Simulações Numéricas de Problemas Envolvendo a Equação do Transporte Radiativo

Fernando Groff, Orientador: Esequia Sauter

Universidade Federal do Rio Grande do Sul

fernandogroff@outlook.com.br

Instituto de MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA UFRGS

Introdução

Introduzida por Ludwig Boltzmann no século XIX, a equação do transporte e suas formas lineares ou linearizadas desempenham um papel fundamental no estudo de diversos fenômenos, como no transporte de nêutrons, na transferência radiativa e na dinâmica dos gases rarefeitos. Devido à complexidade analítica destas equações, que envolvem sete variáveis independentes (tempo, espaço, direção e frequência), a simulação numérica destes fenômenos tende a ser bastante complicada, mesmo diante da capacidade computacional hoje disponível. Tal dificuldade motivou o estudo de problemas mais simples, onde são feitas simplificações no domínio ou no comportamento do fenômeno. Neste trabalho, consideramos o problema de transferência radiativa em um meio anisotrópico, descrito pela equação estacionária do transporte unidimensional abaixo:

$$\mu\frac{\partial I}{\partial y}+\lambda I=\frac{1}{2}\int_{-1}^{1}\sigma(\mu,\mu')I(y,\mu')d\mu'+Q(y,\mu),\quad y\in(0,L), \tag{1}$$

onde y é a variável espacial, μ é o cosseno do ângulo formado entre a direção de propagação e o eixo y, $I=I(y,\mu)$ é a intensidade radiativa, $Q=Q(y,\mu)$ é o termo fonte, λ é o coeficiente de extinção total e $\sigma(\mu,\mu')$ é o núcleo de espalhamento, que supomos ser da forma:

$$\sigma(\mu,\mu')=\sum_{l=0}^{t}\sigma_l P_l(\mu)P_l(\mu'),$$

sendo P_l os polinômios de Legendre de ordem l e σ_l constantes reais.

Aqui, consideramos uma fronteira semi-reflexiva. Portanto, a equação (1) fica completa com as condições de contorno:

$$I(0,\mu)=\rho_0(\mu)I(0,-\mu)+(1-\rho_0(\mu))B_0,\qquad \mu>0, \tag{2}$$

$$I(L,\mu)=\rho_L(\mu)I(L,-\mu)+(1-\rho_L(\mu))B_L,\qquad \mu<0, \tag{3}$$

onde $\rho_0(\mu)$ e $\rho_L(\mu)$ são os coeficientes de reflexão e B_0 e B_L são a contribuição de fronteira.

Uma das dificuldades que se encontra ao estudar o problema acima está em aproximar a integral angular. Por isso, além do estudo de métodos adequados para resolver a equação (1), focamos nossa atenção também no estudo de quadraturas numéricas. Em particular, as quadraturas de Gauss-Legendre e Clenshaw-Curtis. A quadratura de Gauss-Legendre tem sido amplamente utilizada em problemas de transporte, porém não encontramos trabalhos que aplicassem a quadratura de Clenshaw-Curtis, motivando um estudo de suas propriedades.

Método

Dentre as diversas abordagens existentes para resolver problemas de transporte, optamos por utilizar o método das Ordenadas Discretas, que consiste em escolher um conjunto de direções e aproximar a integral angular por uma quadratura numérica. Tal procedimento nos permite reescrever o problema (1)-(3) como um sistema de EDO's, isto é,

$$\mu_i\frac{dI_i}{dy}+\lambda I_i=\frac{1}{2}\sum_{l=0}^{t}\left[\sigma_l P_l(\mu_i)\sum_{j=-M}^{M}\omega_j P_l(\mu_j)I(y,\mu_j)\right]+Q_i,\quad y\in(0,L) \tag{4}$$

$$I_i(0)=\rho_0(\mu_i)I_{-i}(0)+(1-\rho_0(\mu_i))B_0,\qquad \mu_i>0, \tag{5}$$

$$I_i(L)=\rho_L(\mu_i)I_{-i}(L)+(1-\rho_L(\mu_i))B_L,\qquad \mu_i<0, \tag{6}$$

onde μ_i e ω_i, $i=-M,...,M$, são, respectivamente, as ordenadas e pesos da quadratura escolhida (no nosso caso, as quadraturas de Gauss-Legendre e Clenshaw-Curtis).

