

Técnicas de Matriz Resposta com Aproximações de Baixa Ordem Aplicadas a Problemas de Transporte de Fótons[☆]

Response Matrix Techniques with Low-Order Approximations Applied to Photon Transport Problems

Iram B. R. Ortiz[†], Susana M. Iglesias, Francisco B. S. Oliveira, Paulo E. Ambrósio, Dany S. Dominguez

Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional em Ciência e Tecnologia – Universidade Estadual de Santa Cruz, Ilhéus, Brasil

[†] **Autor correspondente:** ibrortiz@uesc.br

Resumo

Problemas relacionados à transferência radiativa e ao transporte de fótons são comumente encontrados em diversas disciplinas científicas e campos da engenharia, abrangendo desde a tomografia computadorizada e radioterapia até a astrofísica, testes não destrutivos de materiais e proteção radiológica, entre outras áreas. Ainda enfrentamos desafios nesse domínio, tais como a necessidade de dados nucleares mais precisos e abrangentes, a inclusão de geometrias realistas e complexas, e o desenvolvimento de algoritmos eficientes para resolver a equação de transporte de fótons como modelo matemático. Neste estudo, são introduzidas abordagens que empregam técnicas de matriz resposta com aproximações de baixa ordem para lidar com problemas relacionados ao transporte de fótons. Especificamente, são apresentados os métodos de Matriz Resposta - Constante Nodal (RM-CN) e Matriz Resposta - Nodal Linear Pleno (RM-FLN), considerando a função de fase isotrópica em geometria bidimensional Cartesiana, atmosfera cinza e formulação de ordenadas discretas (S_N) da equação de transporte de fótons. Avaliamos o desempenho desses métodos em termos de precisão ao resolver um problema modelo. Ambos os métodos de matriz de resposta produzem resultados altamente precisos mesmo em grades de discretização espacial mais amplas, sendo que os resultados mais promissores foram obtidos com o método RM-FLN. No entanto, é importante observar que o custo computacional é mais elevado em comparação com o método RM-CN para a mesma grade de discretização espacial. Finalmente, a formulação de ordenadas discretas efetivamente modela os efeitos de onda gerados entre as regiões absorventes do problema, e os efeitos de raios são mitigados na medida que aumenta a ordem da quadratura angular.

Palavras-chave

Métodos de Matriz Resposta Espectro Nodal • Formulação de Ordenadas Discretas • Transferência Radiativa

Abstract

Radiative transfer and photon transport problems are frequently encountered in various fields of science and engineering, ranging from computerized tomography and radiotherapy to astrophysics, non-destructive testing of materials, radiological protection, among other domains. Challenges persist in this field, including the need for more accurate and comprehensive data, the incorporation of more realistic and complex geometries, and the development of efficient algorithms to solve the photon transport equation as a mathematical model. This work introduces approaches that employ response matrix techniques with low-order approximations to address problems related to photon

[☆] Este artigo é uma versão estendida do trabalho apresentado no XXVI ENMC Encontro Nacional de Modelagem Computacional e XIV ECTM Encontro de Ciência e Tecnologia de Materiais, ocorridos em Nova Friburgo – RJ, de 25 a 27 de outubro de 2023.

transport. Specifically, the Response Matrix - Nodal Constant (RM-CN) and Response Matrix - Full Linear Nodal (RM-FLN) methods are presented, considering the isotropic phase function in Cartesian two-dimensional geometry, gray atmosphere, and the discrete ordinates (S_N) formulation of the photon transport equation. The performance of the methods is evaluated in terms of accuracy by solving a model problem. Both response matrix methods generate accurate results for coarse spatial discretization grids, with the best results reported by the RM-FLN method. However, the computational cost is higher when compared to the RM-CN method for the same spatial discretization grid. Finally, the discrete ordinates formulation correctly models the wave effects generated between the absorbing regions of the problem, and ray effects are mitigated as the angular order of the formulation increases.

Keywords

Response Matrix Spectral Nodal Methods • Discrete Ordinate Formulation • Radiative Transfer

1 Introdução

A modelagem do transporte de fótons, e partículas neutras em geral, é de grande importância em diferentes áreas das ciências e das engenharias [1–4]. O transporte de fótons é modelado através dos tecidos humanos para a otimização do processamento em imagens tomográficas, para cálculos de distribuição de dose de radiação em pacientes com câncer e otimização de tratamentos com radioterapia, na modelagem da distribuição de energia depositada no interior de reatores nucleares para análises de conjuntos combustíveis, hastes de controle e blindagens. Na área da astrofísica, em análises de propagação da luz através de nuvens interestelares e/ou atmosferas de exoplanetas, otimização na eficiência de transmissão de luz mediante a modelagem do transporte de fótons através de lentes, entre muitas outras aplicações incluindo transferência de calor por radiação, testes não destrutivos, e geração imagens de raios gamma.

