

UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO GRANDE DO SUL  
INSTITUTO DE MATEMÁTICA E ESTATÍSTICA  
PROGRAMA DE PÓS-GRADUAÇÃO EM MATEMÁTICA APLICADA

**Formulação ADO para Problemas  
Unidimensionais de Transferência Radiativa  
Acoplados à Equação de Biotransferência de  
Calor com Aplicação à Hipertermia Induzida  
por Laser**

por

Fernando Groff

Dissertação submetida como requisito parcial  
para a obtenção do grau de  
Mestre em Matemática Aplicada

Profa. Dra. Liliane Basso Barichello  
Orientadora

Prof. Dr. Esequia Sauter  
Coorientador

Porto Alegre, maio de 2023

## CIP - CATALOGAÇÃO NA PUBLICAÇÃO

Groff, Fernando

Formulação ADO para Problemas Unidimensionais de Transferência Radiativa Acoplados à Equação de Biotransferência de Calor com Aplicação à Hipertermia Induzida por Laser / Fernando Groff.—Porto Alegre: PPGMAp da UFRGS, 2023.

91 p.: il.

Dissertação (mestrado)— Universidade Federal do Rio Grande do Sul, Programa de Pós-Graduação em Matemática Aplicada, Porto Alegre, 2023.

Orientadora: Barichello, Liliane Basso;

Coorientador: Sauter, Esequia

Dissertação: Matemática Aplicada: Teoria de Transporte de Partículas,  
Equação de Transferência Radiativa, Equação de Biotransferência de Calor, Método Analítico de Ordenadas Discretas, Hipertermia Induzida por Laser.

**Formulação ADO para Problemas Unidimensionais  
de Transferência Radiativa Acoplados à Equação de  
Biotransferência de Calor com Aplicação à  
Hipertermia Induzida por Laser**

por

Fernando Groff

Dissertação submetida ao Programa de Pós-Graduação em  
Matemática Aplicada do Instituto de Matemática e Estatística da  
Universidade Federal do Rio Grande do Sul, como requisito parcial para  
a obtenção do grau de

**Mestre em Matemática Aplicada**

Linha de Pesquisa: Teoria de Transporte de Partículas

Orientadora: Profa. Dra. Liliane Basso Barichello

Coorientador: Prof. Dr. Esequia Sauter

Banca examinadora:

Profa. Dra. Diomar Cristina Mistro  
UFSM

Prof. Dr. Helcio Rangel Barreto Orlande  
UFRJ

Prof. Dr. Cássio Baissvenger Pazinatto  
IFSul

Dissertação apresentada e aprovada em  
abril de 2023.

Prof. Dr. Lucas da Silva Oliveira  
Coordenador



## AGRADECIMENTOS

Aos meu pais, Cleonice e Dalmir, e à minha irmã, Bruna, pelo amor e carinho, pelo incentivo aos estudos e pelo apoio em todas as etapas da minha vida.

À minha namorada, Verônica, pelo amor, companheirismo e suporte nos momentos mais difíceis desta jornada.

À professora Liliane por sua dedicação e paciência e pelas valiosas contribuições para a elaboração deste trabalho.

Ao professor Esequia pelo conhecimento compartilhado e pela disponibilidade, desde os tempos de iniciação científica.

À UFRGS e ao PPGMAp pela oportunidade e por proporcionar as condições necessárias para a realização deste trabalho.

Ao CNPq pela bolsa de estudo concedida.



# SUMÁRIO

<b>LISTA DE FIGURAS</b> . . . . .	<b>xi</b>
<b>LISTA DE TABELAS</b> . . . . .	<b>xv</b>
<b>LISTA DE SIGLAS E SÍMBOLOS</b> . . . . .	<b>xvii</b>
<b>RESUMO</b> . . . . .	<b>xxiii</b>
<b>ABSTRACT</b> . . . . .	<b>xxv</b>
<b>1 INTRODUÇÃO</b> . . . . .	<b>1</b>
<b>2 MODELAGEM MATEMÁTICA DA TRANSFERÊNCIA DE CALOR EM TECIDOS BIOLÓGICOS</b> . . . . .	<b>7</b>
2.1 A equação de transferência radiativa em meios participativos . . . . .	7
2.1.1 Aproximações para a função de fase de espalhamento . . . . .	11
2.2 A equação de biotransferência de calor de Pennes . . . . .	13
2.3 Problema unidimensional acoplado . . . . .	15
<b>3 O MÉTODO ADO PARA A EQUAÇÃO DE TRANSFERÊNCIA RADIATIVA</b> . . . . .	<b>19</b>
3.1 Reformulação do problema via decomposição da intensidade . . . . .	20
3.1.1 Solução analítica para a componente singular da intensidade . . . . .	21
3.1.2 A equação de transferência radiativa para a componente não singular da intensidade . . . . .	23
3.2 Formulação ADO para a componente não singular da intensidade . . . . .	24

3.2.1	Solução da equação homogênea associada . . . . .	25
3.2.2	Solução particular via função de Green . . . . .	29
3.2.3	Coefficientes de superposição . . . . .	32
3.3	Quantidades de interesse: radiação incidente e fluxo radiativo . . . . .	35
<b>4</b>	<b>O MÉTODO DE VOLUMES FINITOS PARA A EQUAÇÃO DE BIOTRANSFERÊNCIA DE CALOR DE PENNES . . . . .</b>	<b>37</b>
4.1	Discretização da variável espacial . . . . .	38
4.1.1	Discretização espacial para pontos interiores . . . . .	40
4.1.2	Discretização espacial para pontos de fronteira . . . . .	40
4.1.3	Discretização espacial para pontos de interface . . . . .	42
4.1.4	Equação matricial para a discretização espacial . . . . .	44
4.2	Discretização da variável temporal . . . . .	44
<b>5</b>	<b>RESULTADOS . . . . .</b>	<b>47</b>
5.1	Verificação da formulação . . . . .	48
5.1.1	Problema 1: método ADO em meio multicamada com espalhamento isotrópico . . . . .	48
5.1.2	Problema 2: método ADO em meio homogêneo com espalhamento anisotrópico e incidência de radiação colimada . . . . .	50
5.1.3	Problema 3: método de Volumes Finitos em meio homogêneo com condições de contorno mistas . . . . .	52
5.2	Aplicação à hipertermia induzida por laser . . . . .	55



5.2.1	Problema 4: absorção da radiação laser em tecidos subcutâneos	55
5.2.2	Problema 5: absorção da radiação laser e distribuição de temperatura no tratamento de um tumor subcutâneo . . . . .	63
<b>6</b>	<b>CONCLUSÕES . . . . .</b>	<b>77</b>
	<b>REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS . . . . .</b>	<b>87</b>
 <b>APÊNDICES</b>		
<b>A</b>	<b>SOLUÇÃO ANALÍTICA PARA O PROBLEMA 3 . . . . .</b>	<b>89</b>



## LISTA DE FIGURAS

2.1	Intensidade radiativa refletida em um ponto de fronteira $\mathbf{r}_s$ . . . . .	10
2.2	Representação de tecidos biológicos com diferentes espessuras e propriedades via decomposição do meio em camada homogêneas. . . . .	16
4.1	Discretização espacial da $r$ -ésima camada do meio em $N_r$ pontos igualmente espaçados e definição dos volumes finitos $V_{r,j}$ em função dos pontos $z_{r,j}$ . . . . .	39
5.1	Problema 4: erro relativo entre a função de fase de Henyey-Greenstein exata e a aproximação em polinômios de Legendre com grau de anisotropia $L = 300$ : (a) $g = 0.8$ ; (b) $g = 0.9$ . . . . .	58
5.2	Problema 4: radiação absorvida pelos tecidos (normalizada por $q_0 = 20$ kW/m <sup>2</sup> ). Tecidos (a) sem nanopartículas; (b) com nanopartículas. Valores obtidos pelo método $ADO_N$ para as aproximações da função de fase de Henyey-Greenstein $HG_{300}$ , $DE_0$ e $DE_1$ e comparados aos publicados por Dombrovsky <i>et al.</i> [23] para os métodos de Monte Carlo (MC) com função de fase de Henyey-Greenstein e $P_1$ com aproximação Delta-Eddington isotrópica. . . . .	59
5.3	Problema 4: erros relativos para a radiação absorvida pelos tecidos calculada pelo método $ADO_N$ para a aproximação da função de fase Henyey-Greenstein $HG_{300}$ . Tecidos (a) sem nanopartículas; (b) com nanopartículas. Valores de referência calculados pelo método $ADO_{160}$ com função de fase $HG_{300}$ . . . . .	60

5.4	Problema 4: erros relativos para a radiação absorvida pelos tecidos calculada pelo método $ADO_N$ para a aproximação da função de fase Henyey-Greenstein $DE_0$ . Tecidos (a) sem nanopartículas; (b) com nanopartículas. Valores de referência calculados pelo método $ADO_{160}$ com função de fase $DE_0$ . . . . .	60
5.5	Problema 4: erros relativos para a radiação absorvida pelos tecidos calculada pelo método $ADO_N$ para a aproximação da função de fase Henyey-Greenstein $DE_1$ . Tecidos (a) sem nanopartículas; (b) com nanopartículas. Valores de referência calculados pelo método $ADO_{160}$ com função de fase $DE_1$ . . . . .	61
5.6	Problema 5: fluxo radiativo incidente para aquecimento periódico [24].	65
5.7	Problema 5: radiação absorvida pelos tecidos (normalizada por $q_0 = 20$ kW/m <sup>2</sup> ). Tecidos (a) sem nanopartículas; (b) com nanopartículas. Valores obtidos pelo método $ADO_{160}$ para a aproximação da função de fase de Henyey-Greenstein $HG_{300}$ . . . . .	66
5.8	Problema 5: temperatura nos tecidos calculada em diferentes instantes. Tecidos (a) sem nanopartículas; (b) com nanopartículas. Valores obtidos pelo acoplamento dos métodos de Volumes Finitos e $ADO_{160}$ para a aproximação da função de fase de Henyey-Greenstein $HG_{300}$ . . . . .	67
5.9	Problema 5: erros relativos para a radiação absorvida pelos tecidos calculada pelo método $ADO_N$ para as aproximações da função de fase Henyey-Greenstein $DE_0$ e $DE_1$ . Tecidos (a) sem nanopartículas; (b) com nanopartículas. Valores de referência calculados pelo método $ADO_{160}$ com função de fase $HG_{300}$ . . . . .	68

5.10	Problema 5: erros relativos para a temperatura nos tecidos sem nanopartículas calculada pelo acoplamento dos métodos de Volumes Finitos e $ADO_N$ para as aproximações da função de fase Henyey-Greenstein $DE_0$ e $DE_1$ . Instante (a) $t = 10$ s; (b) $t = 25$ s; (c) $t = 35$ s; (d) $t = 50$ s. Valores de referência calculados pelo acoplamento dos métodos de Volumes Finitos e $ADO_{160}$ para a função de fase $HG_{300}$ . . . . .	69
5.11	Problema 5: erros relativos para a temperatura nos tecidos com nanopartículas calculada pelo acoplamento dos métodos de Volumes Finitos e $ADO_N$ para as aproximações da função de fase Henyey-Greenstein $DE_0$ e $DE_1$ . Instante (a) $t = 10$ s; (b) $t = 25$ s; (c) $t = 35$ s; (d) $t = 50$ s. Valores de referência calculados pelo acoplamento dos métodos de Volumes Finitos e $ADO_{160}$ para a função de fase $HG_{300}$ . . . . .	70
5.12	Problema 5: erros absolutos para a temperatura nos tecidos sem nanopartículas calculada pelo acoplamento dos métodos de Volumes Finitos e $ADO_N$ para as aproximações da função de fase Henyey-Greenstein $DE_0$ e $DE_1$ . Instante (a) $t = 10$ s; (b) $t = 25$ s; (c) $t = 35$ s; (d) $t = 50$ s. Valores de referência calculados pelo acoplamento dos métodos de Volumes Finitos e $ADO_{160}$ para a função de fase $HG_{300}$ . . . . .	71
5.13	Problema 5: erros absolutos para a temperatura nos tecidos com nanopartículas calculada pelo acoplamento dos métodos de Volumes Finitos e $ADO_N$ para as aproximações da função de fase Henyey-Greenstein $DE_0$ e $DE_1$ . Instante (a) $t = 10$ s; (b) $t = 25$ s; (c) $t = 35$ s; (d) $t = 50$ s. Valores de referência calculados pelo acoplamento dos métodos de Volumes Finitos e $ADO_{160}$ para a função de fase $HG_{300}$ . . . . .	72



# LISTA DE TABELAS

5.1	Problema 1: espessura, coeficiente de espalhamento e coeficiente de extinção de cada camada [40, 49]. . . . .	49
5.2	Problema 1: resultados numéricos para a intensidade média ( $1/(\text{cm}^2\text{s})$ ). Comparação entre os métodos ADO, Diamond Difference [49] e de Nyström [40]. . . . .	50
5.3	Problema 2: coeficientes da expansão da função de fase de espalhamento em polinômios de Legendre [37]. . . . .	51
5.4	Problema 2: resultados numéricos para o fluxo radiativo adimensional calculado com $\sigma_s = 0.06$ . Comparação entre os métodos ADO e $F_9$ [37].	52
5.5	Problema 2: resultados numéricos para o fluxo radiativo adimensional calculado com $\sigma_s = 0.01$ . Comparação entre os métodos ADO e $F_9$ [37]. . . . .	52
5.6	Problema 3: propriedades termofísicas da gordura subcutânea e do sangue [24, 46]. . . . .	53
5.7	Problema 3: resultados numéricos para a temperatura. Comparação entre a solução analítica e o método de Volumes Finitos com diferentes espaçamentos $h_t$ (s) e $h_r$ (m). . . . .	54
5.8	Problema 4: espessura e propriedades óticas dos tecidos [23]. . . . .	57
5.9	Problema 4: resultados numéricos para a radiação absorvida ( $\text{W}/\text{m}^2$ ) pelos tecidos sem nanopartículas. Valores obtidos pelo método ADO <sub>160</sub> para as aproximações da função de fase de Henyey-Greenstein HG <sub>300</sub> , DE <sub>0</sub> e DE <sub>1</sub> . Resultados normalizados por $q_0 = 20 \text{ kW}/\text{m}^2$ . . . . .	62

5.10	Problema 4: resultados numéricos para a radiação absorvida ( $\text{W}/\text{m}^2$ ) pelos tecidos com nanopartículas. Valores obtidos pelo método $\text{ADO}_{160}$ para as aproximações da função de fase de Henyey-Greenstein $\text{HG}_{300}$ , $\text{DE}_0$ e $\text{DE}_1$ . Resultados normalizados por $q_0 = 20 \text{ kW}/\text{m}^2$ . . . . .	63
5.11	Problema 5: espessura e propriedades termofísicas e óticas dos tecidos [24, 46]. Coeficientes de espalhamento calculados a partir dos coeficientes de espalhamento de transporte com $f_{s,r} = g_r$ . . . . .	64
5.12	Problema 5: resultados numéricos para a radiação absorvida ( $\text{W}/\text{m}^2$ ) pelos tecidos sem nanopartículas. Valores obtidos pelo método $\text{ADO}_{160}$ para as aproximações da função de fase de Henyey-Greenstein $\text{HG}_{300}$ , $\text{DE}_0$ e $\text{DE}_1$ . Resultados normalizados por $q_0 = 20 \text{ kW}/\text{m}^2$ . . . . .	73
5.13	Problema 5: resultados numéricos para a temperatura ( $^\circ\text{C}$ ) nos tecidos sem nanopartículas calculada em diferentes instantes. Valores obtidos pelo acoplamento dos métodos de Volumes Finitos e $\text{ADO}_{160}$ para as aproximações da função de fase de Henyey-Greenstein $\text{HG}_{300}$ , $\text{DE}_0$ e $\text{DE}_1$ . . . . .	74
5.14	Problema 5: resultados numéricos para a radiação absorvida ( $\text{W}/\text{m}^2$ ) pelos tecidos com nanopartículas. Valores obtidos pelo método $\text{ADO}_{160}$ para as aproximações da função de fase de Henyey-Greenstein $\text{HG}_{300}$ , $\text{DE}_0$ e $\text{DE}_1$ . Resultados normalizados por $q_0 = 20 \text{ kW}/\text{m}^2$ . . . . .	74
5.15	Problema 5: resultados numéricos para a temperatura ( $^\circ\text{C}$ ) nos tecidos com nanopartículas calculada em diferentes instantes. Valores obtidos pelo acoplamento dos métodos de Volumes Finitos e $\text{ADO}_{160}$ para as aproximações da função de fase de Henyey-Greenstein $\text{HG}_{300}$ , $\text{DE}_0$ e $\text{DE}_1$ . . . . .	75



# LISTA DE SIGLAS E SÍMBOLOS

## Lista de Siglas

ADO	Analytical Discrete Ordinates
ADO <sub>N</sub>	método ADO com quadratura de ordem $N$
DE <sub>L</sub>	aproximação Delta-Eddington de ordem $L$ da função de fase
HG <sub>L</sub>	aproximação de ordem $L$ da função de fase de Henyey-Greenstein

## Lista de Símbolos

$\beta$	coeficiente de extinção, [1/m]
$\beta^{tr}$	coeficiente de extinção de transporte, [1/m]
$\delta$	<i>função</i> delta de Dirac, [adimensional]
$\eta$	índice de refração, [adimensional]
$\kappa$	coeficiente de absorção, [1/m]
$\kappa_n$	coeficiente de absorção do meio com nanopartículas, [1/m]
$\Omega$	vetor unitário de direção, $\Omega = (\cos \phi \sin \theta, \sin \phi \sin \theta, \cos \theta)$ , [sr]
$\Omega_c$	vetor unitário de direção da radiação colimada (ao penetrar o meio), [sr]
$\Omega_s$	vetor unitário de direção especular, [sr]
$\mathbf{r}$	vetor posição, $\mathbf{r} = (x, y, z)$ , [m]
$\mu$	cosseno do ângulo polar, [adimensional]
$\mu_k$	$k$ -ésimo nó da quadratura, [adimensional]

$\nu$	constante de separação da solução ADO, [adimensional]
$\omega$	albedo de espalhamento, [adimensional]
$\Phi$	função de fase de espalhamento, [adimensional]
$\phi$	autofunção da solução ADO, [adimensional]
$\phi$	ângulo azimutal (medido a partir do eixo $x$ ), [rad]
$\rho$	densidade, [kg/m <sup>3</sup> ]
$\rho^d$	coeficiente de reflexão difusa, [adimensional]
$\rho^s$	coeficiente de reflexão especular, [adimensional]
$\sigma_{s,n}$	coeficiente de espalhamento do meio com nanopartículas, [1/m]
$\sigma_s$	coeficiente de espalhamento, [1/m]
$\sigma_s^{tr}$	coeficiente de espalhamento de transporte, [1/m]
$\tau$	variável ótica, [adimensional]
$\tau_d$	espessura ótica, [adimensional]
$\theta$	ângulo polar (medido a partir do eixo $z$ ), [rad]
$a$	coeficiente da condição de contorno da equação de biotransferência de calor, [W/(m <sup>2</sup> K)]
$A_l$	$l$ -ésimo coeficiente da expansão da função de fase em polinômios de Legendre, [adimensional]
$B$	emissão de radiação na fronteira, [W/(m <sup>2</sup> sr)]
$b$	coeficiente da condição de contorno da equação de biotransferência de calor, [W/(m K)]

