quadratura representada sempre por um número par e $M = N(N+2)/8$ é o total de direções por octante. Para as quadraturas LQ_4 , LQ_8 , LQ_{12} e LQ_{16} , utilizamos os pesos e as direções definidas por [13]. Realizamos a implementação do problema proposto por meio da linguagem de programação computacional Fortran [10] e obtemos os resultados numéricos através da solução do sistema linear via subrotinas da biblioteca LAPACK [1].

A Figura 2 apresenta resultados de comparações feitas entre a formulação exata da função de fase e a formulação com o método de diferenças finitas *upwind* ([9],[12]), onde a solução é obtida em pontos da malha e não em nodos do domínio. Para a formulação com o método de diferenças finitas utilizamos uma malha 501×501 , de modo que a distância entre cada ponto da malha é $\Delta x = \Delta y = 1/500$. Conforme descrito em [9], a modelagem de contorno do método de diferenças finitas ainda precisa ser aprimorada, de modo que os valores próximos às extremidades apresentam uma discordância maior. Os resultados comparados são a densidade média de radiação ao longo da direção y na linha central do domínio ($x = 0.5$). As comparações foram feitas considerando o caso em que $g = 0.5$, $\sigma_s = 0.5$, $\kappa = 0.5$ e $\beta = 1$.

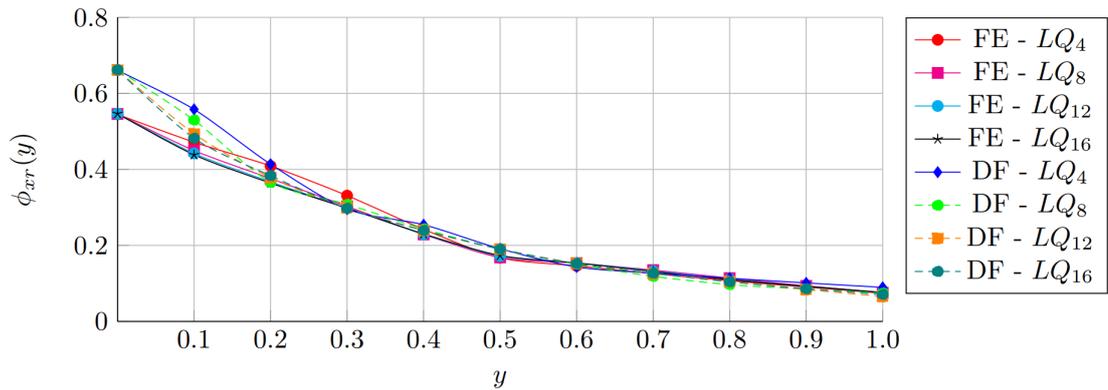


Figura 2: Densidade média de radiação ao longo da direção y na linha central ($x = 0.5$) para espalhamento representado pela função de fase de Henyey-Greenstein ($g = 0.5$) com diferentes ordens de quadratura LQ_N . FE = Método ADO-Nodal com Formulação Exata; DF = Método de Diferenças Finitas (Fonte: Elaborado pelos autores).

Observamos que, nos pontos interiores do domínio, os resultados da densidade média de radiação apresentaram concordância satisfatória, em geral de um a dois dígitos.

4 Considerações Finais

Ressaltamos a potencialidade da nova formulação teórica desenvolvida, que propõe a solução do problema de autovalores utilizando a função de fase expressa em sua forma exata, diminuindo substancialmente o número de passos no algoritmo, reduzindo o tempo computacional e tornando a formulação mais genérica. Destacamos ainda que, apesar da formulação ADO-Nodal produzir resultados com satisfatória precisão em malhas grossas, como já verificado em outros problemas, testes em malhas mais refinadas devem ser investigados, como em [16].

Evidenciamos a validade da nova formulação uma vez que os resultados obtidos, ao serem comparados com outros métodos numéricos, concordam em cerca de dois dígitos significativos. E, cabe destacar a relevância da formulação proposta, uma vez que a mesma pode ser aplicada em outras áreas da Teoria de Transporte por utilizar um problema de autovalor mais genérico.