Os métodos de Monte Carlo e os métodos determinísticos são as duas abordagens comumente usadas para resolver problemas de transporte de fótons. Os métodos de Monte Carlo são usados para simular sistemas complexos, porém o custo computacional é muito elevado e as simulações podem levar muito tempo para gerar resultados satisfatórios devido à necessidade de médias estatísticas. Por outro lado, os métodos determinísticos baseiam-se em resolver numericamente a equação de transporte para geometrias não muito complexas, requerem de recursos computacionais menores e as simulações são mais rápidas quando comparados com os métodos probabilísticos. O uso de métodos determinísticos de difusão, harmônicos esféricos, e ordenadas discretas aplicados a problemas de transporte e transferência radiativa é amplamente abordado na literatura científica [5–9].

Dentre os desafios que ainda existem na resolução de problemas de transporte de fótons e transferência radiativa está o desenvolvimento de algoritmos eficientes para resolver a equação de transporte [6, 9, 10]. O objetivo deste trabalho é apresentar os esquemas numéricos de tipo matriz resposta com aproximações de baixa ordem, constante nodal e linear nodal pleno, para resolver problemas de transporte de fótons em atmosfera cinza, geometria bidimensional Cartesiana, espalhamento isotrópico e fótons de baixas energias usando como modelo matemático a formulação em ordenadas discretas (S_N) da equação de transporte. Nas seguintes seções apresentamos o modelo matemático de transporte de fótons na formulação S_N , introduzimos os esquemas numéricos de tipo matriz resposta - espectro nodal para problemas bidimensionais de transferência radiativa, função de fase isotrópica e fótons de baixas energias, e analisamos o desempenho em quanto a precisão desses métodos para grades grossas de discretização espacial e diferentes ordens da formulação S_N em um problema de treliça modelo em atmosfera cinza.

2 Formulação Matemática

A equação linearizada de Boltzmann constitui um modelo matemático usado frequentemente em problemas de transporte de fótons e transferência radiativa [11]:

$$\begin{aligned} & \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi(\mathbf{R}, E, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma_t(\mathbf{R}, E) \psi(\mathbf{R}, E, \boldsymbol{\Omega}) = \\ & = \int_0^\infty dE' \int_{4\pi} d\boldsymbol{\Omega}' f(\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}, E' \rightarrow E) c(E') \sigma_t(\mathbf{R}, E') \psi(\mathbf{R}, E', \boldsymbol{\Omega}') + Q(\mathbf{R}, E, \boldsymbol{\Omega}). \end{aligned} \quad (1)$$

A Equação (1) constitui uma equação integro-diferencial linear cuja variável dependente $\psi(\mathbf{R}, E, \boldsymbol{\Omega})$ é o fluxo angular de fótons. $\mathbf{R} = (x, y, z)$, E , $\boldsymbol{\Omega} = (\theta, \varphi)$, representam a posição, energia cinética e direção pela que viajam os fótons, respectivamente. $\sigma_t(\mathbf{R}, E)$ constitui a seção de choque macroscópica total e está relacionada à probabilidade por unidade de comprimento que um fóton com energia E sofrerá uma interação ao migrar uma distância unitária no meio hospedeiro. $c(E')$ representa a multiplicidade total (número de fótons que aparecem como resultado de um evento) e a quantidade $f(\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}, E' \rightarrow E) c(E') \sigma_t(\mathbf{R}, E')$ constitui a probabilidade de ocorrência em que um fóton com energia E' e direção $\boldsymbol{\Omega}'$ gere, resultado de um evento, outro fóton com energia E em dE e direção $\boldsymbol{\Omega}$ em $d\boldsymbol{\Omega}$, onde $f(\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}, E' \rightarrow E)$ representa uma função de probabilidade.

Em problemas de transferência radiativa, a Eq. (1) é representada em termos de intensidade energética, i.e, o produto da energia cinética e o fluxo angular de fótons. O termo de fonte no lado direito refere-se à produção de fótons resultantes das interações de espalhamento de Compton e/ou formação de pares (fótons de altas energias). Para fótons de baixa energia, o termo de produção é interpretado como a emissão resultado de interações de espalhamento onde, $f(\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}, E' \rightarrow E)c(E')\sigma_t(\mathbf{R}, E')$ representa o kernel de espalhamento, e $f(\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}, E' \rightarrow E)c(E')$ constitui a função de fase do kernel [9]. As funções de distribuição de Rayleigh, de iluminação planetária, de distribuição de Klein-Nishina são exemplos comumente usados como funções de fase [11, 12]. Para problemas em atmosfera cinza, i.e., um grupo de energia, espalhamento isotrópico e fótons de baixas energias, a Eq. (1) se transforma em