$c$	calor específico, [J/(kg K)]
$c$	velocidade da luz, [m/s]
$D$	determinante do sistema linear relativo à componente singular da intensidade, [adimensional]
$d$	espessura do domínio, [m]
$f$	fonte de calor nas fronteiras, [W/(m <sup>2</sup> )]
$f_s$	fração de radiação espalhada para frente, [adimensional]
$f_v$	fração volumétrica, [adimensional]
$G$	radiação incidente, [W/m <sup>2</sup> ]
$g$	coeficiente de anisotropia, [adimensional]
$h$	espaçamento da discretização espacial da $r$ -ésima camada, [m]
$h_d$	coeficiente de transferência de calor, [W/(m <sup>2</sup> K)]
$h_t$	espaçamento da discretização temporal, [s]
$I$	intensidade radiativa, [W/(m <sup>2</sup> sr)]
$I_*$	componente não singular da intensidade, [W/(m <sup>2</sup> sr)]
$I_\delta$	componente singular da intensidade, [W/(m <sup>2</sup> sr)]
$k$	condutividade térmica, [W/(m K)]
$L$	grau de anisotropia, [adimensional]
$N$	número de pontos da discretização espacial da $r$ -ésima camada, [adimensional]
$N$	ordem da quadratura, [adimensional]

$N_t$	número de pontos da discretização temporal, [adimensional]
$N_z$	ordem do sistema linear da solução em Volumes Finitos, [adimensional]
$P_l$	$l$ -ésimo polinômio de Legendre, [adimensional]
$q$	fluxo radiativo, [W/m <sup>2</sup> ]
$Q_a$	fator de eficiência de absorção da nanopartícula, [adimensional]
$q_c$	magnitude da radiação colimada (ao penetrar o meio), [W/(m <sup>2</sup> )]
$q_{ex}$	fonte de calor externa, [W/m <sup>3</sup> ]
$q_m$	geração de calor metabólica, [W/m <sup>3</sup> ]
$Q_{r,j}$	fonte de calor no ponto $z_{r,j}$ , $Q_{r,j}(t) = Q(z_{r,j}, t)$ , [K/s]
$Q_s$	fator de eficiência de espalhamento da nanopartícula, [adimensional]
$R$	número de camadas, [adimensional]
$r_n$	raio da nanopartícula, [m]
$s$	emissão de radiação no meio, [W/(m <sup>3</sup> sr)]
$T$	temperatura, [K]
$t$	tempo, [s]
$T_b$	temperatura do sangue, [K]
$T_{ex}$	temperatura externa à região computacional, [K]
$T_i$	temperatura inicial, [K]
$t_j$	$j$ -ésimo ponto da discretização temporal, [s]
$T_{r,j}$	temperatura no ponto $z_{r,j}$ , $T_{r,j}(t) = T(z_{r,j}, t)$ , [K]

$v_b$	taxa de perfusão sanguínea, [1/s]
$w_k$	$k$ -ésimo peso da quadratura, [adimensional]
$z$	limite esquerdo da $r$ -ésima camada do meio, [m]
$z_{r,j}$	$j$ -ésimo ponto da discretização espacial da $r$ -ésima camada, [m]



## RESUMO

Neste trabalho, foi desenvolvida uma formulação matemática para a resolução de problemas unidimensionais de transferência de calor em tecidos biológicos com influência da radiação térmica, definidos em um meio multicamada em geometria plana infinita. Com o objetivo de obter uma solução precisa e eficiente para o fenômeno de radiação, o método Analítico de Ordenadas Discretas (ADO) foi aplicado junto de uma decomposição da intensidade à equação de transferência radiativa monocromática em estado estacionário, com simetria azimutal, espalhamento anisotrópico arbitrário e condições de contorno gerais, incluindo a incidência de radiação colimada. Com respeito ao fenômeno de biotransferência de calor, uma versão recente do método de Volumes Finitos, capaz de preservar a estrutura tridiagonal da discretização clássica em meios homogêneos, foi aplicada à equação de Pennes, considerando interfaces em contato térmico ideal e condições de contorno gerais. Ambos os métodos se mostraram rápidos e precisos quando comparados a resultados conhecidos de problemas de transporte de partículas e de biotransferência de calor. Como aplicação, dois problemas relevantes para o tratamento de câncer por hipertermia induzida por laser foram analisados, incluindo casos sem e com nanopartículas absorvedoras. Aqui, foi observada a relevância do uso de aproximações em ordenadas discretas de alta ordem para modelar com precisão o fenômeno de transferência radiativa. Por outro lado, para os parâmetros considerados, foi possível resolver o problema de biotransferência de calor com boa precisão utilizando aproximações menos refinadas da radiação absorvida. Os resultados numéricos apresentados para essa aplicação, não publicados anteriormente na literatura de acordo com nosso conhecimento, sugerem que a formulação pode ser utilizada para resolver com precisão problemas unidimensionais de transferência de calor em tecidos biológicos com influência da radiação térmica.





# ABSTRACT

In this work, a mathematical formulation was developed to solve one-dimensional heat transfer problems in biological tissues influenced by thermal radiation, defined in a multilayer plane-parallel medium. Aiming at obtaining a precise and efficient solution for the radiative heat transfer phenomenon, the Analytical Discrete Ordinates method (ADO) was applied along with an intensity decomposition to the monochromatic steady-state radiative transfer equation, with azimuthal symmetry, arbitrary anisotropic scattering and general boundary conditions, including the incidence of collimated radiation. Regarding the bioheat transfer phenomenon, a recent version of the Finite Volume method, capable of preserving the tridiagonal structure of the classical discretization in homogeneous media, was applied to the Pennes equation, considering interfaces in ideal thermal contact and general boundary conditions. Both methods proved to be fast and accurate when compared to known results of particle transport and bioheat transfer problems. As an application, two problems relevant to the treatment of cancer by laser-induced hyperthermia were analyzed, including cases without and with absorbing nanoparticles. Here, the relevance of using high-order discrete ordinates approximations to accurately model the radiative heat transfer phenomenon was observed. On the other hand, for the parameters considered, it was possible to solve the bioheat transfer problem with good accuracy using less refined approximations of the absorbed radiation. The numerical results presented for this application, not previously published in the literature to the best of our knowledge, suggest that the formulation can be used to accurately solve one-dimensional problems of heat transfer in biological tissues influenced by thermal radiation.

# 1 INTRODUÇÃO

A hipertermia induzida por laser é um tratamento que visa atacar tecidos tumorais através do aumento controlado de temperatura, resultante da absorção e conversão da energia ótica incidente em calor [39]. Na faixa do infravermelho próximo, tecidos humanos são, de modo geral, meios altamente espalhadores e pouco absorvedores, formando uma *janela terapêutica* para a propagação da luz até a região de interesse. A absorção de energia pode, ainda, ser consideravelmente amplificada com a aplicação de nanopartículas absorvedoras, potencializando a hipertermia localizada e reduzindo os efeitos colaterais sobre os tecidos saudáveis [12, 13]. A flexibilidade na configuração do método de aquecimento, bem como a possibilidade de combinação com outros tratamentos, como radioterapia e quimioterapia [55], tornam a hipertermia induzida por laser uma técnica promissora de combate ao câncer.

Nesse contexto, a eficácia do tratamento depende da geração, do armazenamento e do transporte de calor nos tecidos biológicos. A geração de calor é determinada pelos parâmetros do laser, como a intensidade e o comprimento de onda, e pelas propriedades óticas do meio, como os coeficientes de absorção e de espalhamento. O armazenamento e o transporte de calor, por outro lado, são caracterizados majoritariamente pelas propriedades termofísicas dos tecidos, como a condutividade térmica e o calor específico [48]. A compreensão desses mecanismos é uma tarefa complexa, mas indispensável para uma escolha adequada de parâmetros que otimizem os resultados do tratamento. Nesse sentido, modelos matemáticos permitem a investigação de diferentes combinações de parâmetros sem a necessidade de experimentação direta em pacientes, aumentando a segurança no desenvolvimento e aprimoramento de protocolos de irradiação e reduzindo os custos humanos e financeiros envolvidos.

De modo geral, a modelagem matemática da transferência de calor em tecidos biológicos com influência da radiação térmica é dada pelo acoplamento de um modelo de transferência radiativa (para descrever a propagação da radiação) a

um modelo de biotransferência de calor (para estimar a distribuição de temperatura resultante) [14]. Devido à grande variedade e à alta complexidade estrutural dos tecidos, a modelagem do fenômeno de transferência radiativa é frequentemente a parte mais difícil [36]. Tecidos biológicos são meios participativos, isto é, que absorvem, emitem e espalham radiação, e suas propriedades óticas podem variar com a direção e com o comprimento de onda. Além disso, as quantidades de interesse nas aplicações, como a radiação incidente e o fluxo radiativo, são definidas em função da intensidade radiativa, a qual também depende da variável angular [14, 47]. Apenas com uma descrição adequada do fenômeno de transferência radiativa, modelos de biotransferência de calor, como o modelo de Pennes [51], o modelo de Cattaneo-Vernotte [44] ou o modelo de Duplo Retardo [31], podem ser utilizados para estimar a distribuição de temperatura nos tecidos e os efeitos térmicos resultantes.

A equação íntegro-diferencial de transferência radiativa, uma versão linear da equação de Boltzmann, é o modelo matemático mais utilizado para descrever a transferência radiativa em tecidos biológicos [12]. Essa equação descreve a intensidade em meios participativos em função de sete variáveis independentes: três espaciais, duas angulares, uma temporal e uma espectral [17, 32, 47]. Tendo em vista a complexidade desse modelo, soluções de forma fechada são possíveis apenas em casos com diversas simplificações na geometria e no comportamento do fenômeno [15], e simulações computacionais de casos menos restritivos tendem a ser um desafio mesmo diante da capacidade computacional disponível atualmente [42]. Tal dificuldade motivou a análise da transferência radiativa em tecidos biológicos através de outros modelos ainda mais simples, como a Lei de Lambert-Beer e a aproximação por difusão [35]. Abordagens clássicas em teoria de transporte de partículas, entretanto, podem ser utilizadas para descrever esse fenômeno com maior precisão quando for de interesse. De modo geral, as abordagens existentes são classificadas em abordagens probabilísticas e abordagens determinísticas [4].

Dentro das abordagens probabilísticas, o método de Monte Carlo é altamente aplicado em ótica dos tecidos [2]. Esse método traça a trajetória individual de cada fóton desde o seu ponto de emissão até a sua absorção final por uma superfície ou elemento de volume, considerando eventos intermediários de reflexão e de espalhamento [32]. O método de Monte Carlo pode ser aplicado a problemas com configurações complexas e é conhecido por sua alta precisão, sendo muitas vezes utilizado para validar resultados produzidos por outras abordagens. Entretanto, dada a sua natureza probabilística, resultados aceitáveis podem exigir amostras relativamente grandes, resultando em um alto custo computacional [33]. As abordagens determinísticas, por outro lado, trabalham diretamente com a solução de formas aproximadas da equação de transferência radiativa. Nesse caso, os métodos dos Harmônicos Esféricos e de Ordenadas Discretas estão entre os mais populares [32, 47].

Também é conhecido como método  $P_N$ , o método dos Harmônicos Esféricos é baseado na aproximação da dependência angular da função incógnita por um conjunto finito de harmônicos esféricos [32, 47]. Uma das grandes vantagens dessa abordagem está na conversão da equação governante em equações diferenciais parciais mais simples. Em particular, o método  $P_1$ , um dos mais aplicados em ótica dos tecidos, é equivalente à aproximação por difusão em determinadas condições [56]. As aproximações de baixa ordem, entretanto, costumam apresentar boa precisão apenas em meios com intensidade radiativa quase isotrópica, o que não é o caso da maioria dos tecidos biológicos [48, 56]. Além disso, segundo Modest [47], a precisão de aproximações de alta ordem cresce lentamente, enquanto a complexidade matemática aumenta rapidamente.

O método de Ordenadas Discretas, originalmente proposto por Chandrasekhar [17], consiste na discretização da variável angular, resultando na aproximação do termo integral por uma quadratura numérica. Assim como o método dos Harmônicos Esféricos, esse procedimento reduz o problema a ser resolvido a um sistema

de equações diferenciais. Em determinadas condições, é possível mostrar que ambos os métodos são equivalentes no sentido de produzirem os mesmos resultados e de demandarem o mesmo esforço computacional [8]. A popularidade do método de Ordenadas Discretas, decorrente, em boa parte, da relativa simplicidade de derivação de formulações de alta ordem [47], direcionou grandes esforços ao tratamento de suas limitações, como a extensão a estruturas espaciais complexas, o desenvolvimento de esquemas de discretização espacial para reduzir o fenômeno de falsa dispersão (quando essa variável é tratada numericamente) e o desenvolvimento de esquemas de discretização angular para reduzir o efeito raio [19].

Desenvolvimentos do ponto de vista computacional também têm sido estudados para o método de Ordenadas Discretas. Nesse sentido, o método Analítico de Ordenadas Discretas (ADO, na sigla em inglês), desenvolvido por Barichello e Siewert [9, 11], tem se destacado. Nesse método, a variável espacial é tratada de forma analítica e a discretização angular é baseada em esquemas arbitrários de quadratura de semi-intervalo. Como consequência, as constantes de separação são definidas em função de um problema de autovalores de ordem reduzida em comparação à abordagem padrão, proporcionando ganhos computacionais. Além disso, no método ADO aplicam-se mudanças de escala para evitar possíveis erros de representação (do tipo *overflow*) na avaliação numérica de exponenciais [4]. Essas características possibilitaram o desenvolvimento de soluções precisas e concisas de diversos problemas de transferência radiativa [4], incluindo problemas que consideram efeitos de polarização [10], problemas em meios com índice de refração variável e condições de contorno e de interface de Fresnel [25] e problemas multidimensionais, onde o método foi utilizado em conjunto com técnicas nodais [7].

Ainda que a geometria real de tecidos biológicos seja tridimensional e complexa, informações importantes podem ser extraídas de problemas unidimensionais [46]. Tendo em vista as dificuldades citadas acima, como um estudo introdutório, o objetivo deste trabalho foi desenvolver uma formulação matemática para a resolução

precisa e eficiente de problemas unidimensionais de transferência de calor em tecidos biológicos, com particular atenção ao fenômeno de transferência radiativa. Nesse sentido, buscando preservar a analiticidade o quanto possível, o método ADO foi aplicado à equação de transferência radiativa monocromática em estado estacionário, com simetria azimutal, espalhamento anisotrópico arbitrário e condições de contorno gerais, incluindo a incidência de radiação colimada para modelar a incidência de radiação laser. Com respeito ao fenômeno de biotransferência de calor, o método de Volumes Finitos [45] foi utilizado para resolver a equação de Pennes (escolhida por sua simplicidade), considerando interfaces em contato térmico ideal e condições de contorno gerais. A formulação aqui desenvolvida, baseada nos métodos citados acima, foi aplicada a diferentes problemas de transporte de partículas e de biotransferência de calor, apresentando excelente precisão. Em particular, os problemas de hipertermia induzida por laser propostos nas referências [23, 24, 46] foram simulados considerando diferentes discretizações da variável angular e diferentes aproximações da função de fase de Henyey-Greenstein [21, 48, 56], e resultados numéricos não apresentados anteriormente na literatura, segundo nosso conhecimento, foram obtidos.

Dessa forma, no capítulo 2, apresenta-se as equações de transferência radiativa e de biotransferência de calor, bem como o modelo unidimensional considerado. No capítulo 3, o problema de transferência radiativa é reformulado para tratar analiticamente a componente singular da intensidade, presente na solução do problema devido à incidência de radiação colimada. Nesse mesmo capítulo, o método ADO é aplicado à componente não singular e a solução geral obtida é utilizada para derivar expressões analíticas na variável espacial para a radiação incidente e para o fluxo radiativo. No capítulo 4, uma versão recente do método de Volumes Finitos [45], capaz de preservar a estrutura tridiagonal da discretização clássica em meios homogêneos, é estendida para o problema de biotransferência de calor. No capítulo 5, os resultados obtidos são apresentados. Primeiramente, são considerados problemas de transporte de partículas e de biotransferência de calor com resultados numéricos conhecidos para verificar a implementação e a precisão dos métodos ADO e de

Volumes Finitos. Em seguida, como aplicação, dois problemas com dados realistas são abordados para calcular a resposta fototérmica de tecidos subcutâneos à radiação colimada, simulando o tratamento de câncer por hipertermia induzida por laser. Por fim, as conclusões e considerações finais são apresentadas no capítulo 6.

## 2 MODELAGEM MATEMÁTICA DA TRANSFERÊNCIA DE CALOR EM TECIDOS BIOLÓGICOS

Neste capítulo, o modelo matemático utilizado para representar a transferência de calor em tecidos biológicos com influência da radiação térmica é introduzido. Primeiramente, as equações de transferência radiativa [17, 32, 47] e de biotransferência de calor [14, 34, 43], que combinadas descrevem o fenômeno em questão, são brevemente discutidas. Em seguida, o modelo unidimensional considerado no restante do trabalho é apresentado a partir de simplificações aplicadas ao domínio e à física do problema.

Nesse sentido, supõe-se que o fenômeno ocorre em uma região convexa  $\mathcal{D} \subset \mathbb{R}^3$ , com fronteira  $\partial\mathcal{D}$  e vetor unitário normal externo  $\mathbf{n}$ . As coordenadas espacial, angular e temporal são denotadas, respectivamente, por  $\mathbf{r} = (x, y, z)$ ,  $\Omega = (\cos\phi \sin\theta, \sin\phi \sin\theta, \cos\theta)$  e  $t$ , sendo  $\theta$  o ângulo polar (medido a partir do eixo  $z$ ) e  $\phi$  o ângulo azimutal (medido a partir do eixo  $x$ ). Visto que neste trabalho são abordados apenas problemas com radiação monocromática, a dependência do fenômeno de transferência radiativa na variável espectral é omitida.

### 2.1 A equação de transferência radiativa em meios participativos

A equação de transferência radiativa é o modelo mais utilizado para representar a propagação da luz em tecidos biológicos [12]. Ainda que as clássicas equações de Maxwell possam fornecer uma abordagem mais rigorosa, a equação de transferência radiativa é preferida em ótica dos tecidos porque sua aplicação a problemas em meios heterogêneos é de menor complexidade [18, 48]. Dentro desse



contexto, a variável de estado fundamental é a intensidade radiativa monocromática  $I = I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, t)$ , definida como o fluxo de energia radiativa por unidade de área perpendicular à direção de propagação, por unidade de ângulo sólido, por unidade de tempo e por unidade de comprimento de onda [47]. De acordo com a equação de transferência radiativa, a intensidade de um feixe de radiação na posição  $\mathbf{r}$  e com direção  $\boldsymbol{\Omega}$  é atenuada pelos processos de absorção e de espalhamento, mas intensificada pela emissão de radiação do meio e pelo espalhamento de radiação de outras direções  $\boldsymbol{\Omega}'$  na direção considerada.