O método das Ordenadas Discretas engloba uma família de métodos que se diferenciam na forma de tratar a variável espacial. Aqui, usamos o método Nodal, onde é possível encontrar relações de recorrência para a intensidade radiativa, resultando em um esquema iterativo que converge para a solução aproximada do problema. No caso do uso de quadraturas simétricas, que nos permite fazer algumas simplificações com respeito à discretização angular, estas relações de recorrência são:

$$I_i^1=\rho_0(\mu_i)I_{-i}^1+(1-\rho_0(\mu_i))B_0,\qquad i=1,2,...,M,$$

$$I_i^{k+1}=e^{\frac{\lambda}{\mu_i}(y_k-y_{k+1})}I_i^k+\frac{S_i^{k+1/2}}{\lambda}\left(1-e^{\frac{\lambda}{\mu_i}(y_k-y_{k+1})}\right),\quad i=1,2,...,M,\quad k=1,2,...,N,$$

e

$$I_{-i}^{N+1}=\rho_L(-\mu_i)I_i^{N+1}+(1-\rho_L(-\mu_i))B_L,\qquad i=1,2,...,M,$$

$$I_{-i}^{k}=e^{\frac{\lambda}{\mu_i}(y_k-y_{k+1})}I_{-i}^{k+1}+\frac{S_{-i}^{k+1/2}}{\lambda}\left(1-e^{\frac{\lambda}{\mu_i}(y_k-y_{k+1})}\right),\quad i=1,2,...,M,\quad k=N,...,2,1,$$

onde $I_{\pm i}^k=I(y_k,\pm\mu_i)$ e $S_{\pm i}^{k+1/2}$ é definido como

$$S_{\pm i}^{k+1/2}=\frac{1}{2}\left\{\frac{1}{2}\sum_{l=0}^{t}\left[\sigma_l P_l(\pm\mu_i)\sum_{j=1}^{M}\omega_j\left(P_l(-\mu_j)I_{-j}^k+P_l(\mu_j)I_j^k\right)\right]+Q_{\pm i}^k\right.$$
$$\left.+\frac{1}{2}\sum_{l=0}^{t}\left[\sigma_l P_l(\pm\mu_i)\sum_{j=1}^{M}\omega_j\left(P_l(-\mu_j)I_{-j}^{k+1}+P_l(\mu_j)I_j^{k+1}\right)\right]+Q_{\pm i}^{k+1}\right\}.$$

A implementação do código foi realizada através da linguagem Fortran 95, utilizando 4000 ordenadas e pesos para a discretização angular e 2000 intervalos para a discretização espacial. Estes valores foram escolhidos após realizarmos uma série de testes, onde se observou que a precisão do método já havia atingido seu limite, não havendo a necessidade de utilizar valores maiores.

Resultados

Os resultados numéricos gerados compreendem diferentes conjuntos de parâmetros, incluindo a equação de Fresnel para a reflexão. Como mencionado anteriormente, aproximamos a integral angular pelas quadraturas de Gauss-Legendre e Clenshaw-Curtis, indicadas nas tabelas abaixo por NGL (Nodal Gauss-Legendre) e NCC (Nodal Clenshaw-Curtis). Com o propósito de validar o método, os resultados obtidos foram comparados a resultados encontrados na literatura.

y		0.0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
$\sigma_0=0.1$	GFD_{400}	0.394085	0.308092	0.295597	0.322948	0.398183	0.599197
	NGL	0.394085	0.308092	0.295597	0.322948	0.398183	0.599197
	NCC	0.394085	0.308092	0.295597	0.322948	0.398183	0.599197
$\sigma_0=0.5$	GFD_{400}	0.547692	0.481334	0.476855	0.510642	0.589553	0.774877
	NGL	0.547690	0.481332	0.476853	0.510640	0.589551	0.774873
	NCC	0.547691	0.481332	0.476853	0.510640	0.589551	0.774873
$\sigma_0=0.9$	GFD_{400}	1.027922	1.035246	1.061086	1.104359	1.169499	1.285451
	NGL	1.027920	1.035244	1.061084	1.104356	1.169496	1.285447
	NCC	1.027920	1.035244	1.061084	1.104356	1.169496	1.285448

Tabela 1: Valores calculados para $\int_{-1}^{1}I(y,\mu)d\mu$ quando $Q\,(y)=0$, $\lambda=1$, $\rho_0=\rho_L=0.5$, $B_0=0.5$ e $B_L=1$, com $L=1$, e $\sigma=\sigma_0$, para diferentes valores de σ_0.