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla \psi(\mathbf{R}, \boldsymbol{\Omega}) + \sigma_t(\mathbf{R})\psi(\mathbf{R}, \boldsymbol{\Omega}) = \frac{\sigma_s(\mathbf{R})}{4\pi} \int_{4\pi} d\boldsymbol{\Omega}' \psi(\mathbf{R}, \boldsymbol{\Omega}') + Q(\mathbf{R}, \boldsymbol{\Omega}), \tag{2}$$

onde $c(E')\sigma_t(\mathbf{R}, E') = c\sigma_t(\mathbf{R}) = \sigma_s(\mathbf{R})$, e $f(\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}, E' \rightarrow E) = f(\boldsymbol{\Omega}' \cdot \boldsymbol{\Omega}) = 1/4\pi$. A formulação de ordenadas discretas (S_N) é uma das abordagens comumente usadas na modelagem problemas de transporte de fótons, e consiste na discretização do domínio contínuo da variável angular por um conjunto de m valores discretos denominados ordenadas discretas. O termo integral da fonte de espalhamento é aproximado por uma fórmula de quadratura da forma [11, 13]

$$\frac{\sigma_s(\mathbf{R})}{4\pi} \int_{4\pi} d\boldsymbol{\Omega}' \psi(\mathbf{R}, \boldsymbol{\Omega}') = \frac{\sigma_s(\mathbf{R})}{4\pi} \sum_{n=1}^M \omega_n \psi(\mathbf{R}, \boldsymbol{\Omega}_n), \tag{3}$$

onde ω_n representam os pesos da quadratura utilizada. Em consequência, a Eq. (2) pode ser escrita na formulação S_N como

$$\boldsymbol{\Omega}_n \cdot \nabla \psi_m(\mathbf{R}) + \sigma_t(\mathbf{R})\psi_m(\mathbf{R}) = \frac{\sigma_s(\mathbf{R})}{4\pi} \sum_{n=1}^M \omega_n \psi_n(\mathbf{R}) + Q(\mathbf{R}), \tag{4}$$

onde $\psi_m(\mathbf{R}) = \psi(\mathbf{R}, \boldsymbol{\Omega}_m)$. As direções angulares $\boldsymbol{\Omega}_m = (\mu_m, \eta_m)$ constituem as ordenadas discretas, $\mu_m = \cos \theta_m$, $\theta_m = \sqrt{1 - \mu_m^2} \sin \varphi_m$, onde θ_m representa o ângulo polar e φ_m o ângulo azimutal. Na Eq. (4) assumimos uma fonte interna isotrópica, i.e., $Q(\mathbf{R}) = Q(\mathbf{R}, \boldsymbol{\Omega}_m)/4\pi$. Neste trabalho, utilizamos a quadratura de simetria de níveis (LQ_N), que consiste em uma distribuição simétrica de coordenadas angulares discretas no interior de uma esfera unitária, onde os pesos da quadratura são obtidos de forma tal que a integral ao longo da esfera seja exatamente igual aos valores computados pela fórmula de quadratura [13]. Na Fig. 1 mostramos as direções discretas permitidas nas formulações S_2 e S_4 usando a quadratura LQ_N .

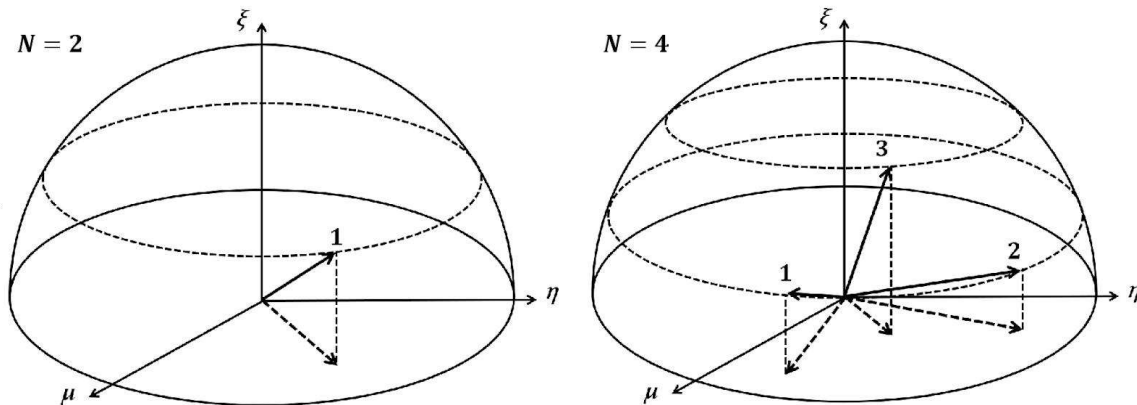


Figura 1: Direções discretas no primeiro octante da quadratura de simetria de níveis (LQ_N) nas formulações S_2 e S_4 .