Para um ponto  $\mathbf{r}$  interior a  $\mathcal{D}$ , uma direção  $\boldsymbol{\Omega} \in S^2$  (esfera unitária do  $\mathbb{R}^3$ ) e um instante  $t > 0$ , a equação de transferência radiativa pode ser escrita como [17, 32, 47]

$$\begin{aligned} \frac{1}{c} \frac{\partial}{\partial t} I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, t) + \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, t) + \beta I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, t) = \\ \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_{S^2} \Phi(\boldsymbol{\Omega}', \boldsymbol{\Omega}) I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}', t) d\boldsymbol{\Omega}' + s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}, t), \end{aligned} \quad (2.1)$$

onde  $c$  é a velocidade da luz,  $\beta$  é o coeficiente de extinção,  $\sigma_s$  é o coeficiente de espalhamento,  $\Phi$  é a função de fase e  $s$  é o termo fonte. O coeficiente de extinção é dado pela soma dos coeficientes de absorção,  $\kappa$ , e de espalhamento, isto é,

$$\beta = \kappa + \sigma_s, \quad (2.2)$$

e pode ser interpretado como o inverso do livre caminho médio da radiação [32]. A função de fase é uma função não negativa que descreve a probabilidade de um feixe de radiação com direção  $\boldsymbol{\Omega}'$  ser espalhado (ao interagir com o meio material) na direção  $\boldsymbol{\Omega}$ . Geralmente, considera-se que essa função depende apenas do ângulo de espalhamento  $\Theta$ , o ângulo formado entre as direções  $\boldsymbol{\Omega}'$  e  $\boldsymbol{\Omega}$  [18, 47]. O termo fonte representa a emissão de radiação do meio (natural ou induzida), e sua forma varia de acordo com as condições do problema.

Em muitas aplicações é suficiente considerar a equação de transferência radiativa em estado estacionário

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \beta I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \frac{\sigma_s}{4\pi} \int_{S^2} \Phi(\boldsymbol{\Omega}', \boldsymbol{\Omega}) I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' + s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}), \quad (2.3)$$

visto que o primeiro termo de (2.1) torna-se relevante apenas em fenômenos ultrarrápidos [32, 47]. Por exemplo, Randrianalisoa *et al.* [54] mostraram que a hipótese de estado estacionário pode ser utilizada para estimar a radiação laser absorvida por tecidos subcutâneos quando o período de incidência é superior a 30 ps. Nesse caso, uma solução completa para a equação (2.3) pode ser obtida conhecendo-se a intensidade em algum ponto de fronteira, onde pode ocorrer penetração de radiação externa, emissão de radiação e reflexão de radiação interna. Para um ponto  $\mathbf{r}_s \in \partial\mathcal{D}$  e uma direção  $\boldsymbol{\Omega} \in S^2$  tal que  $\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n} < 0$ , esses processos são quantificados pela condição de contorno [38, 47]

$$I(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega}) = I_{ex}(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega}) + B(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega}) + \rho^s(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega}) I(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega}_s) + \frac{\rho^d(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega})}{\pi} \int_{\boldsymbol{\Omega}' \cdot \mathbf{n} > 0} I(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega}') |\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\Omega}'| d\boldsymbol{\Omega}', \quad (2.4)$$

onde  $I_{ex}$  é a função que descreve a radiação externa (ao penetrar o meio),  $B$  é a emissão de radiação na fronteira,  $\rho^s$  e  $\rho^d$  são os coeficientes de reflexão especular e difusa, respectivamente, e

$$\boldsymbol{\Omega}_s = \boldsymbol{\Omega} - 2(\boldsymbol{\Omega} \cdot \mathbf{n}) \mathbf{n} \quad (2.5)$$

é a direção especular, isto é, a direção na qual um feixe de radiação precisa incidir sobre uma superfície para que tenha direção  $\boldsymbol{\Omega}$  após uma reflexão especular [47] (Figura 2.1). A emissão de radiação na fronteira, assim como a emissão de radiação no meio, é especificada de acordo com as condições do problema. Os coeficientes de reflexão tomam valores no intervalo  $[0, 1]$ , podendo descrever superfícies transparentes (sem reflexão), semitransparentes (reflexão parcial) ou opacas (reflexão total). De modo geral, observa-se que a condição de contorno (2.4) não descreve a intensidade explicitamente.

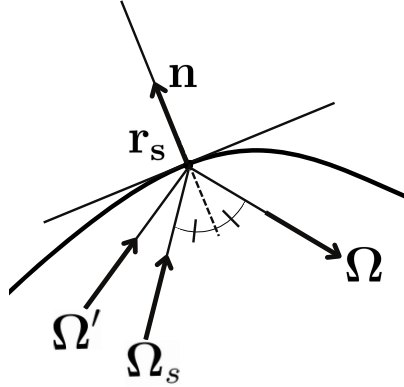


Figura 2.1: Intensidade radiativa refletida em um ponto de fronteira  $\mathbf{r}_s$ .

Com respeito ao termo de radiação externa, um caso de grande interesse consiste na representação da incidência de radiação colimada. Esse tipo de radiação ocorre quando as ondas eletromagnéticas, ou fótons, percorrem trajetórias (aproximadamente) paralelas entre si, como é o caso da radiação laser. Matematicamente, a radiação colimada pode ser escrita como [38, 47]

$$\begin{aligned} I_{ex}(\mathbf{r}_s, \boldsymbol{\Omega}) &= q_c(\mathbf{r}_s) \delta(\boldsymbol{\Omega} - \boldsymbol{\Omega}_c) \\ &= q_c(\mathbf{r}_s) \delta(\cos \theta - \cos \theta_c) \delta(\phi - \phi_c), \end{aligned} \quad (2.6)$$

onde  $q_c$  e  $\boldsymbol{\Omega}_c$  são a magnitude e a direção do feixe colimado (ao penetrar o meio),  $\theta$  e  $\phi$  são os ângulos polar e azimutal, como mencionado anteriormente, e  $\delta$  é *função* delta de Dirac [1]. Devido ao fenômeno de reflexão, a magnitude  $q_c$  não é necessariamente igual a que incide sobre a parte externa da superfície. Da mesma forma, a direção  $\boldsymbol{\Omega}_c$  pode ser diferente da direção de incidência quando há refração. A equação (2.6) modela a radiação colimada como um termo de emissão fortemente direcional, mas abordagens específicas para problemas do tipo são consideradas em consequência das dificuldades analíticas e numéricas introduzidas pela descontinuidade na variável angular [47].

Por fim, observa-se que a equação de transferência radiativa é de caráter heurístico e pode ser derivada diretamente da equação de Boltzmann (tratando a

radiação como fótons) ou a partir de uma abordagem Euleriana adaptada (efetuando um balanço de energia radiativa em um volume elementar ao longo de uma direção) [50]. O desenvolvimento desse modelo considera algumas simplificações, como uniformidade no índice de refração e ausência de polarização [47]. De todo modo, segundo Niemz [48], ainda que a equação de transferência radiativa não apresente o mesmo rigor da abordagem analítica das equações de Maxwell, evidências experimentais indicam que esse modelo pode fornecer resultados satisfatórios em diversas situações.

### 2.1.1 Aproximações para a função de fase de espalhamento

Ao longo dos anos, diversas funções de fase teóricas foram propostas para descrever o espalhamento em fenômenos de transferência radiativa. Para tecidos biológicos, a função de fase de Henyey-Greenstein apresentou a melhor concordância com resultados experimentais [48, 56]. Essa função é dada por

$$\Phi(\Theta) = \frac{1 - g^2}{(1 + g^2 - 2g \cos \Theta)^{3/2}}, \quad (2.7)$$

ou, em termos dos polinômios de Legendre [1], por

$$\Phi(\Theta) = \sum_{l=0}^{\infty} A_l P_l(\cos \Theta), \quad (2.8)$$

onde  $A_0 = 1$  e  $A_l = (2l + 1) g^l$  são as constantes da lei de espalhamento e  $P_l$  é o  $l$ -ésimo polinômio de Legendre. O coeficiente  $g \in (-1, 1)$  é o valor médio do cosseno do ângulo de espalhamento, chamado coeficiente de anisotropia. Para valores próximos de -1 e 1, o coeficiente de anisotropia descreve espalhamentos extremamente para trás e extremamente para frente, respectivamente, enquanto o espalhamento isotrópico ocorre com  $g = 0$ . De modo geral, tecidos biológicos espalham a luz fortemente para frente, com valores de  $g$  entre 0.7 e 0.99 [48, 56].

Na prática, a representação da função de fase de Henyey-Greenstein (e de outras funções de fase) é frequentemente realizada através do truncamento da

expansão em polinômios de Legendre, isto é,

$$\Phi(\Theta) \approx \sum_{l=0}^L A_l P_l(\cos \Theta), \quad (2.9)$$

sendo a ordem de aproximação  $L$  chamada grau de anisotropia [47]. A representação em polinômios de Legendre é conveniente pois permite, através do teorema da adição [4], separar a dependência dos ângulos polar e azimutal existente no ângulo de espalhamento  $\Theta$ . Por outro lado, quando há espalhamento fortemente para frente, um alto grau de anisotropia pode ser necessário para aproximar a função de fase original com boa precisão [21]. Na tentativa de contornar essa dificuldade, diversos pesquisadores têm utilizado a aproximação Delta-Eddington, que consiste em representar o pico de espalhamento para frente da função de fase original através da decomposição [21, 47]

$$\Phi(\Theta) \approx 2f_s \delta(1 - \cos \Theta) + (1 - f_s) \Phi^*(\Theta), \quad (2.10)$$

onde  $f_s \in (0, 1)$  é a fração espalhada para frente e  $\Phi^*$  é a nova função de fase, quantidades que precisam ser determinadas. Nesse caso, a equação de transferência radiativa (2.3) é substituída pela aproximação de transporte

$$\boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) + \beta^{tr} I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) = \frac{\sigma_s^{tr}}{4\pi} \int_{S^2} \Phi^*(\Theta) I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}') d\boldsymbol{\Omega}' + s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}), \quad (2.11)$$

sendo

$$\beta^{tr} = \kappa + \sigma_s^{tr} \quad (2.12)$$

o coeficiente de extinção de transporte, e

$$\sigma_s^{tr} = (1 - f_s) \sigma_s \quad (2.13)$$

o coeficiente de espalhamento de transporte.

Uma escolha apropriada dos parâmetros da aproximação Delta-Eddington pode fornecer bons resultados em tecidos biológicos com espalhamento fortemente para frente mantendo uma baixa complexidade matemática [29]. Assim, é comum

supor que a nova função de fase  $\Phi^*$  é isotrópica ou linearmente anisotrópica [47]. Uma aproximação de ordem arbitrária, entretanto, pode ser obtida por [21]

$$\Phi^*(\Theta) = \sum_{l=0}^L A_l P_l(\cos \Theta) \quad (2.14)$$

com  $A_0 = 1$ ,  $A_l = [(2l + 1)(g^l - f_s)] / (1 - f_s)$  e  $f_s = g^{L+1}$ ,  $l = 1, \dots, L$ . Nesse caso, é importante observar que pequenas variações no valor de  $f_s$  são necessárias em algumas situações, visto pode ocorrer  $\Phi^*(\Theta) < 0$  para valores específicos de  $\Theta$  [21]. As aproximações Delta-Eddington isotrópica ( $L = 0$ ) e linearmente anisotrópica ( $L = 1$ ) da função de fase de Henyey-Greenstein são dadas, respectivamente, por [21, 47]

$$\Phi(\Theta) \approx 2f_s\delta(1 - \cos \Theta) + (1 - f_s) \quad (2.15)$$

com

$$f_s = g \quad (2.16)$$

e por

$$\Phi(\Theta) \approx 2f_s\delta(1 - \cos \Theta) + (1 - f_s) + 3(g - f_s)\cos \Theta \quad (2.17)$$

com

$$f_s = \min_{\frac{3g-1}{2} \leq x \leq g} |x - g^2| = \begin{cases} g^2 & \text{se } g \in (0, 0.5], \\ \frac{3g-1}{2} & \text{se } g \in (0.5, 1). \end{cases} \quad (2.18)$$

## 2.2 A equação de biotransferência de calor de Pennes

A equação de biotransferência de calor, proposta por Pennes em 1948 [51], é um dos modelos mais antigos a quantificar a transferência de calor em tecidos biológicos. Essa equação é uma modificação da equação do calor que inclui os efeitos da perfusão sanguínea e da geração de calor devido ao metabolismo [14]. Em seu modelo, Pennes considerou todas as propriedades de condução e armazenamento térmico como propriedades dos tecidos. As propriedades do sangue foram consideradas no termo de perfusão sanguínea, o qual foi modelado para ser proporcional à diferença

entre as temperaturas do sangue arterial, assumida constante e igual a  $T_b$ , e do tecido, denotada por  $T = T(\mathbf{r}, t)$ . A temperatura do sangue venoso foi considerada igual à temperatura do tecido [34].

Para um ponto  $\mathbf{r}$  interior a  $\mathcal{D}$  e um instante  $t > 0$ , a equação de biotransferência de calor pode ser escrita como [14, 34, 43]

$$\rho c \frac{\partial}{\partial t} T(\mathbf{r}, t) = \nabla \cdot (k \nabla T(\mathbf{r}, t)) + \rho_b c_b v_b [T_b - T(\mathbf{r}, t)] + q_m(\mathbf{r}, t) + q_{ex}(\mathbf{r}, t), \quad (2.19)$$

onde  $\rho$  é a densidade,  $c$  é o calor específico,  $k$  é a condutividade térmica e  $v_b$  é a taxa de perfusão sanguínea, quantidades que podem variar com as coordenadas espacial e temporal. O subscrito "b" refere-se às propriedades do sangue, sendo a taxa de perfusão sanguínea o volume de sangue que passa por unidade de volume de tecido por unidade de tempo. A fonte de calor devido à atividade metabólica é dada por  $q_m$  e é, geralmente, função da temperatura ou constante [43]. O termo  $q_{ex}$  contabiliza o efeito de outras possíveis fontes de calor. Em particular, para a radiação monocromática em estado estacionário, esse termo é dado por [14, 47]

$$\begin{aligned} q_{ex}(\mathbf{r}, t) &= - \int_{S^2} \boldsymbol{\Omega} \cdot \nabla I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) d\Omega \\ &= \kappa \int_{S^2} I(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) d\Omega - \int_{S^2} s(\mathbf{r}, \boldsymbol{\Omega}) d\Omega. \end{aligned} \quad (2.20)$$

Visto que (2.19) é uma equação diferencial parcial de primeira ordem na variável temporal e de segunda ordem na variável espacial, condições adicionais em ambas as variáveis são necessárias para a obtenção de uma solução completa. Para a variável temporal, tem-se a distribuição de temperatura no instante  $t = 0$ , isto é, tem-se a condição inicial

$$T(\mathbf{r}, 0) = T_i(\mathbf{r}), \quad (2.21)$$

onde  $T_i$  é conhecida. Para a variável espacial, tem-se condições de contorno que descrevem (na maioria dos problemas) a temperatura, o fluxo de calor ou o processo de convecção [22, 28]. Para um ponto  $\mathbf{r}_s \in \partial\mathcal{D}$  e um instante  $t > 0$ , uma forma geral

de considerar essas três possibilidades é dada por [28, 45]

$$a(\mathbf{r}_s) T(\mathbf{r}_s, t) + b(\mathbf{r}_s) \frac{\partial}{\partial \mathbf{n}} T(\mathbf{r}, t) \Big|_{\mathbf{r}=\mathbf{r}_s} = f(\mathbf{r}_s, t), \quad (2.22)$$

onde  $a$ ,  $b$  e  $f$  são escolhidas de acordo com o tipo de condição de contorno que deseja-se representar, e  $\partial/\partial \mathbf{n}$  denota a derivada normal.

Devido às simplificações consideradas por Pennes na derivação da equação de biotransferência de calor, o modelo apresenta vantagens e limitações. Por um lado, sua simplicidade permite uma fácil aplicação de métodos numéricos bem conhecidos, como o método de Volumes Finitos [41], e requer, em comparação a outros modelos mais complexos, um número menor de informações para ser utilizado [52]. Por outro lado, tais simplificações podem limitar sua precisão. Por exemplo, o modelo de Pennes considera que o efeito da perfusão sanguínea é isotrópico, o que pode superestimar a distribuição de temperatura [34]. O modelo também despreza a estrutura local dos tecidos e, por se basear na teoria do calor de Fourier, está sujeito ao paradoxo da propagação instantânea do calor [43]. Apesar disso, como citado por Khaled e Vafai [34], a equação de biotransferência de calor de Pennes apresentou boa concordância com resultados experimentais.

## 2.3 Problema unidimensional acoplado

Neste trabalho, são considerados apenas problemas definidos na faixa tridimensional localizada entre os planos  $z = 0$  e  $z = d$  (geometria plana infinita), tais que todas as grandezas físicas são invariantes em cada plano  $z$  intermediário. A heterogeneidade do meio é representada decompondo-se o domínio em  $R$  camadas homogêneas e paralelas entre si, cada uma com espessura  $z_r - z_{r-1}$  para  $r = 1, 2, \dots, R$  e  $z_0 = 0 < \dots < z_r < \dots < z_R = d$  (Figura 2.2). Por simplicidade, o domínio é denotado pelo intervalo  $[0, d]$ , visto que o fenômeno independe das variáveis espaciais  $x$  e  $y$  (problema *unidimensional*). A restrição de uma grandeza ao interior da  $r$ -ésima camada do meio,  $[z_{r-1}, z_r]$ , é indicada pelo subscrito "r".



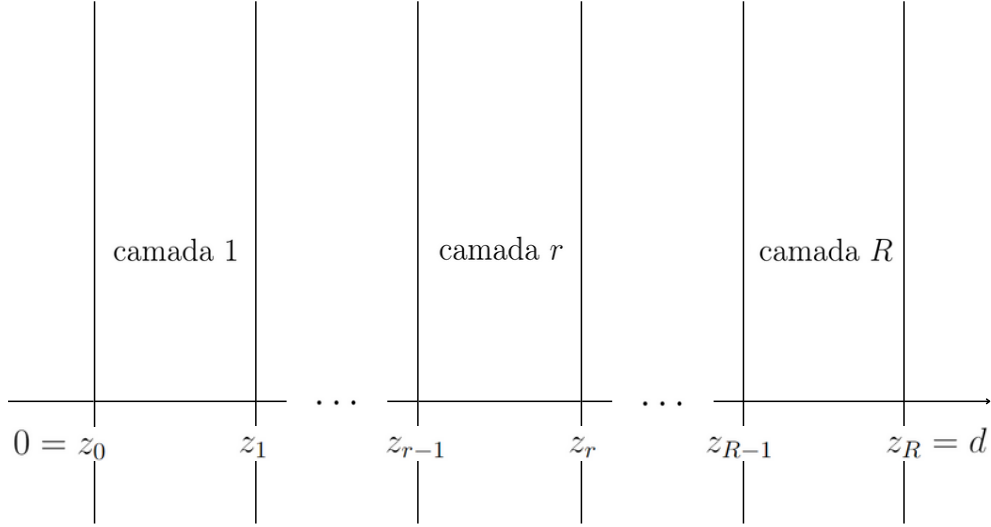


Figura 2.2: Representação de tecidos biológicos com diferentes espessuras e propriedades via decomposição do meio em camada homogêneas.