y		0.0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
$\sigma_2=-0.8$	GFD_{400}	1.420313	1.418733	1.316498	1.196469	1.082103	0.980052
	NGL	1.420312	1.418733	1.316498	1.196469	1.082102	0.980051
	NCC	1.420312	1.418733	1.316498	1.196469	1.082102	0.980052
$\sigma_2=-0.4$	GFD_{400}	1.422188	1.420928	1.317645	1.196410	1.081049	0.978640
	NGL	1.422188	1.420928	1.317645	1.196409	1.081048	0.978640
	NCC	1.422188	1.420928	1.317645	1.196409	1.081048	0.978640
$\sigma_2=0.4$	GFD_{400}	1.426277	1.425790	1.320271	1.196412	1.078875	0.975655
	NGL	1.426278	1.425790	1.320270	1.196411	1.078875	0.975655
	NCC	1.426278	1.425790	1.320270	1.196411	1.078875	0.975655
$\sigma_2=0.8$	GFD_{400}	1.428517	1.428410	1.321786	1.196498	1.077769	0.974080
	NGL	1.428518	1.428499	1.321786	1.196498	1.077768	0.974080
	NCC	1.428518	1.428500	1.321786	1.196498	1.077768	0.974080

Tabela 2: Valores calculados para $\int_{-1}^{1}I(y,\mu)d\mu$ quando $Q\,(y)=e^{-y}$, $\lambda=1$, $\rho_0=\rho_L=0.5$, $B_0=0.5$ e $B_L=0.25$, com $L=1$, e $\sigma=0.1+\sigma_2P_2(\mu)P_2(\mu')$, para diferentes valores de σ_2.

y		0.0	0.2	0.4	0.6	0.8	1.0
$\eta_1=1.1$	GFD_{400}	-0.299995	-0.137502	-0.006496	0.072206	0.073990	-0.033573
	NGL	-0.299997	-0.137503	-0.006497	0.072206	0.073990	-0.033572
	NCC	-0.299995	-0.137502	-0.006496	0.072207	0.073991	-0.033572
$\eta_1=1.3$	GFD_{400}	-0.207165	-0.067414	0.045887	0.110610	0.101018	-0.016279
	NGL	-0.207168	-0.067415	0.045886	0.110610	0.101018	-0.016277
	NCC	-0.207168	-0.067415	0.045886	0.110610	0.101018	-0.016277
$\eta_1=1.5$	GFD_{400}	-0.151257	-0.023878	0.078846	0.134400	0.116642	-0.008209
	NGL	-0.151256	-0.023877	0.078847	0.134400	0.116642	-0.008209
	NCC	-0.151254	-0.023876	0.078848	0.134401	0.116642	-0.008209

Tabela 3: Valores calculados para $\int_{-1}^{1}\mu I(y,\mu)d\mu$ quando $\rho_0(\mu)$ e $\rho_L(\mu)$ são dados pela equação de Fresnel, $Q\,(y)=-y^2+1$, $\lambda=1$, $\sigma=0.5+0.2P_1(\mu)P_1(\mu')$, $B_0=0.5$ e $B_L=1$, com $L=1$, e $\eta_2=1$ (meio externo), para diferentes valores de η_1 (meio interno).

Embora a quadratura de Gauss-Legendre tenha se mostrado ligeiramente superior durante nossos testes, podemos observar que o método gerou bons resultados para ambas quadraturas. De fato, ao compararmos com o método GFD_{400}, vemos que 5 dígitos de precisão foram obtidos. Além disso, para este problema o método não exigiu grandes esforços computacionais, convergindo rapidamente para as soluções.

Trabalhos Futuros

Apesar do vasto conhecimento adquirido ao longo dos anos, ainda existem desafios que motivam o estudo em teoria de transporte. Nosso objetivo é estender o método para casos mais gerais, onde o domínio é não-homogêneo e onde o comportamento dos fenômenos não varia no espaço apenas com a componente y, mas também com as componentes x e z (casos multidimensionais). Pretendemos também estudar a formulação integral do problema, bem como métodos a ela associados, como o método de Nyström.

Referências

[1] M. F. Modest. *Radiative Heat Transfer*. Acad. Press, San Diego, second edition, 2003.

[2] K.M.Case;P.F.Zweifel. *Linear transport theory*. Addison-Wesley Publishing Company, Massachusetts, 1967.

[3] E. Sauter, F. S. Azevedo, M. Thompson, and M. T. Vilhena. Solution of the one-dimensional transport equation by the vector green function method: Error bounds and simulation. *Applied Mathematics and Computation*, 219(24):11291–11301, 2013.

[4] C.Constanda;B.E.J.Bodmann;H.F.C.Velho. *Integral Methods in Science and Engineering: Progress in Numerical and Analytic Techniques*. Springer, New York, first edition, 2013.

FAPERGS

Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado do Rio Grande do Sul