3 Esquemas Numéricos do Tipo Matriz Resposta

Neste trabalho nos limitamos à resolução de problemas em geometria bidimensional Cartesiana. Em consequência, definimos um domínio retangular D com comprimento L e largura H dividido em $I \times J$ células espaciais de

comprimento ℓ_i e largura h_j , e reescrevemos a Eq. (4) para cada uma das células na forma

$$\mu_m \frac{\partial}{\partial x} \psi_m(x, y) + \eta_m \frac{\partial}{\partial y} \psi_m(x, y) + \sigma_{t,i,j} \psi_m(x, y) = \frac{\sigma_{s0,i,j}}{4} \sum_{n=1}^M \omega_n \psi_n(x, y) + Q_{i,j}, \quad (5)$$

onde $(x, y) \in D_{i,j}$, $x_{i-1/2} < x < x_{i+1/2}$, $y_{j-1/2} < y < y_{j+1/2}$, $m = 1, 2, \dots, M$, e as seções de choque macroscópicas total, de espalhamento e a fonte externa são consideradas constantes no interior de cada célula de discretização espacial.

Os esquemas numéricos do tipo matriz resposta para problemas multidimensionais e formulação S_N são baseados nas equações S_N integradas transversalmente obtidas usando a técnica de integração transversal na Eq. (5) [14]. As equações para os momentos de ordem zero e primeira ordem do fluxo angular de fótons são definidas como

$$\begin{aligned} \frac{\mu_m}{\sigma_{t,i,j}} \frac{d}{dx} \hat{\psi}_{m,j}(x) + \hat{\psi}_{m,j}(x) &= \frac{c_{0,i,j}}{4} \sum_{n=1}^M \omega_n \hat{\psi}_{n,j}(x) + \frac{Q_{i,j}}{\sigma_{t,i,j}} - \\ &- \frac{\eta_m}{\sigma_{t,i,j} h_j} [\psi_m(x, y_{j+1/2}) - \psi_m(x, y_{j-1/2})], \end{aligned} \quad (6)$$

$$\begin{aligned} \frac{\eta_m}{\sigma_{t,i,j}} \frac{d}{dy} \tilde{\psi}_{m,i}(y) + \tilde{\psi}_{m,i}(y) &= \frac{c_{0,i,j}}{4} \sum_{n=1}^M \omega_n \tilde{\psi}_{n,i}(y) + \frac{Q_{i,j}}{\sigma_{t,i,j}} - \\ &- \frac{\mu_m}{\sigma_{t,i,j} \ell_i} [\psi_m(x_{i+1/2}, y) - \psi_m(x_{i-1/2}, y)], \end{aligned} \quad (7)$$

$$\begin{aligned} \frac{\mu_m}{\sigma_{t,i,j}} \frac{d}{dx} \hat{\phi}_{m,j}(x) + \hat{\phi}_{m,j}(x) &= \frac{c_{0,i,j}}{4} \sum_{n=1}^M \omega_n \hat{\phi}_{n,j}(x) + \frac{6\eta_m}{\sigma_{t,i,j} h_j} \hat{\psi}_{m,j}(x) - \\ &- \frac{3\eta_m}{\sigma_{t,i,j} h_j} [\psi_m(x, y_{j+1/2}) - \psi_m(x, y_{j-1/2})], \end{aligned} \quad (8)$$

$$\begin{aligned} \frac{\eta_m}{\sigma_{t,i,j}} \frac{d}{dy} \tilde{\phi}_{m,i}(y) + \tilde{\phi}_{m,i}(y) &= \frac{c_{0,i,j}}{4} \sum_{n=1}^M \omega_n \tilde{\phi}_{n,i}(y) + \frac{6\mu_m}{\sigma_{t,i,j} \ell_i} \tilde{\psi}_{m,i}(y) - \\ &- \frac{3\mu_m}{\sigma_{t,i,j} \ell_i} [\psi_m(x_{i+1/2}, y) - \psi_m(x_{i-1/2}, y)], \end{aligned} \quad (9)$$

onde $\hat{\psi}_{m,j}(x)$, $\tilde{\psi}_{m,i}(y)$, e $\hat{\phi}_{m,j}(x)$, $\tilde{\phi}_{m,i}(y)$ representam os momentos de ordem zero e primeira ordem, respectivamente. As Eqs. (6) e (8) representam as equações integradas transversalmente em y , e as Eqs. (7) e (9) correspondem à integração em x .