O fenômeno de transferência radiativa é considerado em estado estacionário, com intensidade monocromática, simetria azimutal e espalhamento anisotrópico arbitrário representado pela expansão da função de fase em uma série de polinômios de Legendre truncada. Nessas condições, a intensidade é função apenas da variável espacial  $z$  e da variável angular  $\mu = \cos \theta$ , sendo possível simplificar o termo integral em (2.3) e reduzir a função de fase a uma função dependente apenas do ângulo polar [47]. Mais precisamente, a restrição da intensidade ao interior da  $r$ -ésima camada do meio satisfaz a equação de transferência radiativa [17, 47]

$$\mu \frac{\partial}{\partial z} I_r(z, \mu) + \beta_r I_r(z, \mu) = \frac{\sigma_{s,r}}{2} \sum_{l=0}^{L_r} A_{r,l} P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I_r(z, \mu') d\mu' + s_r(z, \mu) \quad (2.23)$$

para  $z \in (z_{r-1}, z_r)$  e  $\mu \in [-1, 1]$ . Em ambas as fronteiras, são consideradas condições de contorno gerais para esse fenômeno, admitindo incidência de radiação colimada

sobre a fronteira  $z = 0$ . Dessa forma, por (2.4), têm-se

$$I_1(0, \mu) = \frac{q_c}{2\pi} \delta(\mu - \mu_c) + B_1(\mu) + \rho_1^s(\mu) I_1(0, -\mu) + 2\rho_1^d(\mu) \int_0^1 I_1(0, -\mu') \mu' d\mu' \quad (2.24)$$

e

$$I_R(d, -\mu) = B_2(-\mu) + \rho_2^s(-\mu) I_R(d, \mu) + 2\rho_2^d(-\mu) \int_0^1 I_R(d, \mu') \mu' d\mu' \quad (2.25)$$

para  $\mu \in (0, 1]$ , onde a constante  $2\pi$  na equação (2.24) resulta da condição de simetria azimutal.

Analogamente, a temperatura é função apenas da variável espacial  $z$  e da variável temporal  $t$ , e sua restrição ao interior da  $r$ -ésima camada do meio satisfaz a equação de biotransferência de calor

$$\rho_r c_r \frac{\partial}{\partial t} T_r(z, t) = k_r \frac{\partial^2}{\partial z^2} T_r(z, t) + \rho_b c_b v_{b,r} [T_b - T_r(z, t)] + q_{m,r}(z, t) + q_{ex,r}(z, t) \quad (2.26)$$

para  $z \in (z_{r-1}, z_r)$  e  $t > 0$ , com

$$q_{ex,r}(z, t) = 2\pi \left( \kappa_r \int_{-1}^1 I_r(z, \mu) d\mu - \int_{-1}^1 s_r(z, \mu) d\mu \right), \quad (2.27)$$

conforme a equação (2.20). Aqui, é assumido que a temperatura inicial é conhecida e que ambas as fronteiras satisfazem equações da forma (2.22), possibilitando a aplicação do modelo a problemas com condições de contorno mistas. Logo, a condição inicial é dada por

$$T_r(z, 0) = T_{i,r}(z) \quad (2.28)$$

para  $z \in (z_{r-1}, z_r)$ , e as condições de contorno por

$$a_1 T_1(0, t) - b_1 \frac{\partial}{\partial z} T_1(z, t) \Big|_{z=0} = f_1(t) \quad (2.29)$$

e

$$a_2 T_R(d, t) + b_2 \frac{\partial}{\partial z} T_R(z, t) \Big|_{z=d} = f_2(t) \quad (2.30)$$

para  $t > 0$ , onde  $a_1$ ,  $b_1$ ,  $a_2$  e  $b_2$  são constantes não negativas e  $f_1$  e  $f_2$  funções conhecidas. Por simplicidade, supõe-se que os termos  $q_{m,r}$ ,  $q_{ex,r}$ ,  $f_1$  e  $f_2$  não dependem da temperatura.

Por fim, nota-se que, para a formulação acima, propriedades óticas ou termofísicas do meio podem ser descontínuas entre camadas adjacentes. Assumindo um índice de refração constante em todo o meio, a continuidade da intensidade, da temperatura e do fluxo de calor, é garantida com as condições de interface [25, 57]

$$I_r(z_r, \mu) = I_{r+1}(z_r, \mu), \quad (2.31)$$

$$T_r(z_r, t) = T_{r+1}(z_r, t) \quad (2.32)$$

e

$$-k_r \frac{\partial}{\partial z} T_r(z, t) \Big|_{z=z_r} = -k_{r+1} \frac{\partial}{\partial z} T_{r+1}(z, t) \Big|_{z=z_r} \quad (2.33)$$

para  $r = 1, 2, \dots, R - 1$  e  $t \geq 0$ .

No próximo capítulo, o problema de transferência radiativa acima é reformulado e o método ADO [4, 9, 11] é aplicado para derivar uma solução analítica na variável espacial para a intensidade. O problema de biotransferência de calor, por outro lado, é abordado no capítulo 4, onde uma formulação em Volumes Finitos [45] é desenvolvida.

### 3 O MÉTODO ADO PARA A EQUAÇÃO DE TRANSFERÊNCIA RADIATIVA

Neste capítulo, o método Analítico de Ordenadas Discretas (ADO) [4, 9, 11] é aplicado a problemas de transferência radiativa com incidência de radiação colimada, conforme as equações (2.23)-(2.25) e (2.31). Primeiramente, o problema é reformulado para eliminar a *função* delta de Dirac do processo de discretização da variável angular. Em seguida, o método ADO é aplicado ao novo problema para calcular uma solução analítica na variável espacial para a intensidade. Por fim, a solução obtida é utilizada para derivar expressões para a radiação incidente e para o fluxo radiativo, duas quantidades de interesse em problemas de transferência radiativa.

A fim de simplificar a construção da solução, a dependência da variável espacial é reescrita em termos da variável (adimensional) ótica [25]

$$\tau(z) = \begin{cases} 0 & \text{se } z = 0, \\ \tau_{r-1} + \beta_r(z - z_{r-1}) & \text{se } z \in (z_{r-1}, z_r], \end{cases} \quad (3.1)$$

onde  $\tau_0 = 0$  e  $\tau_r = \tau_{r-1} + \beta_r(z_r - z_{r-1})$ , e o albedo de espalhamento

$$\omega_r = \frac{\sigma_{s,r}}{\beta_r} \quad (3.2)$$

é utilizado para descrever a absorção e o espalhamento de cada camada do meio. Dessa forma, o problema a ser resolvido é dado pelas equações de transferência radiativa

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} I_r(\tau, \mu) + I_r(\tau, \mu) = \frac{\omega_r}{2} \sum_{l=0}^{L_r} A_{r,l} P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I_r(\tau, \mu') d\mu' + \frac{1}{\beta_r} s_r(\tau, \mu) \quad (3.3)$$

para  $\tau \in (\tau_{r-1}, \tau_r)$ ,  $r = 1, 2, \dots, R$  e  $\mu \in [-1, 1]$ , com condições de contorno

$$I_1(0, \mu) = \frac{q_c}{2\pi} \delta(\mu - \mu_c) + B_1(\mu) + \rho_1^s(\mu) I_1(0, -\mu) + 2\rho_1^d(\mu) \int_0^1 I_1(0, -\mu') \mu' d\mu' \quad (3.4)$$

e

$$I_R(\tau_R, -\mu) = B_2(-\mu) + \rho_2^s(-\mu) I_R(\tau_R, \mu) + 2\rho_2^d(-\mu) \int_0^1 I_R(\tau_R, \mu') \mu' d\mu' \quad (3.5)$$

para  $\mu \in (0, 1]$ , e condições de interface

$$I_r(\tau_r, \mu) = I_{r+1}(\tau_r, \mu) \quad (3.6)$$

para  $r = 1, 2, \dots, R - 1$  e  $\mu \in [-1, 1]$ .

### 3.1 Reformulação do problema via decomposição da intensidade

A presença da *função* delta de Dirac na condição de contorno (3.4) introduz uma componente singular na solução do problema de transferência radiativa (3.3)-(3.6). A fim de eliminar essa componente do processo de discretização, nesta seção o problema é reformulado com base em um procedimento descrito nas referências [5, 47], o qual considera a decomposição da intensidade

$$I(\tau, \mu) = I_\delta(\tau, \mu) + I_*(\tau, \mu), \quad (3.7)$$

com  $I_\delta$  satisfazendo a equação de transferência radiativa

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} I_\delta(\tau, \mu) + I_\delta(\tau, \mu) = 0 \quad (3.8)$$

para  $\tau \in (0, \tau_R)$  e  $\mu \in [-1, 1]$ , e as condições de contorno

$$I_\delta(0, \mu) = \frac{q_c}{2\pi} \delta(\mu - \mu_c) + \rho_1^s(\mu) I_\delta(0, -\mu) \quad (3.9)$$

e

$$I_\delta(\tau_R, -\mu) = \rho_2^s(-\mu) I_\delta(\tau_R, \mu) \quad (3.10)$$

para  $\mu \in (0, 1]$ .

Nesse contexto,  $I_\delta$  e  $I_*$  correspondem, respectivamente, às componentes singular e não singular da intensidade. A componente singular é obtida analiticamente

a partir do problema (3.8)-(3.10), enquanto a componente não singular é aproximada aplicando-se o método ADO (no caso deste trabalho) a um novo problema de transferência radiativa. Como é apresentado na subseção 3.1.2, esse novo problema não possui funções generalizadas em sua formulação matemática e pode ser derivado a partir da introdução da decomposição (3.7) nas equações (3.3)-(3.6), dado que a componente singular tenha sido calculada.

### 3.1.1 Solução analítica para a componente singular da intensidade

Fixado  $\mu \neq 0$ , a equação (3.8) assume a forma de uma equação diferencial ordinária de primeira ordem na variável  $\tau$ , podendo ser reescrita, com a aplicação do método do fator integrante, como

$$\frac{\partial}{\partial \tau} [e^{\tau/\mu} I_\delta(\tau, \mu)] = 0, \quad (3.11)$$

ou, após a integração sobre o intervalo  $(0, \tau)$ , como

$$I_\delta(\tau, \mu) = e^{-\tau/\mu} I_\delta(0, \mu). \quad (3.12)$$

Dado que a equação acima é válida para  $\mu$  positivo e negativo, esta pode ser utilizada para derivar uma condição de contorno adicional na fronteira  $\tau = 0$ . Com efeito, avaliando (3.12) nos pontos  $(\tau_R, -\mu)$  e  $(\tau_R, \mu)$ , são obtidas as equações

$$I_\delta(\tau_R, -\mu) = e^{\tau_R/\mu} I_\delta(0, -\mu) \quad (3.13)$$

e

$$I_\delta(\tau_R, \mu) = e^{-\tau_R/\mu} I_\delta(0, \mu) \quad (3.14)$$

respectivamente, que, ao serem substituídas em (3.10), resultam na condição de contorno

$$I_\delta(0, -\mu) = \rho_2^s(-\mu) e^{-2\tau_R/\mu} I_\delta(0, \mu) \quad (3.15)$$

para  $\mu > 0$ .

As equações (3.9) e (3.15) formam um sistema linear em  $I(0, \mu)$  e  $I(0, -\mu)$ , dado por

$$\begin{bmatrix} 1 & -\rho_1^s(\mu) \\ -\rho_2^s(-\mu)e^{-2\tau_R/\mu} & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} I_\delta(0, \mu) \\ I_\delta(0, -\mu) \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \frac{q_c}{2\pi} \delta(\mu - \mu_c) \\ 0 \end{bmatrix} \quad (3.16)$$

para  $\mu > 0$ . Como os coeficientes de reflexão tomam valores no intervalo  $[0, 1]$ , o sistema admite solução única, visto que seu determinante,  $D(\mu)$ , satisfaz a estimativa [3]

$$D(\mu) = 1 - \rho_1^s(\mu) \rho_2^s(-\mu) e^{-2\tau_R/\mu} \geq 1 - e^{-2\tau_R/\mu} > 0. \quad (3.17)$$

Assim, resolvendo (3.16), são obtidas as condições de contorno

$$I_\delta(0, \mu) = \frac{q_c \delta(\mu - \mu_c)}{2\pi D(\mu)} \quad (3.18)$$

e

$$I_\delta(0, -\mu) = \frac{q_c \delta(\mu - \mu_c)}{2\pi D(\mu)} \rho_2^s(-\mu) e^{-2\tau_R/\mu} \quad (3.19)$$

que, quando substituídas em (3.12), resultam em

$$I_\delta(\tau, \mu) = \frac{q_c \delta(\mu - \mu_c)}{2\pi D(\mu)} e^{-\tau/\mu} \quad (3.20)$$

e

$$I_\delta(\tau, -\mu) = \frac{q_c \delta(\mu - \mu_c)}{2\pi D(\mu)} \rho_2^s(-\mu) e^{-(2\tau_R - \tau)/\mu} \quad (3.21)$$

para  $\tau \in [0, \tau_R]$  e  $\mu \in (0, 1]$ .

As equações (3.20) e (3.21) definem a parte singular da intensidade. É interessante observar que, de acordo com a decomposição proposta, essa componente não depende explicitamente das propriedades do meio quando escrita em termos da variável adimensional, isto é, as soluções encontradas valem para todas as regiões que compõem o domínio.

### 3.1.2 A equação de transferência radiativa para a componente não singular da intensidade

Calculada a componente singular da intensidade, é possível, agora, substituir a decomposição (3.7), considerando as equações (3.20) e (3.21), em cada uma das equações em (3.3) para deduzir que a intensidade  $I_*$ , restrita à  $r$ -ésima camada do meio, satisfaz a equação de transferência radiativa

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} I_{*,r}(\tau, \mu) + I_{*,r}(\tau, \mu) = \frac{\omega_r}{2} \sum_{l=0}^{L_r} A_{r,l} P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I_{*,r}(\tau, \mu') d\mu' + S_r(\tau, \mu) \quad (3.22)$$

para  $\tau \in (\tau_{r-1}, \tau_r)$ ,  $r = 1, 2, \dots, R$  e  $\mu \in [-1, 1]$ , onde o termo fonte  $S_r$  é dado por

$$S_r(\tau, \mu) = \frac{1}{\beta_r} s_r(\tau, \mu) + \frac{q_c \omega_r}{4\pi D(\mu_c)} \sum_{l=0}^{L_r} A_{r,l} P_l(\mu_c) P_l(\mu) \left[ e^{-\tau/\mu_c} + (-1)^l \rho_2^s(-\mu_c) e^{-(2\tau_R - \tau)/\mu_c} \right]. \quad (3.23)$$

Da mesma forma, substituindo (3.7) nas equações (3.4) e (3.5), são obtidas as condições de contorno

$$I_{*,1}(0, \mu) = F_1(\mu) + \rho_1^s(\mu) I_{*,1}(0, -\mu) + 2\rho_1^d(\mu) \int_0^1 I_{*,1}(0, -\mu') \mu' d\mu' \quad (3.24)$$

e

$$I_{*,R}(\tau_R, -\mu) = F_2(-\mu) + \rho_2^s(-\mu) I_{*,R}(\tau_R, \mu) + 2\rho_2^d(-\mu) \int_0^1 I_{*,R}(\tau_R, \mu') \mu' d\mu' \quad (3.25)$$

para  $\mu \in (0, 1]$ , com  $F_1$  e  $F_2$  dados por

$$F_1(\mu) = B_1(\mu) + \frac{q_c \mu_c}{\pi D(\mu_c)} \rho_1^d(\mu) \rho_2^s(-\mu_c) e^{-2\tau_R/\mu_c} \quad (3.26)$$

e

$$F_2(-\mu) = B_2(-\mu) + \frac{q_c \mu_c}{\pi D(\mu_c)} \rho_2^d(-\mu) e^{-\tau_R/\mu_c}. \quad (3.27)$$



Por fim, substituindo (3.7) nas equações em (3.6), são obtidas as condições de interface

$$I_{*,r}(\tau_r, \mu) = I_{*,r+1}(\tau_r, \mu) \quad (3.28)$$

para  $\mu \in [-1, 1]$  e  $r = 1, 2, \dots, R - 1$ .

O problema de transferência radiativa acima define a parte não singular da intensidade. Embora não haja mais a presença de funções generalizadas, essa componente ainda considera a contribuição da radiação colimada incidente sobre a fronteira  $\tau = 0$ . A fração que é espalhada para direções  $\mu \neq \mu_c$  é representada nos termos de fonte  $S_r$ , e a fração que é refletida nas fronteiras de forma difusa é representada nos termos de contorno  $F_1$  e  $F_2$ .

### 3.2 Formulação ADO para a componente não singular da intensidade

Uma vez que a parte singular da intensidade foi determinada analiticamente, o método ADO é aplicado para resolver o problema de transferência radiativa que define a componente não singular. Como as equações em (3.22) são lineares em  $I_{*,r}$ , para cada  $r = 1, 2, \dots, R$  considera-se a decomposição

$$I_{*,r}(\tau, \mu) = I_{*,r}^h(\tau, \mu) + I_{*,r}^p(\tau, \mu), \quad (3.29)$$

onde  $I_{*,r}^h$  é a solução da equação homogênea associada, isto é,

$$\mu \frac{\partial}{\partial \tau} I_{*,r}^h(\tau, \mu) + I_{*,r}^h(\tau, \mu) = \frac{\omega_r}{2} \sum_{l=0}^{L_r} A_{r,l} P_l(\mu) \int_{-1}^1 P_l(\mu') I_{*,r}^h(\tau, \mu') d\mu', \quad (3.30)$$

e  $I_{*,r}^p$  é uma solução particular. No que segue, a discussão é restrita ao caso  $\omega_r \in (0, 1)$ , visto que todos os problemas abordados neste trabalho são definidos em meios não multiplicadores e não conservativos.

### 3.2.1 Solução da equação homogênea associada

Como mencionado anteriormente, a discretização angular proposta no método ADO é baseada em esquemas de quadratura de semi-intervalo. Portanto, inicialmente o termo integral em (3.30) é reescrito sobre o intervalo  $(0, 1)$  com o auxílio da propriedade  $P_l(-\mu) = (-1)^l P_l(\mu)$  dos polinômios de Legendre [1, 4], de modo que

$$\begin{aligned} \mu \frac{\partial}{\partial \tau} I_{*,r}^h(\tau, \mu) + I_{*,r}^h(\tau, \mu) = \\ \frac{\omega_r}{2} \sum_{l=0}^{L_r} A_{r,l} P_l(\mu) \int_0^1 P_l(\mu') \left[ I_{*,r}^h(\tau, \mu') + (-1)^l I_{*,r}^h(\tau, -\mu') \right] d\mu'. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Em seguida, denotando por  $\mu_k$  e  $w_k$ ,  $k = 1, 2, \dots, N$ , os nós e os pesos de uma regra de quadratura qualquer definida sobre o intervalo  $(0, 1]$ , avalia-se (3.31) em cada direção  $\mu = \pm\mu_i$ , resultando em

$$\begin{aligned} \pm\mu_i \frac{d}{d\tau} I_{*,r}^h(\tau, \pm\mu_i) + I_{*,r}^h(\tau, \pm\mu_i) = \\ \frac{\omega_r}{2} \sum_{l=0}^{L_r} A_{r,l} P_l(\mu_i) \sum_{k=1}^N w_k P_l(\mu_k) \left[ I_{*,r}^h(\tau, \pm\mu_k) + (-1)^l I_{*,r}^h(\tau, \mp\mu_k) \right] \end{aligned} \quad (3.32)$$

para  $i = 1, 2, \dots, N$ .