Agradecimentos

Os autores agradecem ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior (CAPES) e a Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do RS - Brasil (FAPERGS) [Proc. 19/2551-0001766-9] pelo financiamento parcial deste trabalho.

Referências

- [1] E. Anderson et al. **LAPACK Users' Guide**. Third. Society for Industrial e Applied Mathematics, 1999. DOI: 10.1137/1.9780898719604. URL: <https://epubs.siam.org/doi/abs/10.1137/1.9780898719604>.

- [2] L. B. Barichello, L. C. Cabrera e J. F. Prolo Filho. “An analytical approach for a nodal scheme of two-dimensional neutron transport problems”. Em: **Annals of Nuclear Energy** 38.6 (2011), pp. 1310–1317. DOI: 10.1016/j.anucene.2011.02.004.
- [3] L. B. Barichello, C. B. Picoloto e R. D. da Cunha. “The ADO-nodal method for solving two-dimensional discrete ordinates transport problems”. Em: **Annals of Nuclear Energy** 108 (2017), pp. 376–385. DOI: 10.1016/j.anucene.2017.04.009.
- [4] L. B. Barichello, K. Rui e R. D. da Cunha. “On the application of the ADO method to the solution of two-dimensional radiative transfer problems in anisotropic scattering media”. Em: **International Journal of Thermal Sciences** 179 (2022), p. 107685. DOI: 10.1016/j.ijthermalsci.2022.107685.
- [5] T. Binzoni et al. “The use of the Henyey–Greenstein phase function in Monte Carlo simulations in biomedical optics”. Em: **Physics in Medicine & Biology** 51.17 (2006), N313. DOI: 10.1088/0031-9155/51/17/N04.
- [6] L. Boltzmann. “Weitere studien über das wärmeleichgewicht unter gasmolekülen”. Em: **Kinetische Theorie II**. Springer, 1872, pp. 115–225.
- [7] S. Chandrasekhar. “The theory of axisymmetric turbulence”. Em: **Philosophical Transactions of the Royal Society of London. Series A, Mathematical and Physical Sciences** 242.855 (1950), pp. 557–577. DOI: 10.1098/rsta.1950.0010.
- [8] W. M. Cornette e J. G. Shanks. “Physically reasonable analytic expression for the single-scattering phase function”. Em: **Applied optics** 31.16 (1992), pp. 3152–3160. DOI: 10.1364/AO.31.003152.
- [9] T. G. Cortelini e L. B. Barichello. “Esquemas de Quadratura na Esfera Unitária: Uma Aplicação em Tomografia Ótica”. Em: **Proceeding Series of the Brazilian Society of Computational and Applied Mathematics** 9 (2022).
- [10] R. D. Da Cunha. **Programação Científica Em Fortran 95**. Clube de Autores, 2011.
- [11] L. G. Henyey e J. L. Greenstein. “Diffuse radiation in the galaxy”. Em: **The Astrophysical Journal** 93 (1941), pp. 70–83. DOI: 10.1086/144246.
- [12] A. D. Klose et al. “Optical tomography using the time-independent equation of radiative transfer—Part 1: forward model”. Em: **Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer** 72.5 (2002), pp. 691–713. DOI: 10.1016/S0022-4073(01)00150-9.
- [13] E. E. Lewis e W. F. Miller. **Computational methods of neutron transport**. John Wiley e Sons, Inc., New York, NY, 1984.
- [14] J. R. Lorenzo. **Principles of diffuse light propagation: light propagation in tissues with applications in biology and medicine**. World Scientific, 2012. DOI: 10.1142/7609.
- [15] M. F. Modest e S. Mazumder. **Radiative heat transfer**. Academic press, 2021. DOI: 10.1016/C2018-0-03206-5.
- [16] K. Rui, L. B. Barichello e R. D. da Cunha. “Recent Studies on Two-Dimensional Radiative Transfer Problems in Anisotropic Scattering Media”. Em: **Journal of Computational and Theoretical Transport** 49.5 (2020), pp. 233–266. DOI: 10.1080/23324309.2020.1806076.
- [17] J. K. Shultis e R. E. Faw. **Radiation shielding and radiological protection**. Springer, 2010, pp. 1313–1448. DOI: 10.1007/978-0-387-98149-9_11.