Neste trabalho, apresentamos os métodos Matriz Resposta - Constante Nodal (RM-CN) e Matriz Resposta - Linear Nodal Pleno (RM-FLN). Em ambos casos, o termo de produção é tratado analiticamente, e os termos de fugas transversais são aproximados usando expansões polinomiais de Legendre. No método RM-CN é utilizada uma aproximação constante, usando polinômios de Legendre de ordem zero nos termos de fugas transversais nas equações SN integradas transversalmente de ordem zero:

$$\psi_m(x, y_{j\pm 1/2}) \cong \tilde{\psi}_{m,i,j\pm 1/2}, \quad (10)$$

$$\psi_m(x_{i\pm 1/2}, y) \cong \hat{\psi}_{m,i\pm 1/2,j}. \quad (11)$$

Por outro lado, no método RM-FLN são usadas aproximações lineares baseadas nos polinômios de Legendre de primeira ordem nos termos de fugas nas equações SN integradas transversalmente de ordem zero e primeira ordem:

$$\psi_m(x, y_{j\pm 1/2}) \cong \tilde{\psi}_{m,i,j\pm 1/2} + \frac{2(x - x_i)}{\ell_i} \tilde{\phi}_{m,i,j\pm 1/2}, \quad (12)$$

$$\psi_m(x_{i\pm 1/2}, y) \cong \hat{\psi}_{m,i\pm 1/2,j} + \frac{2(y - y_j)}{h_j} \hat{\phi}_{m,i\pm 1/2,j}. \quad (13)$$

As equações S_N integradas transversalmente com aproximações nos termos de fugas transversais resultantes representam um sistema linear de equações diferenciais cuja solução pode ser escrita na forma

$$X_{m,p}(z) = X_{m,p}^h(z) + X_{m,p}^p(z), \quad (14)$$

onde $X_{m,p}^h(z)$ e $X_{m,p}^p(z)$ representam as componentes homogênea e particular da solução, respectivamente. $(z, p) = (x, i)$ ou (y, j) , e $X_{m,p}(z)$ carrega os momentos do fluxo angular de ordem zero e primeira ordem. A componente homogênea pode ser obtida a partir do conjunto de autovalores e autovetores que conformam o espaço nulo do operador associado ao sistema de equações S_N homogeneizadas, e a componente particular é calculada utilizando a técnica de coeficientes a determinar.

Uma vez obtidas as expressões gerais para os momentos de fluxo angular de ordem zero e primeira ordem, podemos aplicar a técnica de matriz resposta. A metodologia baseia-se no fato de que os momentos do fluxo angular nas direções emergentes nos extremos da célula de discretização espacial podem ser calculados diretamente por meio de uma transformação linear aplicada nos momentos do fluxo angular nas direções incidentes [15], i. e.

$$\mathbf{F}^{out} = \mathbf{RM} \times \mathbf{F}^{in} + \mathbf{P}, \quad (15)$$

onde \mathbf{F}^{out} e \mathbf{F}^{in} representam os momentos do fluxo angular emergentes e incidentes nos extremos das células de discretização espacial, respectivamente. \mathbf{RM} e \mathbf{P} são a matriz resposta e o vetor associado à fonte interna. No caso do método RM-CN, os vetores de saída e de entrada contém somente os momentos do fluxo angular de ordem zero nas direções x e y , e a dimensão da matriz resposta resultante é de $2M \times 2M$. Por outro lado, os vetores de fluxo emergente e incidente incluem os momentos do fluxo angular de ordem zero e primeira ordem no método RM-FLN e, em consequência, obtemos uma matriz resposta de dimensão $4M \times 4M$.

A continuação, resolvemos um problema modelo de treliça em geometria bidimensional Cartesiana, espalhamento isotrópico e atmosfera cinza. Analisamos o desempenho dos métodos de matriz resposta RM-CN e RM-FLN para malhas grossas e diferentes ordens de quadratura, e comparamos os resultados numéricos com os valores gerados pelo método convencional Diamond Difference (DD) [13].

4 Resultados e Discussão

Como problema modelo utilizamos a configuração de treliça em atmosfera cinza proposta por McClarren e Hauck [7]. O domínio do problema é um quadrado de 7 cm de lado, num meio espalhador puro, com regiões altamente absorvedoras de fótons e condições de tipo vácuo nos contornos. Na Tabela 1 listamos as propriedades dos materiais do problema e na Fig. 2 (superior esquerda) mostramos a configuração geométrica.

Tabela 1: Propriedades materiais usadas no problema modelo.