As equações em (3.32) formam um sistema de equações diferenciais ordinárias de primeira ordem na variável  $\tau$ . Portanto, supondo soluções exponenciais da forma

$$I_{*,r}^h(\tau, \pm\mu_i) = \phi(\nu_r, \pm\mu_i) e^{-\tau/\nu_r}, \quad (3.33)$$

ao substituir (3.33) em (3.32), são obtidas as equações

$$\begin{aligned} \pm\mu_i \frac{d}{d\tau} \left[ \phi(\nu_r, \pm\mu_i) e^{-\tau/\nu_r} \right] + \phi(\nu_r, \pm\mu_i) e^{-\tau/\nu_r} = \\ \frac{\omega_r}{2} \sum_{l=0}^{L_r} A_{r,l} P_l(\mu_i) \sum_{k=1}^N w_k P_l(\mu_k) \left[ \phi(\nu_r, \pm\mu_k) + (-1)^l \phi(\nu_r, \mp\mu_k) \right] e^{-\tau/\nu_r}, \end{aligned} \quad (3.34)$$

ou, de maneira equivalente,

$$\begin{aligned} \left(1 \mp \frac{\mu_i}{\nu_r}\right) \phi(\nu_r, \pm\mu_i) = \\ \frac{\omega_r}{2} \sum_{l=0}^{L_r} A_{r,l} P_l(\mu_i) \sum_{k=1}^N w_k P_l(\mu_k) \left[ \phi(\nu_r, \pm\mu_k) + (-1)^l \phi(\nu_r, \mp\mu_k) \right] \end{aligned} \quad (3.35)$$

para  $i = 1, 2, \dots, N$ .

Como demonstrado por Barichello [4], o conjunto de constantes de separação  $\nu_r$  e a autofunção  $\phi$ , avaliada nos pontos  $(\nu_r, \pm\mu_i)$ , podem ser obtidos a partir de um problema de autovalores e autovetores derivado das equações em (3.35). Sendo assim, são introduzidos os vetores do  $\mathbb{R}^N$

$$\mathbf{\Phi}_{\pm}(\nu_r) = [\phi(\nu_r, \pm\mu_1) \quad \phi(\nu_r, \pm\mu_2) \quad \cdots \quad \phi(\nu_r, \pm\mu_N)]^T \quad (3.36)$$

e

$$\mathbf{\Pi}_l = [P_l(\mu_1) \quad P_l(\mu_2) \quad \cdots \quad P_l(\mu_N)]^T \quad (3.37)$$

e as matrizes diagonais do  $\mathbb{R}^{N \times N}$

$$\mathbf{M} = \text{diag} \{ \mu_1, \mu_2, \dots, \mu_N \} \quad (3.38)$$

e

$$\mathbf{W} = \text{diag} \{ w_1, w_2, \dots, w_N \} \quad (3.39)$$

para reescrever (3.35) na forma de duas equações matriciais, dadas por

$$\left( \mathbf{I} \mp \frac{1}{\nu_r} \mathbf{M} \right) \mathbf{\Phi}_{\pm}(\nu_r) = \frac{\omega_r}{2} \sum_{l=0}^{L_r} A_{r,l} \mathbf{\Pi}_l \mathbf{\Pi}_l^T \mathbf{W} \left[ \mathbf{\Phi}_{\pm}(\nu_r) + (-1)^l \mathbf{\Phi}_{\mp}(\nu_r) \right], \quad (3.40)$$

onde  $T$  denota a operação de transposição e  $\mathbf{I}$  a matriz identidade do  $\mathbb{R}^{N \times N}$ . Na sequência, definindo os vetores

$$\mathbf{U}(\nu_r) = \mathbf{\Phi}_+(\nu_r) + \mathbf{\Phi}_-(\nu_r) \quad (3.41)$$

e

$$\mathbf{V}(\nu_r) = \mathbf{\Phi}_+(\nu_r) - \mathbf{\Phi}_-(\nu_r), \quad (3.42)$$

a soma das duas equações em (3.40) é expressa como

$$\mathbf{U}(\nu_r) - \frac{1}{\nu_r} \mathbf{M} \mathbf{V}(\nu_r) = \frac{\omega_r}{2} \sum_{l=0}^{L_r} A_{r,l} \mathbf{\Pi}_l \mathbf{\Pi}_l^T \mathbf{W} \left[ 1 + (-1)^l \right] \mathbf{U}(\nu_r), \quad (3.43)$$

ou, após manipulações algébricas, como

$$\left( \mathbf{I} - \frac{\omega_r}{2} \sum_{l=0}^{L_r} A_{r,l} \mathbf{\Pi}_l \mathbf{\Pi}_l^T \mathbf{W} \left[ 1 + (-1)^l \right] \right) \mathbf{M}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{U}(\nu_r) = \frac{1}{\nu_r} \mathbf{M} \mathbf{V}(\nu_r). \quad (3.44)$$

Analogamente, a diferença das equações em (3.40) é escrita como

$$\mathbf{V}(\nu_r) - \frac{1}{\nu_r} \mathbf{M} \mathbf{U}(\nu_r) = \frac{\omega_r}{2} \sum_{l=0}^{L_r} A_{r,l} \mathbf{\Pi}_l \mathbf{\Pi}_l^T \mathbf{W} \left[ 1 - (-1)^l \right] \mathbf{V}(\nu_r), \quad (3.45)$$

de onde resulta

$$\left( \mathbf{I} - \frac{\omega_r}{2} \sum_{l=0}^{L_r} A_{r,l} \mathbf{\Pi}_l \mathbf{\Pi}_l^T \mathbf{W} \left[ 1 - (-1)^l \right] \right) \mathbf{M}^{-1} \mathbf{M} \mathbf{V}(\nu_r) = \frac{1}{\nu_r} \mathbf{M} \mathbf{U}(\nu_r). \quad (3.46)$$

Visto que  $\mu_i > 0$  para  $i = 1, 2, \dots, N$ , a inversa da matriz  $\mathbf{M}$  é uma matriz bem definida e, portanto, também são as equações (3.44) e (3.46). Assim, considerando os vetores

$$\mathbf{X}(\nu_r) = \mathbf{M} \mathbf{U}(\nu_r) \quad (3.47)$$

e

$$\mathbf{Y}(\nu_r) = \mathbf{M} \mathbf{V}(\nu_r) \quad (3.48)$$

e as matrizes

$$\mathbf{A}_r = \left( \mathbf{I} - \frac{\omega_r}{2} \sum_{l=0}^{L_r} A_{r,l} \mathbf{\Pi}_l \mathbf{\Pi}_l^T \mathbf{W} \left[ 1 + (-1)^l \right] \right) \mathbf{M}^{-1} \quad (3.49)$$

e

$$\mathbf{B}_r = \left( \mathbf{I} - \frac{\omega_r}{2} \sum_{l=0}^{L_r} A_{r,l} \mathbf{\Pi}_l \mathbf{\Pi}_l^T \mathbf{W} \left[ 1 - (-1)^l \right] \right) \mathbf{M}^{-1}, \quad (3.50)$$

(3.44) e (3.46) podem ser reescritas como

$$\mathbf{A}_r \mathbf{X}(\nu_r) = \frac{1}{\nu_r} \mathbf{Y}(\nu_r) \quad (3.51)$$

e

$$\mathbf{B}_r \mathbf{Y}(\nu_r) = \frac{1}{\nu_r} \mathbf{X}(\nu_r), \quad (3.52)$$

respectivamente. Multiplicando (3.51) a esquerda por  $\mathbf{B}_r$  e utilizando (3.52), segue que

$$(\mathbf{B}_r \mathbf{A}_r) \mathbf{X}(\nu_r) = \frac{1}{\nu_r^2} \mathbf{X}(\nu_r). \quad (3.53)$$

Para cada camada do meio, o problema de autovalores acima determina o conjunto de  $2N$  constantes de separação. É fácil ver que estas constantes ocorrem em pares de números positivos e negativos, denotados aqui por  $\pm\nu_{r,j}$ ,  $j = 1, 2, \dots, N$ . Do ponto de vista computacional, vale ressaltar que o problema (3.53) é de ordem reduzida em comparação ao método de ordenadas discretas padrão de ordem  $N$ , o qual é baseado no uso de esquemas de quadratura de intervalo completo.

Prosseguindo, note que

$$\nu_r \mathbf{A}_r \mathbf{X}(\nu_r) = \mathbf{Y}(\nu_r), \quad (3.54)$$

por (3.51). Ao somar  $\pm\mathbf{X}(\nu_r)$  a ambos os lados de (3.54), são obtidas as equações

$$(\pm\mathbf{I} + \nu_r \mathbf{A}_r) \mathbf{X}(\nu_r) = \pm\mathbf{X}(\nu_r) + \mathbf{Y}(\nu_r), \quad (3.55)$$

que podem ser reescritas como

$$(\pm\mathbf{I} + \nu_r \mathbf{A}_r) \mathbf{X}(\nu_r) = \mathbf{M}[\pm\mathbf{U}(\nu_r) + \mathbf{V}(\nu_r)], \quad (3.56)$$

ou, ainda, como

$$(\pm\mathbf{I} + \nu_r \mathbf{A}_r) \mathbf{X}(\nu_r) = \pm 2\mathbf{M}\Phi_{\pm}(\nu_r). \quad (3.57)$$

Logo, a partir de (3.57), são derivadas as expressões

$$\Phi_{\pm}(\nu_r) = \frac{1}{2} \mathbf{M}^{-1} (\mathbf{I} \pm \nu_r \mathbf{A}_r) \mathbf{X}(\nu_r), \quad (3.58)$$

que relacionam os vetores de autofunções  $\Phi_{\pm}(\nu_r)$  aos autovetores de (3.53). Cabe observar que esses vetores satisfazem a identidade  $\Phi_{\pm}(-\nu_r) = \Phi_{\mp}(\nu_r)$ , útil para a

escrita da solução ADO e válida pois

$$\begin{aligned}\Phi_{\pm}(-\nu_r) &= \frac{1}{2}\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{I} \pm (-\nu_r)\mathbf{A}_r)\mathbf{X}(-\nu_r) \\ &= \frac{1}{2}\mathbf{M}^{-1}(\mathbf{I} \mp \nu_r\mathbf{A}_r)\mathbf{X}(\nu_r) = \Phi_{\mp}(\nu_r).\end{aligned}\tag{3.59}$$

Por fim, supondo que as constantes de separação  $\nu_{r,j}$  e os vetores de autofunções  $\Phi_{\pm}(\nu_{r,j})$  tenham sido calculados, utiliza-se o princípio da superposição para escrever a solução aproximada em ordenadas discretas de cada equação em (3.30), em notação vetorial, como

$$\mathbf{I}_{*,r,\pm}^h(\tau) = \sum_{j=1}^N A_{r,j}\Phi_{\pm}(\nu_{r,j})e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\nu_{r,j}} + B_{r,j}\Phi_{\mp}(\nu_{r,j})e^{-(\tau_r-\tau)/\nu_{r,j}}\tag{3.60}$$

para  $\tau \in [\tau_{r-1}, \tau_r]$  e  $r = 1, 2, \dots, R$ , onde

$$\mathbf{I}_{*,r,\pm}^h(\tau) = [I_{*,r}^h(\tau, \pm\mu_1) \quad I_{*,r}^h(\tau, \pm\mu_2) \quad \cdots \quad I_{*,r}^h(\tau, \pm\mu_N)]^T.\tag{3.61}$$

Como é apresentado na seção 3.2.3, os coeficientes de superposição  $A_{r,j}$  e  $B_{r,j}$  podem ser determinados a partir da aplicação das condições de contorno e de interface. É interessante observar que as exponenciais em (3.60) foram escritas de maneira deslocada, de modo a evitar expoentes positivos e, conseqüentemente, a possibilidade de *overflow* durante sua avaliação numérica [4].

### 3.2.2 Solução particular via função de Green

A solução particular que complementa a solução homogênea descrita acima foi proposta por Barichello, Garcia e Siewert [6]. De forma resumida, utiliza-se uma relação de ortogonalidade satisfeita pelas autofunções no intervalo  $[-1, 1]$  para construir uma versão em ordenadas discretas da função de Green para um meio infinito e com espalhamento anisotrópico. Essa função é, então, utilizada para construir uma solução particular para o problema. Aqui, os detalhes desse procedimento são omitidos, sendo apresentada apenas a forma final da solução.

Definindo os vetores

$$\mathbf{I}_{*,r,\pm}^p(\tau) = [I_{*,r}^p(\tau, \pm\mu_1) \quad I_{*,r}^p(\tau, \pm\mu_2) \quad \cdots \quad I_{*,r}^p(\tau, \pm\mu_N)]^T, \quad (3.62)$$

a solução particular em ordenadas discretas da equação (3.22) pode ser escrita, em notação vetorial, como [6]

$$\mathbf{I}_{*,r,\pm}^p(\tau) = \sum_{j=1}^N C_{r,j}(\tau) \mathbf{\Phi}_{\pm}(\nu_{r,j}) + D_{r,j}(\tau) \mathbf{\Phi}_{\mp}(\nu_{r,j}) \quad (3.63)$$

para  $\tau \in [\tau_{r-1}, \tau_r]$  e  $r = 1, 2, \dots, R$ , onde as funções  $C_{r,j}$  e  $D_{r,j}$  são dadas por

$$C_{r,j}(\tau) = \frac{1}{\mathcal{N}(\nu_{r,j})} \sum_{k=1}^N w_k \int_{\tau_{r-1}}^{\tau} [S_r(\tau', \mu_k) \phi(\nu_{r,j}, \mu_k) + S_r(\tau', -\mu_k) \phi(\nu_{r,j}, -\mu_k)] e^{-(\tau-\tau')/\nu_{r,j}} d\tau' \quad (3.64)$$

e

$$D_{r,j}(\tau) = \frac{1}{\mathcal{N}(\nu_{r,j})} \sum_{k=1}^N w_k \int_{\tau}^{\tau_r} [S_r(\tau', \mu_k) \phi(\nu_{r,j}, -\mu_k) + S_r(\tau', -\mu_k) \phi(\nu_{r,j}, \mu_k)] e^{-(\tau'-\tau)/\nu_{r,j}} d\tau', \quad (3.65)$$

com

$$\mathcal{N}(\nu_{r,j}) = \sum_{k=1}^N w_k \mu_k [\phi(\nu_{r,j}, \mu_k)^2 - \phi(\nu_{r,j}, -\mu_k)^2]. \quad (3.66)$$

Por conta do formato dos termos de fonte  $S_r$ , dados em (3.23), a solução particular pode ser simplificada decompondo-a em duas parcelas: uma referente à fonte de radiação  $s_r$  e outra referente à radiação colimada incidente [26]. Considerando as quantidades

$$\mathcal{S}_{\pm}(\nu_{r,j}) = \sum_{l=0}^{L_r} A_{r,l} P_l(\mu_c) \sum_{k=1}^N w_k P_l(\mu_k) \left[ \phi(\nu_{r,j}, \pm\mu_k) + (-1)^l \phi(\nu_{r,j}, \mp\mu_k) \right], \quad (3.67)$$

ao substituir (3.23) em (3.64), a função  $C_{r,j}$  é reescrita como

$$C_{r,j}(\tau) = C_{r,j}^s(\tau) + C_{r,j}^{qc}(\tau), \quad (3.68)$$

onde

$$C_{r,j}^s(\tau) = \frac{1}{\beta_r \mathcal{N}(\nu_{r,j})} \sum_{k=1}^N w_k \int_{\tau_{r-1}}^{\tau} \left[ s_r(\tau', \mu_k) \phi(\nu_{r,j}, \mu_k) + s_r(\tau', -\mu_k) \phi(\nu_{r,j}, -\mu_k) \right] e^{-(\tau-\tau')/\nu_{r,j}} d\tau' \quad (3.69)$$

e

$$C_{r,j}^{qc}(\tau) = \frac{q_c \omega_r}{4\pi D(\mu_c) \mathcal{N}(\nu_{r,j})} \left[ \mathcal{S}_+(\nu_{r,j}) \mathcal{I}_{r,j}^1(\tau) + \rho_2^s(-\mu_c) \mathcal{S}_-(\nu_{r,j}) \mathcal{I}_{r,j}^2(\tau) \right], \quad (3.70)$$

com

$$\mathcal{I}_{r,j}^1(\tau) = \begin{cases} \frac{\mu_c \nu_{r,j}}{\mu_c - \nu_{r,j}} (e^{-\tau/\mu_c} - e^{-\tau_{r-1}/\mu_c} e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\nu_{r,j}}) & \text{se } \nu_{r,j} \neq \mu_c, \\ e^{-\tau/\mu_c} (\tau - \tau_{r-1}) & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (3.71)$$

e

$$\mathcal{I}_{r,j}^2(\tau) = \frac{\mu_c \nu_{r,j}}{\mu_c + \nu_{r,j}} (e^{-(2\tau_R - \tau)/\mu_c} - e^{-(2\tau_R - \tau_{r-1})/\mu_c} e^{-(\tau - \tau_{r-1})/\nu_{r,j}}). \quad (3.72)$$

Da mesma forma, ao substituir (3.23) em (3.65), a função  $D_{r,j}$  é reescrita

como

$$D_{r,j}(\tau) = D_{r,j}^s(\tau) + D_{r,j}^{qc}(\tau), \quad (3.73)$$

onde

$$D_{r,j}^s(\tau) = \frac{1}{\beta_r \mathcal{N}(\nu_{r,j})} \sum_{k=1}^N w_k \int_{\tau}^{\tau_r} \left[ s_r(\tau', \mu_k) \phi(\nu_{r,j}, -\mu_k) + s_r(\tau', -\mu_k) \phi(\nu_{r,j}, \mu_k) \right] e^{-(\tau'-\tau)/\nu_{r,j}} d\tau' \quad (3.74)$$

e

$$D_{r,j}^{qc}(\tau) = \frac{q_c \omega_r}{4\pi D(\mu_c) \mathcal{N}(\nu_{r,j})} \left[ \mathcal{S}_-(\nu_{r,j}) \mathcal{I}_{r,j}^3(\tau) + \rho_2^s(-\mu_c) \mathcal{S}_+(\nu_{r,j}) \mathcal{I}_{r,j}^4(\tau) \right], \quad (3.75)$$

com

$$\mathcal{I}_{r,j}^3(\tau) = \frac{\mu_c \nu_{r,j}}{\mu_c + \nu_{r,j}} (e^{-\tau/\mu_c} - e^{-\tau_r/\mu_c} e^{-(\tau_r - \tau)/\nu_{r,j}}) \quad (3.76)$$

e

$$\mathcal{I}_{r,j}^4(\tau) = \begin{cases} \frac{\mu_c \nu_{r,j}}{\mu_c - \nu_{r,j}} (e^{-(2\tau_R - \tau)/\mu_c} - e^{-(2\tau_R - \tau_r)/\mu_c} e^{-(\tau_r - \tau)/\nu_{r,j}}) & \text{se } \nu_{r,j} \neq \mu_c, \\ e^{-(2\tau_R - \tau)/\mu_c} (\tau_r - \tau) & \text{caso contrário.} \end{cases} \quad (3.77)$$



Logo, a forma final da solução particular é dada por

$$\begin{aligned} \mathbf{I}_{*,r,\pm}^p(\tau) = & \sum_{j=1}^N C_{r,j}^s(\tau) \Phi_{\pm}(\nu_{r,j}) + D_{r,j}^s(\tau) \Phi_{\mp}(\nu_{r,j}) + \\ & \sum_{j=1}^N C_{r,j}^{qc}(\tau) \Phi_{\pm}(\nu_{r,j}) + D_{r,j}^{qc}(\tau) \Phi_{\mp}(\nu_{r,j}), \end{aligned} \quad (3.78)$$

para  $\tau \in [\tau_{r-1}, \tau_r]$  e  $r = 1, 2, \dots, R$ .