Região	$\sigma_t [cm^{-1}]$	$\sigma_s [cm^{-1}]$	$Q [cm^{-2}s^{-1}]$
Preto (Espalhador)	1.0	0.99	0.0
Branco (Absorvedor)	10.0	0.0	0.0
Vermelho (Fonte)	1.0	0.99	1.0

Na Figura 2 são mostradas as soluções do problema geradas pelo método RM-CN para as formulações S_4 , S_8 e S_{12} , e usando uma grade de discretização espacial de 350×350 nodos. Como critério de convergência, consideramos o desvio relativo máximo do fluxo escalar entre duas iterações consecutivas inferior a 10^{-5} . Podem-se apreciar efeitos de onda bem definidos e feixes de fótons vazando os cantos entre as regiões absorventes. Em [7], observa-se que esses comportamentos não são capturados corretamente pelos modelos de difusão e harmônicos esféricos de baixa ordem quando comparados com os métodos de Monte Carlo e ordenadas discretas. Por outro lado, os efeitos de raios são predominantes nas formulações S_N , especialmente para aproximações de baixa ordem na quadratura anular. Esses efeitos podem ser atenuados aumentando a ordem da quadratura angular ou aplicando diferentes técnicas de mitigação de efeitos de raios.

Na Tabela 2 reportamos os fluxos escalares e os desvios relativos percentuais nos detectores do problema variando a grade de discretização espacial e a ordem da quadratura. Como solução de referência tomamos os resultados numéricos gerados pelo método Função Espectral de Green - Constante Nodal (SGF-CN) [14] para uma grade de discretização espacial de 350×350 nodos. Os desvios relativos entre as formulações S_4 e S_8 , tomando como referência os valores reportados para a formulação S_{12} no detector D1 são de 22.18% e 2.65%, respectivamente. Devido às condições de simetria do problema, os fluxos de fótons nos detectores D2 e D3 são idênticos. É observado um alto desempenho dos métodos de matriz resposta enquanto a precisão quando comparados com os resultados gerados pelo método DD convencional em malha grossa. Os melhores resultados são os reportados pelo método RM-FLN enquanto a precisão para todas as ordens de quadratura. Porém, é identificado um leve aumento no custo computacional em relação ao método RM-CN. Esses resultados são justificados pelas aproximações nos termos de fugas