### 3.2.3 Coeficientes de superposição

De posse das expressões (3.60) e (3.78), a solução aproximada em ordenadas discretas de (3.22) pode ser escrita, em notação vetorial, como

$$\begin{aligned} \mathbf{I}_{*,r,\pm}(\tau) = & \sum_{j=1}^N [A_{r,j} \Phi_{\pm}(\nu_{r,j}) e^{-(\tau-\tau_{r-1})/\nu_{r,j}} + B_{r,j} \Phi_{\mp}(\nu_{r,j}) e^{-(\tau_r-\tau)/\nu_{r,j}}] + \\ & \mathbf{I}_{*,r,\pm}^p(\tau) \end{aligned} \quad (3.79)$$

para  $\tau \in [\tau_{r-1}, \tau_r]$  e  $r = 1, 2, \dots, R$ , conforme a decomposição (3.29). Supondo que as constantes de separação  $\nu_{r,j}$  e os vetores de autofunções  $\Phi_{\pm}(\nu_{r,j})$  tenham sido calculados para cada camada do meio, a equação (3.79) pode ser utilizada assim que os coeficientes de superposição  $A_{r,j}$  e  $B_{r,j}$  forem determinados. Como é apresentado a seguir, esses coeficientes são obtidos resolvendo-se um sistema linear de ordem  $2NR$ , construído a partir da aplicação das condições de contorno (3.24) e (3.25) e das condições de interface (3.28).

Avaliando as condições de contorno (3.24) e (3.25) em cada direção  $\mu = \mu_i$  e aproximando os termos integrais presentes nessas expressões pela regra de quadratura já utilizada, são obtidas as equações

$$\begin{aligned} I_{*,1}(0, \mu_i) = & F_1(\mu_i) + \rho_1^s(\mu_i) I_{*,1}(0, -\mu_i) + \\ & 2\rho_1^d(\mu_i) \sum_{k=1}^N w_k \mu_k I_{*,1}(0, -\mu_k) \end{aligned} \quad (3.80)$$

e

$$I_{*,R}(\tau_R, -\mu_i) = F_2(-\mu_i) + \rho_2^s(-\mu_i) I_{*,R}(\tau_R, \mu_i) + 2\rho_2^d(-\mu_i) \sum_{k=0}^N w_k \mu_k I_{*,R}(\tau_R, \mu_k) \quad (3.81)$$

para  $i = 1, 2, \dots, N$ . Em seguida, definindo os vetores do  $\mathbb{R}^N$

$$\mathbf{F}_1 = [F_1(\mu_1) \quad F_1(\mu_2) \quad \cdots \quad F_1(\mu_N)]^T, \quad (3.82)$$

$$\mathbf{F}_2 = [F_2(-\mu_1) \quad F_2(-\mu_2) \quad \cdots \quad F_2(-\mu_N)]^T \quad (3.83)$$

e

$$\mathbf{1} = [1 \quad 1 \quad \cdots \quad 1]^T \quad (3.84)$$

e as matrizes diagonais do  $\mathbb{R}^{N \times N}$

$$\boldsymbol{\rho}_1^s = \text{diag}\{\rho_1^s(\mu_1), \rho_1^s(\mu_2), \dots, \rho_1^s(\mu_N)\} \quad (3.85)$$

$$\boldsymbol{\rho}_1^d = \text{diag}\{\rho_1^d(\mu_1), \rho_1^d(\mu_2), \dots, \rho_1^d(\mu_N)\}, \quad (3.86)$$

$$\boldsymbol{\rho}_2^s = \text{diag}\{\rho_2^s(-\mu_1), \rho_2^s(-\mu_2), \dots, \rho_2^s(-\mu_N)\} \quad (3.87)$$

e

$$\boldsymbol{\rho}_2^d = \text{diag}\{\rho_2^d(-\mu_1), \rho_2^d(-\mu_2), \dots, \rho_2^d(-\mu_N)\}, \quad (3.88)$$

utiliza-se a decomposição (3.29) junto das expressões em (3.79) para reescrever as equações (3.80) e (3.81) como

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^N A_{1,j} [\boldsymbol{\Phi}_+(\nu_{1,j}) - \boldsymbol{\rho}_1^s \boldsymbol{\Phi}_-(\nu_{1,j}) - 2(\mathbf{1}^T \mathbf{M} \mathbf{W} \boldsymbol{\Phi}_-(\nu_{1,j})) \boldsymbol{\rho}_1^d \mathbf{1}] \\ & + B_{1,j} [\boldsymbol{\Phi}_-(\nu_{1,j}) - \boldsymbol{\rho}_1^s \boldsymbol{\Phi}_+(\nu_{1,j}) - 2(\mathbf{1}^T \mathbf{M} \mathbf{W} \boldsymbol{\Phi}_+(\nu_{1,j})) \boldsymbol{\rho}_1^d \mathbf{1}] e^{-\tau_1/\nu_{1,j}} = \\ & \mathbf{F}_1 - \mathbf{I}_{*,1,+}^p(0) + \boldsymbol{\rho}_1^s \mathbf{I}_{*,1,-}^p(0) + 2(\mathbf{1}^T \mathbf{M} \mathbf{W} \mathbf{I}_{*,1,-}^p(0)) \boldsymbol{\rho}_1^d \mathbf{1} \end{aligned} \quad (3.89)$$

e

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^N A_{R,j} [\boldsymbol{\Phi}_-(\nu_{R,j}) - \boldsymbol{\rho}_2^s \boldsymbol{\Phi}_+(\nu_{R,j}) - 2(\mathbf{1}^T \mathbf{M} \mathbf{W} \boldsymbol{\Phi}_+(\nu_{R,j})) \boldsymbol{\rho}_2^d \mathbf{1}] e^{-(\tau_R - \tau_{R-1})/\nu_{R,j}} \\ & + B_{R,j} [\boldsymbol{\Phi}_+(\nu_{R,j}) - \boldsymbol{\rho}_2^s \boldsymbol{\Phi}_-(\nu_{R,j}) - 2(\mathbf{1}^T \mathbf{M} \mathbf{W} \boldsymbol{\Phi}_-(\nu_{R,j})) \boldsymbol{\rho}_2^d \mathbf{1}] = \\ & \mathbf{F}_2 - \mathbf{I}_{*,R,-}^p(\tau_R) + \boldsymbol{\rho}_2^s \mathbf{I}_{*,R,+}^p(\tau_R) + 2(\mathbf{1}^T \mathbf{M} \mathbf{W} \mathbf{I}_{*,R,+}^p(\tau_R)) \boldsymbol{\rho}_2^d \mathbf{1}, \end{aligned} \quad (3.90)$$

respectivamente. As equações matriciais acima formam o conjunto de  $2N$  equações satisfeitas pela solução ADO nos pontos de contorno  $\tau_0$  e  $\tau_R$ . É importante notar que o uso de uma quadratura de semi-intervalo em (3.80) e (3.81) tende a produzir melhores aproximações das condições de contorno em comparação às produzidas por quadraturas de intervalo completo, visto que todos os nós encontram-se no intervalo  $\mu \in (0, 1]$ .

Prosseguindo, analogamente às condições de contorno, as condições de interface em (3.28) são avaliadas nas direções  $\mu = \pm\mu_i$ , isto é,

$$I_{*,r}(\tau_r, \pm\mu_i) = I_{*,r+1}(\tau_r, \pm\mu_i) \quad (3.91)$$

para  $i = 1, 2, \dots, N$ . A decomposição (3.29) é, então, utilizada junto das expressões em (3.79), resultando no conjunto de  $2N(R-1)$  equações, escritas em notação matricial,

$$\begin{aligned} & \sum_{j=1}^N [A_{r,j} \mathbf{\Phi}_{\pm}(\nu_{r,j}) e^{-(\tau_r - \tau_{r-1})/\nu_{r,j}} + B_{r,j} \mathbf{\Phi}_{\mp}(\nu_{r,j})] \\ & - [A_{r+1,j} \mathbf{\Phi}_{\pm}(\nu_{r+1,j}) + B_{r+1,j} \mathbf{\Phi}_{\mp}(\nu_{r+1,j}) e^{-(\tau_{r+1} - \tau_r)/\nu_{r+1,j}}] = \\ & \mathbf{I}_{*,r+1,\pm}^p(\tau_r) - \mathbf{I}_{*,r,\pm}^p(\tau_r). \end{aligned} \quad (3.92)$$

As equações matriciais (3.89), (3.90) e (3.92) formam um sistema linear de ordem  $2NR$  cujas coordenadas do vetor solução são os coeficientes de superposição. Uma vez resolvido esse sistema, a aproximação da componente não singular da intensidade em ordenadas discretas passa a ser conhecida analiticamente em termos da variável espacial para cada da direção  $\pm\mu_i$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$ . Caso seja de interesse obter a intensidade para outros valores de  $\mu$ , deve-se utilizar um esquema de interpolação angular, como a técnica de integração da função-fonte ou a técnica de inclusão de nós mudos [4, 16].

### 3.3 Quantidades de interesse: radiação incidente e fluxo radiativo

Diversas quantidades de interesse podem, agora, ser aproximadas a partir da solução obtida nas seções anteriores. Como exemplo, nesta seção são apresentadas aproximações para a radiação incidente e para o fluxo radiativo.

A radiação incidente, definida por [47]

$$G_r(\tau) = 2\pi \int_{-1}^1 I_r(\tau, \mu) d\mu \quad (3.93)$$

para  $\tau \in [\tau_{r-1}, \tau_r]$  e presente no cálculo do termo de radiação em (2.27), pode ser reescrita como a soma das integrais

$$G_r(\tau) = 2\pi \int_0^1 [I_\delta(\tau, \mu) + I_\delta(\tau, -\mu)] d\mu + 2\pi \int_0^1 [I_{*,r}(\tau, \mu) + I_{*,r}(\tau, -\mu)] d\mu, \quad (3.94)$$

conforme a decomposição (3.7). A primeira integral é resolvida de forma exata, dada a expressão analítica derivada para a componente singular da intensidade. A segunda integral é aproximada a partir da mesma regra de quadratura empregada na discretização da componente não singular. Assim, por (3.20), (3.21), (3.79) e (3.94), obtém-se a expressão

$$G_r(\tau) = \frac{q_c}{D(\mu_c)} [e^{-\tau/\mu_c} + \rho_2^s(-\mu_c) e^{-(2\tau_R - \tau)/\mu_c}] + 2\pi \sum_{j=1}^N [A_{r,j} e^{-(\tau - \tau_{r-1})/\nu_{r,j}} + B_{r,j} e^{-(\tau_r - \tau)/\nu_{r,j}} + C_{r,j}^s(\tau) + D_{r,j}^s(\tau) + C_{r,j}^{q_c}(\tau) + D_{r,j}^{q_c}(\tau)] \Phi_0(\nu_{r,j}), \quad (3.95)$$

onde

$$\Phi_0(\nu_{r,j}) = \sum_{k=1}^N w_k [\phi(\nu_{r,j}, \mu_k) + \phi(\nu_{r,j}, -\mu_k)]. \quad (3.96)$$

De forma inteiramente análoga, o fluxo radiativo, definido por [37]

$$q_r(\tau) = 2\pi \int_{-1}^1 I_r(\tau, \mu) \mu d\mu \quad (3.97)$$

para  $\tau \in [\tau_{r-1}, \tau_r]$ , pode ser aproximado pela expressão

$$\begin{aligned}
q_r(\tau) = & \frac{q_c \mu_c}{D(\mu_c)} \left[ e^{-\tau/\mu_c} - \rho_2^s(-\mu_c) e^{-(2\tau_R - \tau)/\mu_c} \right] + \\
& 2\pi \sum_{j=1}^N \left[ A_{r,j} e^{-(\tau - \tau_{r-1})/\nu_{r,j}} - B_{r,j} e^{-(\tau_r - \tau)/\nu_{r,j}} + \right. \\
& \left. C_{r,j}^s(\tau) - D_{r,j}^s(\tau) + C_{r,j}^{q_c}(\tau) - D_{r,j}^{q_c}(\tau) \right] \Phi_1(\nu_{r,j}), \tag{3.98}
\end{aligned}$$

onde

$$\Phi_1(\nu_{r,j}) = \sum_{k=1}^N w_k \mu_k [\phi(\nu_{r,j}, \mu_k) + \phi(\nu_{r,j}, -\mu_k)]. \tag{3.99}$$

Como é possível observar, as soluções obtidas pelo método ADO são concisas e relativamente fáceis de implementar. No capítulo 5, a precisão dessas expressões é comparada a de outros métodos utilizados na área. Antes, no capítulo 4, o problema de biotransferência de calor definido pelas equações (2.26)-(2.30), (2.32) e (2.33) é abordado. Como já mencionado, uma versão recente do método de Volumes Finitos [45] é aplicada ao problema de modo preservar a estrutura tridiagonal da discretização clássica em meios homogêneos.

## 4 O MÉTODO DE VOLUMES FINITOS PARA A EQUAÇÃO DE BIOTRANSFERÊNCIA DE CALOR DE PENNES

Neste capítulo, a versão do método de Volumes Finitos proposta por March e Carr [45] para a equação de difusão em meios multicamada é aplicada a problemas de biotransferência de calor, conforme as equações (2.26)-(2.30), (2.32) e (2.33). Como mencionado na referência, diversos métodos clássicos foram adaptados a problemas de difusão em meios multicamada, como o método de Elementos Finitos [27] e o método de Diferenças Finitas [30]. Aqui, a proposta de March e Carr é utilizada por preservar, de forma simples, a estrutura tridiagonal da discretização clássica em meios homogêneos, propriedade desejável do ponto de vista computacional.

Dessa forma, primeiramente a discretização da variável espacial é apresentada e as equações em volumes finitos são desenvolvidas. Em seguida, a distribuição de temperatura é obtida como solução de um sistema linear tridiagonal recursivo, derivado a partir da discretização da variável temporal. Nesse sentido, para simplificar a descrição do método, cada equação em (2.26) é reescrita como

$$\frac{\partial}{\partial t} T_r(z, t) = \alpha_r \frac{\partial^2}{\partial z^2} T_r(z, t) - \gamma_r T_r(z, t) + Q_r(z, t), \quad (4.1)$$

onde os coeficientes  $\alpha_r$  e  $\gamma_r$  são dados por

$$\alpha_r = \frac{k_r}{\rho_r c_r} \quad (4.2)$$

e

$$\gamma_r = \frac{\rho_b c_b v_{b,r}}{\rho_r c_r}, \quad (4.3)$$

e o termo fonte  $Q_r$  é dado por

$$Q_r(z, t) = \gamma_r T_b + \frac{q_{m,r}(z, t) + q_{ex,r}(z, t)}{\rho_r c_r}. \quad (4.4)$$

A notação utilizada para expressar a condição inicial (2.28), as condições de contorno (2.29) e (2.30), e as condições de interface (2.32) e (2.33) permanece a mesma apresentada na seção 2.3, isto é,

$$T_r(z, 0) = T_{i,r}(z) \quad (4.5)$$

para  $z \in (z_{r-1}, z_r)$ ,  $r = 1, 2, \dots, R$ ,

$$a_1 T_1(0, t) - b_1 \frac{\partial}{\partial z} T_1(z, t) \Big|_{z=0} = f_1(t) \quad (4.6)$$

e

$$a_2 T_R(d, t) + b_2 \frac{\partial}{\partial z} T_R(z, t) \Big|_{z=d} = f_2(t) \quad (4.7)$$

para  $t > 0$ , e

$$T_r(z_r, t) = T_{r+1}(z_r, t) \quad (4.8)$$

e

$$-k_r \frac{\partial}{\partial z} T_r(z, t) \Big|_{z=z_r} = -k_{r+1} \frac{\partial}{\partial z} T_{r+1}(z, t) \Big|_{z=z_r} \quad (4.9)$$

para  $r = 1, 2, \dots, R - 1$  e  $t \geq 0$ .

## 4.1 Discretização da variável espacial

A discretização da variável espacial é realizada utilizando-se uma malha uniforme em cada camada do meio, com pontos dados por

$$z_{r,j} = z_{r-1} + j h_r \quad (4.10)$$

para  $j = 0, 1, \dots, N_r - 1$  e  $r = 1, 2, \dots, R$ , onde  $N_r$  e  $h_r = (z_r - z_{r-1}) / (N_r - 1)$  são, respectivamente, o número de pontos e o espaçamento referentes à  $r$ -ésima camada do domínio. O volume finito correspondente ao ponto  $z = z_{r,j}$  é definido como sendo o intervalo  $V_{r,j} = (z_{r,j}^e, z_{r,j}^d)$ , com

$$z_{r,j}^e = \begin{cases} z_{r-1} & \text{se } j = 0, \\ \frac{1}{2} (z_{r,j-1} + z_{r,j}) & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (4.11)$$

e

$$z_{r,j}^d = \begin{cases} z_r & \text{se } j = N_r - 1, \\ \frac{1}{2} (z_{r,j} + z_{r,j+1}) & \text{caso contrário,} \end{cases} \quad (4.12)$$

sendo seu tamanho denotado por  $\Delta z_{r,j} = z_{r,j}^d - z_{r,j}^e$  (Figura 4.1).

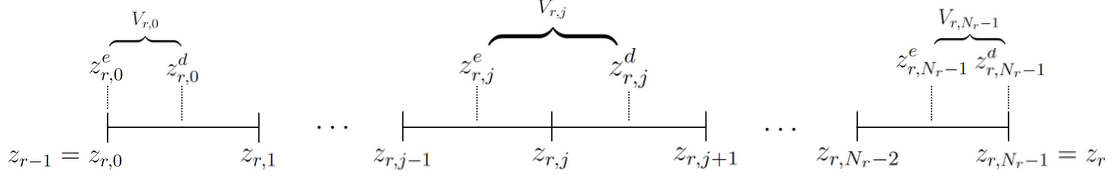


Figura 4.1: Discretização espacial da  $r$ -ésima camada do meio em  $N_r$  pontos igualmente espaçados e definição dos volumes finitos  $V_{r,j}$  em função dos pontos  $z_{r,j}$ .

De acordo com o desenvolvimento apresentado por March e Carr [45], a solução de cada equação em (4.1) é aproximada a partir de equações derivadas para a temperatura nos pontos  $z = z_{r,j}$ . Dessa forma, as incógnitas do problema representam valores pontuais, e não valores médios, como é o caso da abordagem padrão de volumes finitos. Mais precisamente, definindo  $T_{r,j}(t) = T_r(z_{r,j}, t)$  e  $Q_{r,j}(t) = Q_r(z_{r,j}, t)$ , a solução é calculada com base nas equações

$$\frac{\partial}{\partial t} T_{r,j}(t) = \frac{\alpha_r}{\Delta z_{r,j}} \left[ \frac{\partial}{\partial z} T_r(z, t) \Big|_{z=z_{r,j}^d} - \frac{\partial}{\partial z} T_r(z, t) \Big|_{z=z_{r,j}^e} \right] - \gamma_r T_{r,j}(t) + Q_{r,j}(t), \quad (4.13)$$

obtidas a partir da integração de (4.1) sobre cada volume  $V_{r,j}$  e supondo as aproximações  $T_r(z, t) \approx T_{r,j}(t)$  e  $Q_r(z, t) \approx Q_{r,j}(t)$  para todo ponto  $z \in V_{r,j}$ .

Devido às aproximações introduzidas acima, as equações em (4.13) não são exatas, mas mantêm o formato derivado pelo método de volumes finitos padrão e diferenciam-se apenas no sentido atribuído às quantidades  $T_{r,j}(t)$  e  $Q_{r,j}(t)$ . Dada a presença das derivadas espaciais, a forma final dessas equações depende da natureza do ponto  $z = z_{r,j}$ , isto é, se este é um ponto interior, ponto de fronteira ou ponto de interface. A seguir, os três possíveis casos são abordados.



#### 4.1.1 Discretização espacial para pontos interiores

Considere a equação (4.13) para um ponto  $z = z_{r,j}$  interior à  $r$ -ésima camada do meio. Utilizando a fórmula de diferenças finitas central para calcular a derivada espacial em  $z = z_{r,j}^e$ , obtém-se a aproximação

$$\frac{\partial}{\partial z} T_r(z, t) \Big|_{z=z_{r,j}^e} \approx \frac{T_r(z_{r,j}, t) - T_r(z_{r,j-1}, t)}{2 \left( \frac{\Delta z_{r,j}}{2} \right)} = \frac{T_{r,j}(t) - T_{r,j-1}(t)}{h_r}, \quad (4.14)$$

visto que  $\Delta z_{r,j} = h_r$  para pontos interiores. Analogamente, a derivada espacial em  $z = z_{r,j}^d$  é dada por

$$\frac{\partial}{\partial z} T_r(z, t) \Big|_{z=z_{r,j}^d} \approx \frac{T_{r,j+1}(t) - T_{r,j}(t)}{h_r}. \quad (4.15)$$

Logo, substituindo (4.14) e (4.15) em (4.13) e reorganizando os termos, obtém-se a equação em volumes finitos

$$\frac{\partial}{\partial t} T_{r,j}(t) = \frac{\alpha_r}{h_r^2} \left[ T_{r,j-1}(t) - \left( 2 + \frac{\gamma_r h_r^2}{\alpha_r} \right) T_{r,j}(t) + T_{r,j+1}(t) \right] + Q_{r,j}(t), \quad (4.16)$$

válida para todos os pontos interiores ao intervalo  $[z_{r-1}, z_r]$ , à exceção de alguns casos especiais de pontos adjacentes às fronteiras ou às interfaces. Tais casos são discutidos nas próximas seções.

#### 4.1.2 Discretização espacial para pontos de fronteira

Para a fronteira à esquerda, localizada em  $z = z_{1,0} = 0$ , dois casos precisam ser considerados, a depender da condição de contorno (4.6). Se  $b_1 \neq 0$ , a equação (4.13) assume a forma

$$\frac{\partial}{\partial t} T_{1,0}(t) = \frac{2\alpha_1}{h_1} \left[ \frac{\partial}{\partial z} T_1(z, t) \Big|_{z=z_{1,0}^d} - \frac{\partial}{\partial z} T_1(z, t) \Big|_{z=0} \right] - \gamma_1 T_{1,0}(t) + Q_{1,0}(t), \quad (4.17)$$

visto que  $\Delta z_{1,0} = \frac{h_1}{2}$  e  $z_{1,0}^e = 0$ , e a derivada espacial em  $z = 0$  é escrita de forma exata como

$$\frac{\partial}{\partial z} T_1(z, t) \Big|_{z=0} = \frac{a_1 T_1(0, t) - f_1(t)}{b_1} = \frac{a_1 T_{1,0}(t) - f_1(t)}{b_1}. \quad (4.18)$$

Utilizando a fórmula de diferenças finitas central para aproximar a derivada espacial em  $z = z_{1,0}^d$ , isto é,

$$\frac{\partial}{\partial z} T_1(z, t) \Big|_{z=z_{1,0}^d} \approx \frac{T_{1,1}(t) - T_{1,0}(t)}{h_1}, \quad (4.19)$$

e substituindo (4.18) e (4.19) em (4.17), obtém-se a equação em volumes finitos

$$\frac{\partial}{\partial t} T_{1,0}(t) = \frac{2\alpha_1}{h_1} \left[ - \left( \frac{a_1}{b_1} + \frac{1}{h_1} + \frac{\gamma_1 h_1}{2\alpha_1} \right) T_{1,0}(t) + \frac{1}{h_1} T_{1,1}(t) + \frac{f_1(t)}{b_1} \right] + Q_{1,0}(t). \quad (4.20)$$

Por outro lado, se o coeficiente  $b_1$  for nulo, deve-se ter  $a_1 \neq 0$  para que a condição de contorno (4.6) esteja bem definida. Nesse caso, a temperatura  $T_{1,0}(t)$  é conhecida e dada por

$$T_{1,0}(t) = T_1(0, t) = \frac{f_1(t)}{a_1}, \quad (4.21)$$

e a equação para o ponto interior imediatamente à direita da fronteira deve ser modificada a fim de eliminar o termo  $T_{1,0}(t)$ . Substituindo (4.21) na equação (4.16) com  $r = 1$  e  $j = 1$ , obtém-se a equação em volumes finitos

$$\frac{\partial}{\partial t} T_{1,1}(t) = \frac{\alpha_1}{h_1^2} \left[ - \left( 2 + \frac{\gamma_1 h_1^2}{\alpha_1} \right) T_{1,1}(t) + T_{1,2}(t) + \frac{f_1(t)}{a_1} \right] + Q_{1,1}(t). \quad (4.22)$$

Para a fronteira à direita, localizada em  $z = z_{R,N_R-1} = d$ , o procedimento de derivação das equações em volumes finitos é inteiramente análogo. Se  $b_2 \neq 0$ , obtém-se a equação

$$\frac{\partial}{\partial t} T_{R,N_R-1}(t) = \frac{2\alpha_R}{h_R} \left[ \frac{1}{h_R} T_{R,N_R-2}(t) - \left( \frac{a_R}{b_R} + \frac{1}{h_R} + \frac{\gamma_R h_R}{2\alpha_R} \right) T_{R,N_R-1}(t) + \frac{f_2(t)}{b_2} \right] + Q_{R,N_R-1}(t) \quad (4.23)$$

para o ponto  $z = z_{R,N_R-1}$ . Se  $b_2 = 0$  (e  $a_2 \neq 0$ ), a temperatura  $T_{R,N_R-1}(t)$  é dada por

$$T_{R,N_R-1}(t) = T_R(d, t) = \frac{f_2(t)}{a_2}, \quad (4.24)$$

enquanto a equação para o ponto interior imediatamente à esquerda da fronteira é modificada para

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} T_{R,N_R-2}(t) = \frac{\alpha_R}{h_R^2} \left[ T_{R,N_R-3}(t) - \left( 2 + \frac{\gamma_R h_R^2}{\alpha_R} \right) T_{R,N_R-2}(t) + \frac{f_2(t)}{a_2} \right] \\ + Q_{R,N_R-2}(t). \end{aligned} \quad (4.25)$$

### 4.1.3 Discretização espacial para pontos de interface

A discretização da variável espacial dada em (4.10) define dois pontos em cada interface, visto que  $z_{r,N_r-1} = z_r = z_{r+1,0}$ . Portanto, como  $\Delta z_{r,N_r-1} = h_r/2$  e  $\Delta z_{r+1,0} = h_{r+1}/2$ , a partir de (4.13) podem-se obter as equações

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} T_{r,N_r-1}(t) = \frac{2\alpha_r}{h_r} \left[ \frac{\partial}{\partial z} T_r(z,t) \Big|_{z=z_r} - \frac{\partial}{\partial z} T_r(z,t) \Big|_{z=z_{r,N_r-1}^e} \right] \\ - \gamma_r T_{r,N_r-1}(t) + Q_{r,N_r-1}(t) \end{aligned} \quad (4.26)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} T_{r+1,0}(t) = \frac{2\alpha_{r+1}}{h_{r+1}} \left[ \frac{\partial}{\partial z} T_{r+1}(z,t) \Big|_{z=z_{r+1,0}^d} - \frac{\partial}{\partial z} T_{r+1}(z,t) \Big|_{z=z_r} \right] \\ - \gamma_{r+1} T_{r+1,0}(t) + Q_{r+1,0}(t). \end{aligned} \quad (4.27)$$

Conforme a condição de interface (4.8),  $T_{r,N_r-1}(t)$  e  $T_{r+1,0}(t)$  representam o mesmo valor para a temperatura, sendo possível eliminar uma dessas incógnitas da formulação do problema em volumes finitos. Multiplicando (4.26) e (4.27) por  $k_r h_r / 2\alpha_r$  e  $k_{r+1} h_{r+1} / 2\alpha_{r+1}$ , respectivamente, são obtidas as equações

$$\begin{aligned} \frac{k_r h_r}{2\alpha_r} \frac{\partial}{\partial t} T_{r,N_r-1}(t) = k_r \left[ \frac{\partial}{\partial z} T_r(z,t) \Big|_{z=z_r} - \frac{\partial}{\partial z} T_r(z,t) \Big|_{z=z_{r,N_r-1}^e} \right] \\ - \frac{k_r h_r \gamma_r}{2\alpha_r} T_{r,N_r-1}(t) + \frac{k_r h_r}{2\alpha_r} Q_{r,N_r-1}(t) \end{aligned} \quad (4.28)$$

e

$$\begin{aligned} \frac{k_{r+1} h_{r+1}}{2\alpha_{r+1}} \frac{\partial}{\partial t} T_{r+1,0}(t) = k_{r+1} \left[ \frac{\partial}{\partial z} T_{r+1}(z,t) \Big|_{z=z_{r+1,0}^d} - \frac{\partial}{\partial z} T_{r+1}(z,t) \Big|_{z=z_r} \right] \\ - \frac{k_{r+1} h_{r+1} \gamma_{r+1}}{2\alpha_{r+1}} T_{r+1,0}(t) + \frac{k_{r+1} h_{r+1}}{2\alpha_{r+1}} Q_{r+1,0}(t), \end{aligned} \quad (4.29)$$

que, ao serem somadas, resultam em

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} \left[ \frac{k_r h_r}{2\alpha_r} T_{r, N_r-1}(t) + \frac{k_{r+1} h_{r+1}}{2\alpha_{r+1}} T_{r+1,0}(t) \right] = \\ & - k_r \frac{\partial}{\partial z} T_r(z, t) \Big|_{z=z_{r, N_r-1}^e} + k_{r+1} \frac{\partial}{\partial z} T_{r+1}(z, t) \Big|_{z=z_{r+1,0}^d} - \frac{k_r h_r \gamma_r}{2\alpha_r} T_{r, N_r-1}(t) \quad (4.30) \\ & - \frac{k_{r+1} h_{r+1} \gamma_{r+1}}{2\alpha_{r+1}} T_{r+1,0}(t) + \frac{k_r h_r}{2\alpha_r} Q_{r, N_r-1}(t) + \frac{k_{r+1} h_{r+1}}{2\alpha_{r+1}} Q_{r+1,0}(t), \end{aligned}$$

visto que as derivadas espaciais em  $z = z_r$  podem ser canceladas aplicando a condição de interface (4.9). Substituindo  $T_{r+1,0}(t)$  por  $T_{r, N_r-1}(t)$  e utilizando a fórmula de diferenças finitas central para aproximar as derivadas espaciais em  $z = z_{r, N_r-1}^e$  e  $z = z_{r+1,0}^d$ , isto é,

$$\frac{\partial}{\partial z} T_r(z, t) \Big|_{z=z_{r, N_r-1}^e} \approx \frac{T_{r, N_r-1}(t) - T_{r, N_r-2}(t)}{h_r} \quad (4.31)$$

e

$$\frac{\partial}{\partial z} T_{r+1}(z, t) \Big|_{z=z_{r+1,0}^d} \approx \frac{T_{r+1,1}(t) - T_{r+1,0}(t)}{h_{r+1}}, \quad (4.32)$$

a equação (4.30) pode ser reescrita como a equação em volumes finitos

$$\begin{aligned} & \frac{\partial}{\partial t} T_{r, N_r-1}(t) = \\ & \lambda_r \left[ \frac{k_r}{h_r} T_{r, N_r-2}(t) - \left( \frac{k_r}{h_r} + \frac{k_{r+1}}{h_{r+1}} + \frac{k_r h_r \gamma_r}{2\alpha_r} + \frac{k_{r+1} h_{r+1} \gamma_{r+1}}{2\alpha_{r+1}} \right) T_{r, N_r-1}(t) \right. \\ & \left. + \frac{k_{r+1}}{h_{r+1}} T_{r+1,1}(t) + \frac{k_r h_r}{2\alpha_r} Q_{r, N_r-1}(t) + \frac{k_{r+1} h_{r+1}}{2\alpha_{r+1}} Q_{r+1,0}(t) \right], \quad (4.33) \end{aligned}$$

onde

$$\lambda_r = \frac{2\alpha_r \alpha_{r+1}}{k_r h_r \alpha_{r+1} + k_{r+1} h_{r+1} \alpha_r}. \quad (4.34)$$

Por fim, como  $T_{r+1,0}(t)$  não é mais uma incógnita do problema, a equação para o ponto interior imediatamente à direita da  $r$ -ésima interface deve ser modificada. Substituindo  $T_{r+1,0}(t)$  por  $T_{r, N_r-1}(t)$  em (4.16), a equação em volumes finitos para  $z = z_{r+1,1}$  reescreve-se como

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t} T_{r+1,1}(t) = & \frac{\alpha_{r+1}}{h_{r+1}^2} \left[ T_{r, N_r-1}(t) - \left( 2 + \frac{\gamma_{r+1} h_{r+1}^2}{\alpha_{r+1}} \right) T_{r+1,1}(t) + T_{r+1,2}(t) \right] \\ & + Q_{r+1,1}(t). \quad (4.35) \end{aligned}$$

#### 4.1.4 Equação matricial para a discretização espacial

Em notação matricial, as equações (4.16), (4.20), (4.22), (4.23), (4.25), (4.33) e (4.35) podem ser reescritas como a equação diferencial ordinária

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{T}(t) = \mathbf{C} \mathbf{T}(t) + \mathbf{Q}(t), \quad (4.36)$$

onde  $\mathbf{T}(t) \in \mathbb{R}^{N_z}$  é o vetor que contém as incógnitas  $T_{r,j}(t)$ ,  $\mathbf{Q}(t) \in \mathbb{R}^{N_z}$  é o vetor que contém os termos independentes,  $\mathbf{C} \in \mathbb{R}^{N_z \times N_z}$  é a matriz que contém os coeficientes multiplicando as temperaturas  $T_{r,j}(t)$  e

$$N_z = \sum_{r=1}^R N_r - (R - 1) - p \quad (4.37)$$

é o número de incógnitas  $T_{r,j}(t)$ , sendo  $p$  a quantidade de condições de contorno de Dirichlet, isto é,

$$p = \begin{cases} 0 & \text{se } b_1 \neq 0 \text{ e } b_2 \neq 0, \\ 1 & \text{se } b_1 \neq 0 \text{ e } b_2 = 0 \text{ ou } b_1 = 0 \text{ e } b_2 \neq 0, \\ 2 & \text{se } b_1 = b_2 = 0. \end{cases} \quad (4.38)$$

As coordenadas de  $\mathbf{T}(t)$ ,  $\mathbf{Q}(t)$  e  $\mathbf{C}$  variam parcialmente de acordo com as condições de contorno do problema, visto que estas determinam o número de incógnitas e as equações utilizadas para os pontos de fronteira. É importante observar, entretanto, que todas as equações derivadas anteriormente relacionam a temperatura em pontos adjacentes, de modo que a matriz  $\mathbf{C}$  obtida é sempre uma matriz tridiagonal [45]. A discretização espacial realizada dessa forma, portanto, preserva a estrutura clássica do método de Volumes Finitos em meios homogêneos.

## 4.2 Discretização da variável temporal

Por fornecer uma aproximação de segunda ordem, a discretização da variável temporal é realizada através do método de Crank-Nicolson [20]. Fixado o

intervalo  $[0, t]$ , considera-se o conjunto de pontos

$$t_j = jh_t \quad (4.39)$$

para  $j = 0, 1, \dots, N_t - 1$ , onde  $N_t$  e  $h_t = t / (N_t - 1)$  são, respectivamente, o número de pontos e o espaçamento da malha temporal. Em seguida, avalia-se a equação (4.36) nos pontos médios

$$t_{j+\frac{1}{2}} = \frac{t_j + t_{j+1}}{2}, \quad (4.40)$$

resultando em

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{T}(t) \Big|_{t=t_{j+\frac{1}{2}}} = \mathbf{CT} \left( t_{j+\frac{1}{2}} \right) + \mathbf{Q} \left( t_{j+\frac{1}{2}} \right). \quad (4.41)$$

Utilizando a notação  $\mathbf{T}^j = \mathbf{T}(t_j)$  e  $\mathbf{Q}^j = \mathbf{Q}(t_j)$ , a derivada temporal em (4.41) é aproximada a partir da fórmula de diferenças finitas central como

$$\frac{\partial}{\partial t} \mathbf{T}(t) \Big|_{t=t_{j+\frac{1}{2}}} \approx \frac{\mathbf{T}^{j+1} - \mathbf{T}^j}{2 \left( \frac{h_t}{2} \right)} = \frac{\mathbf{T}^{j+1} - \mathbf{T}^j}{h_t}, \quad (4.42)$$

enquanto o lado direito da mesma equação é aproximado pelo valor médio

$$\mathbf{CT} \left( t_{j+\frac{1}{2}} \right) + \mathbf{Q} \left( t_{j+\frac{1}{2}} \right) \approx \frac{(\mathbf{CT}^j + \mathbf{Q}^j) + (\mathbf{CT}^{j+1} + \mathbf{Q}^{j+1})}{2}. \quad (4.43)$$

Assim, denotando por  $\mathbf{I}$  a matriz identidade do  $\mathbb{R}^{N_z \times N_z}$ , ao substituir (4.42) e (4.43) em (4.41) e reorganizar os termos, obtém-se o sistema linear

$$\left( \mathbf{I} - \frac{h_t}{2} \mathbf{C} \right) \mathbf{T}^{j+1} = \left( \mathbf{I} + \frac{h_t}{2} \mathbf{C} \right) \mathbf{T}^j + \frac{h_t}{2} (\mathbf{Q}^j + \mathbf{Q}^{j+1}), \quad (4.44)$$

cujo vetor solução é a distribuição de temperatura no instante  $t_{j+1}$ .