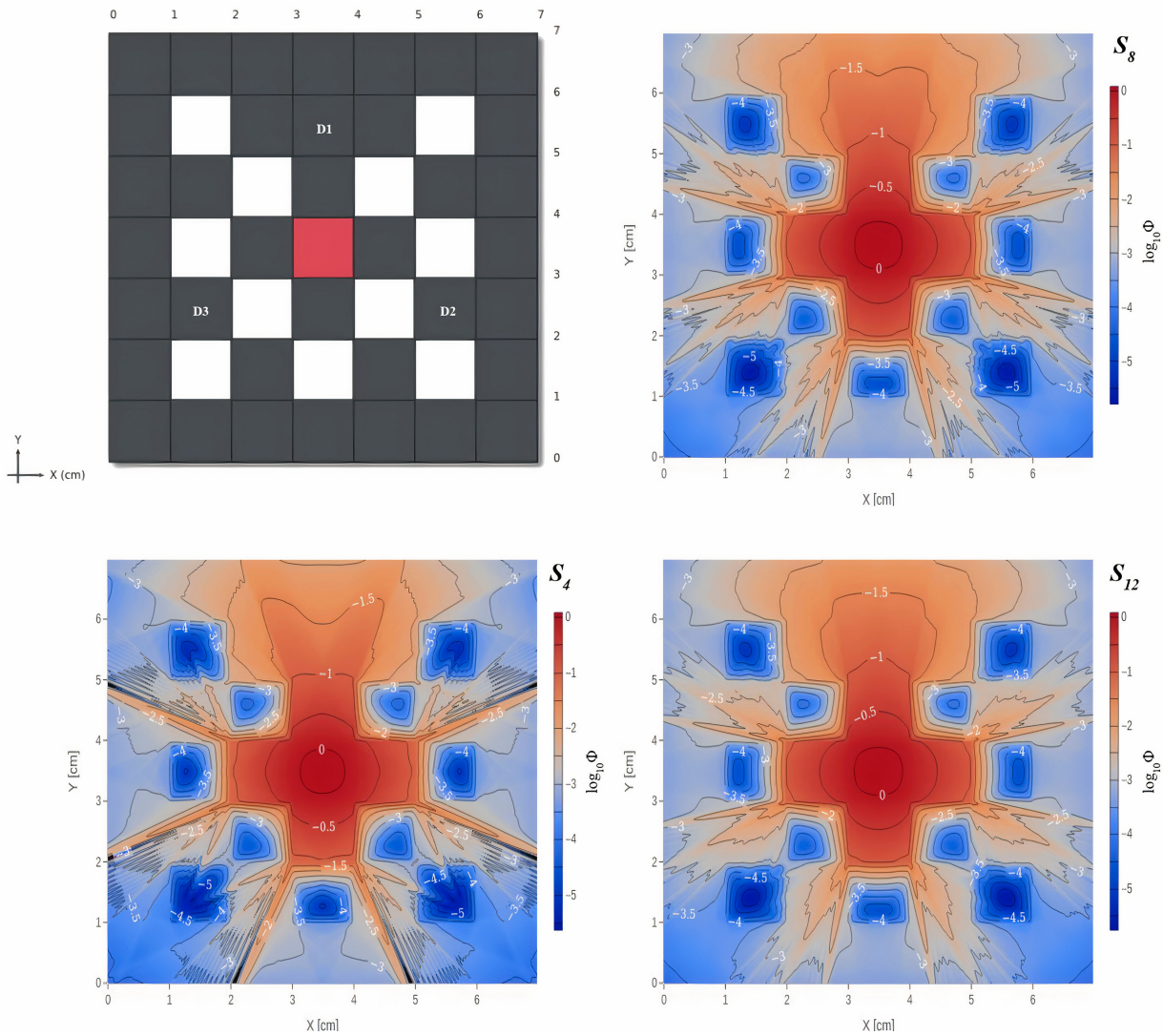


Figura 2: Domínio do problema modelo (superior esquerda) e distribuição do fluxo escalar de fótons gerado pelo método RM-CN nas formulações S_4 , S_8 e S_{12} , e grade de discretização espacial de 350×350 nodos.

transversais sustentadas neste método e o aumento no número de operações de ponto flutuante devido ao aumento da dimensão da matriz resposta neste método. Os resultados numéricos demonstraram boa concordância com os reportados em [7] para este problema modelo.

5 Conclusões

Neste trabalho apresentamos os esquemas numéricos de tipo matriz resposta - espectro nodal com aproximações constante e linear nos termos de fuga transversal nas equações S_n integradas transversalmente. Estes esquemas, foram desenvolvidos inicialmente para resolver problemas de transporte de nêutrons, e agora são aplicados a problemas de transferência radiativa com função de fase isotrópica e atmosfera cinza. Na resolução do problema modelo observamos que a formulação de ordenadas discretas modela corretamente os efeitos de onda gerados entre as regiões absorventes e os efeitos de raios são mitigados na medida que a ordem da quadratura aumenta. Ambos métodos de matriz resposta - espectro nodal geram resultados precisos para grades de discretização espacial grossas, e os melhores resultados foram os reportados pelo método RM-FLN devido ao uso de uma aproximação de maior ordem nos termos de fugas transversais. No entanto, o custo computacional, caracterizado pelo tempo de CPU e o consumo de memória, do método RM-FLN é superior quando comparado com o método RM-CN para a mesma grade de discretização. Propomos para trabalhos futuros, a análise detalhada do desempenho computacional dos métodos matriz resposta espectro nodal aplicados em outros problemas modelos de transferência radiativa, usando diferentes funções de fase e/ou aproximação de multigrupo.

Tabela 2: Resultados numéricos gerados pelos métodos DD, RM-CN, e RM-FLN para o problema modelo de treliça em atmosfera cinza.

Formulação	Grade	Método	CPU(s)	D1 ($cm^{-2}s^{-1}$)	D2 ($cm^{-2}s^{-1}$)
S_4	350×350	Ref.	4.1858e+1	6.5522e-2	5.2590e-3
		DD	2.0137e-3	-6.5476e-2 (199.93%)	-9.1381e-2 (>1000%)
	7×7	RM-CN	1.1464e-2	4.8539e-2 (25.93%)	4.5117e-3 (14.22%)
		RM-FLN	3.6594e-2	6.7309e-2 (2.73%)	5.5908e-3 (6.31%)
S_8	350×350	Ref.	4.2506e+2	8.1972e-2	4.5531e-3
		DD	7.0450e-3	-4.7724e-2 (158.22%)	-8.8547e-2 (>1000%)
	7×7	RM-CN	1.2080e-1	6.8445e-2 (16.51%)	4.2103e-3 (7.53%)
		RM-FLN	1.1019e+0	8.4898e-2 (3.57%)	4.4420e-3 (2.45%)
S_{12}	350×350	Ref.	1.5862e+3	8.4195e-2	4.5715e-3
		DD	1.0984e-2	-4.2642e-2 (150.65%)	-8.7125e-2 (>1000%)
	7×7	RM-CN	1.2454e+0	7.1921e-2 (14.58%)	4.1271e-3 (9.73%)
		RM-FLN	5.0541e+0	8.7386e-2 (3.8%)	4.4142e-3 (3.45%)

6 Agradecimentos

Os autores gostariam de expressar sua sincera gratidão ao PPGMC-UESC (Programa de Pós-Graduação em Modelagem Computacional da Universidade Estadual de Santa Cruz) pelo apoio financeiro e ao CCAM-UESC (Centro de Computação Avançada e Multidisciplinar - Universidade Estadual de Santa Cruz) pelos recursos computacionais oferecidos, ambos contribuíram para a conclusão bem-sucedida deste trabalho.

Referências

- [1] O. N. Vassiliev, T. A. Wareing, J. McGhee, G. Failla, M. R. Salehpour, e F. Mourtada, “Validation of a new grid-based Boltzmann equation solver for dose calculation in radiotherapy with photon beams,” *Physics in Medicine & Biology*, vol. 55, no. 3, pp. 581–598, 2010. Disponível em: <https://dx.doi.org/10.1088/0031-9155/55/3/002>
- [2] J. Nuyts, B. D. Man, J. A. Fessler, W. Zbijewski, e F. J. Beekman, “Modelling the physics in the iterative reconstruction for transmission computed tomography,” *Physics in Medicine & Biology*, vol. 58, no. 12, pp. R63–R96, 2013. Disponível em: <https://dx.doi.org/10.1088/0031-9155/58/12/R63>
- [3] A. M. Oliva e H. Alves Filho, “Spectral-nodal deterministic methodology for neutron shielding calculations using the X,Y - geometry multigroup transport equation in the discrete ordinates formulation,” *VETOR*, vol. 31, no. 1, pp. 72–83, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.14295/vetor.v31i1.13472>
- [4] M. C. Betancourt, L. R. Mazaira, C. R. G. Hernández, D. Dominguez, e C. A. B. O. Lira, “Neutronic simulation of the iPWR nuclear core using a SERPENT code,” *VETOR*, vol. 31, no. 1, pp. 84–93, 2021. Disponível em: <https://doi.org/10.14295/vetor.v31i1.13575>

- [5] E. W. Larsen, G. Thommes, A. Klar, M. Seaid, e T. Gotz, “Simplified PN approximations to the equations of radiative heat transfer and applications,” *Journal of Computational Physics*, vol. 186, no. 2, pp. 652–675, 2002. Disponível em: <https://doi.org/10.1006/jcph.2002.7210>
- [6] B. D. Rodriguez, M. T. Vilhena, e B. E. Bodmann, “An overview of the boltzmann transport equation solution for neutrons, photons and electrons in cartesian geometry,” *Progress in Nuclear Energy*, vol. 53, no. 8, pp. 1119–1125, 2011, International Nuclear Atlantic Conference - INAC 2009. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2011.06.009>
- [7] T. G. McClarren e C. D. Hauck, “Robust and accurate filtered spherical harmonics expansions for radiative transfer,” *Journal of Computational Physics*, vol. 229, no. 16, pp. 5597–5614, 2010. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2010.03.043>
- [8] A. Buchan, A. Calloo, M. Goffin, S. Dargaville, F. Fang, C. Pain, e I. Navon, “A POD reduced order model for resolving angular direction in neutron/photon transport problems,” *Journal of Computational Physics*, vol. 296, pp. 138–157, 2015. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jcp.2015.04.043>
- [9] N. N. T. Mai, K. Kim, M. Lemaire, T. D. C. Nguyen, W. Lee, e D. Lee, “Analysis of several VERA benchmark problems with the photon transport capability of STREAM,” *Nuclear Engineering and Technology*, vol. 54, no. 7, pp. 2670–2689, 2022. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.net.2022.02.004>
- [10] A. Charette, J. Boulanger, e H. K. Kim, “An overview on recent radiation transport algorithm development for optical tomography imaging,” *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer*, vol. 109, no. 17, pp. 2743–2766, 2008. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.jqsrt.2008.06.007>
- [11] J. J. Duderstadt e W. R. Martin, *Transport Theory*, 1^a ed. New York: John Wiley & Sons, 1978.
- [12] S. Chandrasekhar, *Radiative Transfer*, 1^a ed. New York: Dover Publications, Inc., 1960.
- [13] E. Lewis e J. Miller, *Computational methods of neutron transport equation*, 1^a ed. New York: John Wiley & Sons, 1984.
- [14] R. C. Barros e E. W. Larsen, “A spectral nodal method for one-group X,Y-geometry discrete ordinates problems,” *Nuclear Science and Engineering*, vol. 111, no. 1, pp. 34–45, 1992. Disponível em: <https://doi.org/10.13182/NSE92-A23921>
- [15] O. P. Silva, M. R. Guida, H. A. Filho, e R. C. Barros, “A response matrix spectral nodal method for energy multigroup X,Y-geometry discrete ordinates problems in non-multiplying media,” *Progress in Nuclear Energy*, vol. 125, p. 103288, 2020. Disponível em: <https://doi.org/10.1016/j.pnucene.2020.103288>