Supondo que  $\mathbf{Q}^{j+1}$  seja conhecido, como é o caso de todos os problemas estudados neste trabalho, o lado direito da equação (4.44) pode ser calculado para  $j = 0$ , dada a condição inicial (4.5). Logo, a distribuição de temperatura no instante  $t_{j+1}$  pode ser obtida de forma iterativa resolvendo-se o sistema linear (4.44)  $j + 1$  vezes. Visto que a matriz  $\left( \mathbf{I} - \frac{h_t}{2} \mathbf{C} \right)$  é tridiagonal, a solução desse sistema pode ser obtida em tempo linear [53].



## 5 RESULTADOS

Neste capítulo, a formulação desenvolvida neste trabalho, fundamentada nos métodos ADO e de Volumes Finito, é aplicada a problemas de transporte de partículas e de biotransferência de calor unidimensionais. Primeiramente, três problemas teste são considerados para verificar a implementação da formulação através da comparação com resultados numéricos produzidos por diferentes abordagens. Em seguida, como aplicação, a formulação é utilizada para simular dois problemas de hipertermia induzida por laser, um procedimento que visa superaquecer tecidos biológicos com fins terapêuticos. Aqui, resultados numéricos foram obtidos com aproximações de alta ordem para referência. Segundo nosso conhecimento, esses resultados não foram apresentados anteriormente na literatura (nem por meio de experimentos, nem por simulação computacional) considerando os parâmetros utilizados.

Os métodos ADO e de Volumes Finitos foram implementados na linguagem de programação C++, utilizando o compilador g++ (GCC) 11.2.0<sup>1</sup> para gerar o arquivo executável. A discretização da variável angular (3.32) foi realizada utilizando a quadratura de Gauss-Legendre mapeada sobre o intervalo  $(0, 1)$ , como classicamente feito no método ADO [4]. O cálculo dos pesos e nós da quadratura, a avaliação dos polinômios de Legendre sobre as direções de interesse, e as operações de álgebra linear, como cálculo de autovalores e autovetores e resolução de sistemas lineares, foram realizadas com o auxílio de sub-rotinas da biblioteca GNU Scientific Library (GSL), versão 2.3<sup>2</sup>. Os espaçamentos  $h_r$  e  $h_t$ , utilizados nas equações (4.10) e (4.39), respectivamente, foram especificados em cada caso. No que segue, o método ADO com  $N$  pontos de quadratura no intervalo  $(0, 1)$  é denotado por  $ADO_N$ .

---

<sup>1</sup>Disponível em <https://gcc.gnu.org/>

<sup>2</sup>Disponível em <https://www.gnu.org/software/gsl/>



## 5.1 Verificação da formulação

A fim de assegurar uma correta implementação dos métodos ADO e de Volumes Finitos, três problemas teste são abordados nesta seção. Os Problemas 1 e 2 correspondem a fenômenos de transporte de partículas, e o Problema 3 ao fenômeno de biotransferência de calor. Esses problemas foram escolhidos de modo a comparar os resultados numéricos obtidos com os métodos estudados neste trabalho a resultados numéricos de outras abordagens, bem como de modo a testar diferentes conjuntos de parâmetros, permitindo verificar a formulação em meios homogêneos e heterogêneos, com espalhamento isotrópico e anisotrópico, com e sem a incidência de radiação colimada e com condições de contorno mistas para a temperatura. Observa-se que os resultados dos Problemas 1 e 2 correspondem a parte dos resultados apresentados no simpósio CHT-21, organizado pelo *International Centre for Heat and Mass Transfer* (ICHTM) [26].

### 5.1.1 Problema 1: método ADO em meio multicamada com espalhamento isotrópico

Como primeiro problema teste, aplica-se o método ADO ao problema de transporte em meio heterogêneo abordado nas referências [40, 49]. A heterogeneidade do meio é representada decompondo-se o domínio em três camadas com espessuras e propriedades óticas distintas, que caracterizam um meio altamente espalhador (Tabela 5.1). Considera-se uma função de fase isotrópica em todo o meio, e uma fonte de valor unitário é imposta na terceira camada, isto é, na equação (2.23), tem-se  $s(z, \mu) = 1$  ( $1/\text{cm}^3\text{s}$ ) para  $z \in [30, 40]$ . As condições de contorno nas fronteiras  $z = 0$  e  $z = 40$  cm são conhecidas e dadas por  $I(0, \mu) = 1$  ( $1/\text{cm}^2\text{s}$ ) e  $I(40, \mu) = 0$ , respectivamente.

Tabela 5.1: Problema 1: espessura, coeficiente de espalhamento e coeficiente de extinção de cada camada [40, 49].

Camada	1	2	3
Espessura (cm)	15	15	10
$\sigma_s$ (1/cm)	0.97	0.95	0.99
$\beta$ (1/cm)	1	1	1

Em ambas as referências, a intensidade média [17],

$$J(z) = \frac{1}{4\pi}G(z) = \frac{1}{2} \int_{-1}^1 I(z, \mu) d\mu, \quad (5.1)$$

foi calculada para  $z = 0$ ,  $z = 20$  e  $z = 40$  cm. Nunes e Barros [49] analisaram os métodos numéricos iterativos Diamond Difference, Degrau e Degrau Característico para a discretização da variável espacial, enquanto a variável angular foi discretizada com base na quadratura de Gauss-Legendre sobre o intervalo completo  $[-1, 1]$ . Lazzari *et al.* [40] abordaram o problema do ponto de vista da formulação integral da equação de transporte, utilizando o método de Nyström para a obtenção dos resultados. É importante observar que esse método elimina a necessidade de uma discretização explícita da variável angular, mas requer a discretização de um operador integral definido na variável espacial. Assim, para fins comparativos, Lazzari *et al.* utilizaram as quadraturas de Gauss-Legendre e de Boole sobre o intervalo  $[0, 40]$ .

A fim de verificar a convergência dos resultados do método ADO, diferentes ordens de quadratura foram utilizadas para o cálculo da intensidade média, realizado com o auxílio da equação (3.95). Na Tabela 5.2, os valores obtidos são comparados aos resultados mais refinados publicados nas referências para os métodos Diamond Difference (quadratura com 8 pontos, e camadas 1, 2 e 3 discretizadas em 600, 300 e 500 nodos, respectivamente) e de Nyström (quadratura com 16001 pontos). Como é possível observar, o método ADO performou bem mesmo no caso  $N = 2$ , onde atingiu pelo menos três dígitos significativos. Tomando-se como referência a solução

ADO<sub>16</sub>, tal resultado corresponde a um erro relativo inferior a 0.2%. Além disso, como verificado durante as simulações numéricas, os valores obtidos apresentaram seis dígitos significativos a partir de  $N = 10$  e, em todos os casos, foram calculados em menos de meio segundo.

Tabela 5.2: Problema 1: resultados numéricos para a intensidade média ( $1/(\text{cm}^2\text{s})$ ). Comparação entre os métodos ADO, Diamond Difference [49] e de Nyström [40].

$z$ (cm)	0	20	40
Diamond Difference	0.852638	0.481766	7.090416
Nyström	0.852638	0.482108	7.091813
ADO <sub>2</sub>	0.852635	0.481160	7.091763
ADO <sub>4</sub>	0.852638	0.481970	7.091609
ADO <sub>8</sub>	0.852638	0.481969	7.091601
ADO <sub>16</sub>	0.852638	0.481969	7.091600

### 5.1.2 Problema 2: método ADO em meio homogêneo com espalhamento anisotrópico e incidência de radiação colimada

Visando analisar a performance do método ADO junto da decomposição da intensidade em uma componente singular e uma não singular, conforme discutido no capítulo 3, considera-se como segundo problema teste, um problema de transferência radiativa abordado por Kumar e Felske [37], onde um meio homogêneo com espalhamento anisotrópico e fronteiras transparentes é submetido à incidência de radiação colimada na direção  $\mu_c = 0.8$ . É assumido que não existem outras fontes de radiação e que a função de fase tem os coeficientes de espalhamento apresentados na Tabela 5.3. Em [37], o problema foi descrito em termos das variáveis adimensionais  $\tau$  e  $\omega$ , dadas pelas equações (3.1) e (3.2). Com respeito à notação utilizada no capítulo 2, o mesmo problema pode ser obtido com  $\beta = 1$ ,  $\sigma_s = \omega$  e  $d = 1$ .

Tabela 5.3: Problema 2: coeficientes da expansão da função de fase de espalhamento em polinômios de Legendre [37].

$A_0$	$A_1$	$A_2$	$A_3$	$A_4$	$A_5$	$A_6$
1	0.643833	0.554231	0.103545	0.010498	0.000563	0.000019

Utilizando uma versão modificada do método  $F_N$ , onde  $N$  é a ordem da expansão das intensidades  $I(0, -\mu)$  e  $I(d, \mu)$  em séries de potências na variável  $\mu$ , Kumar e Felske calcularam o fluxo radiativo adimensional,

$$\mathcal{Q}(z) = \frac{1}{q_c \mu_c} q(z) = \frac{2\pi}{q_c \mu_c} \int_{-1}^1 I(z, \mu) \mu d\mu, \quad (5.2)$$

para  $\sigma_s = 0.06$  e  $\sigma_s = 0.01$ . Os coeficientes de espalhamento próximos de zero foram escolhidos para utilizar como referência o resultado analítico

$$\lim_{\sigma_s \rightarrow 0} \mathcal{Q}(z) = e^{-z/\mu_c}, \quad (5.3)$$

válido nas condições do problema conforme mencionado pelos autores.

Com o auxílio da equação (3.98), o fluxo radiativo adimensional foi calculado e comparado aos resultados publicados por Kumar e Felske para o método  $F_9$ , como consta nas Tabelas 5.4 e 5.5. Novamente, pode-se observar que o método ADO performou muito bem, apresentando, para ambos valores do coeficiente de espalhamento, cinco dígitos significativos com apenas oito ordenadas discretas no intervalo  $(0, 1)$ . Como no problema anterior, os tempos de execução também não excederam meio segundo, e, utilizando como referência a solução  $ADO_{16}$ , os erros relativos para a solução de menor ordem foram inferiores a 0.031% e a 0.005% para  $\sigma_s = 0.06$  e  $\sigma_s = 0.01$ , respectivamente.

Tabela 5.4: Problema 2: resultados numéricos para o fluxo radiativo adimensional calculado com  $\sigma_s = 0.06$ . Comparação entre os métodos ADO e  $F_9$  [37].

$z$	0	0.1	0.2	0.4	0.6	1
$F_9$	0.99249	0.87670	0.77680	0.60956	0.47825	0.29649
ADO <sub>2</sub>	0.99243	0.87985	0.77972	0.61192	0.48011	0.29640
ADO <sub>4</sub>	0.99249	0.87983	0.77965	0.61192	0.48022	0.29650
ADO <sub>8</sub>	0.99249	0.87982	0.77965	0.61193	0.48022	0.29649
ADO <sub>16</sub>	0.99249	0.87982	0.77965	0.61193	0.48022	0.29649

Tabela 5.5: Problema 2: resultados numéricos para o fluxo radiativo adimensional calculado com  $\sigma_s = 0.01$ . Comparação entre os métodos ADO e  $F_9$  [37].

$z$	0	0.1	0.2	0.4	0.6	1
$F_9$	0.99879	0.88178	0.77868	0.60719	0.47346	0.28812
ADO <sub>2</sub>	0.99878	0.88209	0.77898	0.60743	0.47364	0.28811
ADO <sub>4</sub>	0.99879	0.88209	0.77896	0.60743	0.47366	0.28812
ADO <sub>8</sub>	0.99879	0.88208	0.77897	0.60743	0.47366	0.28812
ADO <sub>16</sub>	0.99879	0.88208	0.77897	0.60743	0.47366	0.28812

### 5.1.3 Problema 3: método de Volumes Finitos em meio homogêneo com condições de contorno mistas

Para verificar a implementação do método de Volumes Finitos, como terceiro problema teste são comparadas as soluções numérica e analítica obtidas para uma versão em meio homogêneo do problema de biotransferência de calor acoplado ao problema de transferência radiativa. A espessura  $d = 2$  mm e as propriedades termofísicas do tecido e do sangue, descritas na Tabela 5.6, foram extraídas das referências [24, 46], onde foram utilizadas para simular uma gordura subcutânea.

Inicialmente, o meio encontra-se a uma temperatura  $T_i = 37^\circ\text{C}$ , mesmo valor atribuído à temperatura do sangue. Sobre a superfície à esquerda,  $z = 0$ , também mantida a  $T_0 = 37^\circ\text{C}$ , incide um feixe de radiação colimada que penetra o meio com magnitude  $q_c = 20 \text{ kW/m}^2$  e direção  $\mu_c = 1$  (como considerado em [24]). A superfície à direita,  $z = 2 \text{ mm}$ , satisfaz uma condição de contorno de convecção, isto é,

$$-k \frac{\partial T(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=d} = h_d [T(d, t) - T_{ex}(t)] \quad (5.4)$$

onde  $h_d = 50 \text{ W/(m}^2\text{K)}$  é o coeficiente de transferência de calor e  $T_{ex} = 37^\circ\text{C}$  é a temperatura à direita do tecido [46]. Por fim, é assumido que o coeficiente de absorção é dado por  $\kappa = 10 \text{ (1/m)}$  [24], que não há espalhamento da radiação e que as fronteiras são transparentes. Dessa forma, somente a componente singular da decomposição da intensidade (equação (3.7)) precisa ser considerada, resultando, pelas equações (2.27), (3.20) e (3.21), no termo fonte

$$q_{ex}(z) = \kappa q_c e^{-\kappa z / \mu_c}. \quad (5.5)$$

Tabela 5.6: Problema 3: propriedades termofísicas da gordura subcutânea e do sangue [24, 46].

$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	$c$ (J/(kg K))	$k$ (W/(m K))	$\rho_b$ (kg/m <sup>3</sup> )	$c_b$ (J/(kg K))	$v_b$ (1/s)	$q_m$ (W/m <sup>3</sup> )
1000	3674	0.185	1060	3770	0.0001	368.3

Nas condições descritas acima, a solução analítica da equação de biotransferência de calor foi obtida escrevendo-se  $T(z, t) = u(z, t) + v(z)$  e resolvendo-se um problema de biotransferência de calor homogêneo para  $u$  e uma equação diferencial ordinária de segunda ordem para  $v$  (ver Apêndice A). Essa solução foi, então, avaliada em diferentes pontos do domínio com o auxílio do software Maple 15<sup>3</sup> e utilizada como referência na verificação do método de Volumes Finitos. Apesar deste ser um problema em meio homogêneo, o método de Volumes Finitos foi executado

<sup>3</sup>Disponível em <https://www.maplesoft.com/>

dividindo-se o domínio em cinco regiões de diferentes tamanhos, discretizadas de modo que  $h_i \neq h_j$  para  $i \neq j$ . Evidentemente, tal discretização é desnecessária nesse caso, mas foi utilizada para assegurar uma correta implementação das equações de interface (4.33) e (4.35).

Os valores calculados para a temperatura em diferentes pontos do domínio são apresentados na Tabela 5.7. Esses valores foram obtidos para  $t = 10$  s, variando-se os espaçamentos das malhas temporal e espacial, conforme indicado. Como pode-se observar, houve boa concordância entre os resultados numéricos e exato. De fato, a solução calculada pelo método de Volumes Finitos atingiu pelo menos quatro dígitos significativos para a malha mais grossa e sete para a malha mais fina, onde os resultados foram idênticos ao analítico. Além disso, nota-se que, para o problema em questão, a discretização da variável espacial foi mais relevante para a precisão da solução do que a discretização da variável temporal, visto que os mesmos resultados foram obtidos para  $h_t = 10^{-2}$  e  $h_t = 10^{-4}$  s.

Tabela 5.7: Problema 3: resultados numéricos para a temperatura. Comparação entre a solução analítica e o método de Volumes Finitos com diferentes espaçamentos  $h_t$  (s) e  $h_r$  (m).

$z$ (mm)	0	0.4	0.8	1.2	1.6	2
Valor exato (°C)	37.00000	37.26559	37.40914	37.47311	37.48530	37.45674
$h_t = 10^{-2}$ $h_r \leq 10^{-4}$	37.00000	37.26546	37.40893	37.47291	37.48519	37.45675
$h_t = 10^{-2}$ $h_r \leq 10^{-5}$	37.00000	37.26559	37.40914	37.47311	37.48530	37.45674
$h_t = 10^{-2}$ $h_r \leq 10^{-6}$	37.00000	37.26559	37.40914	37.47311	37.48530	37.45674
$h_t = 10^{-4}$ $h_r \leq 10^{-4}$	37.00000	37.26546	37.40893	37.47291	37.48519	37.45675
$h_t = 10^{-4}$ $h_r \leq 10^{-5}$	37.00000	37.26559	37.40914	37.47311	37.48530	37.45674
$h_t = 10^{-4}$ $h_r \leq 10^{-6}$	37.00000	37.26559	37.40914	37.47311	37.48530	37.45674

## 5.2 Aplicação à hipertermia induzida por laser

Como aplicação da formulação e dos métodos estudados neste trabalho, nesta seção dois problemas de hipertermia induzida por laser são considerados, nomeados Problema 4 e Problema 5. No primeiro, foca-se na análise do problema de transferência radiativa, comparando resultados obtidos por diferentes aproximações da função de fase de Henyey-Greenstein e por diferentes ordens de discretização da variável angular. No segundo, um problema acoplado é considerado para analisar o impacto das diferentes aproximações do problema de transferência radiativa sobre a distribuição de temperatura. Uma breve análise de como o uso de nanopartículas pode contribuir para a eficiência do tratamento também é considerada.

### 5.2.1 Problema 4: absorção da radiação laser em tecidos subcutâneos

Na seção anterior, verificou-se a implementação do método ADO e constatou-se uma boa precisão e convergência deste para problemas de transporte unidimensionais em meios homogêneos e heterogêneos, com parâmetros que possibilitaram a comparação com resultados encontrados na literatura. Com o objetivo de analisá-lo como ferramenta auxiliar na modelagem de problemas de transferência radiativa relevantes para o tratamento de câncer por hipertermia induzida por laser, primeiramente considera-se o problema de estimar a absorção da radiação laser incidente sobre tecidos subcutâneos sem e com a aplicação de nanopartículas, conforme abordado por Dombrovsky *et al.* [23].

A heterogeneidade dos tecidos é modelada decompondo-se o domínio em quatro regiões: a epiderme, a derme papilar e reticular, a gordura e o músculo. A espessura e as propriedades óticas de cada camada são apresentadas na Tabela 5.8, sendo o espalhamento descrito pela função de fase de Henyey-Greenstein. Considera-se, conforme a formulação do capítulo 2, que ambas as fronteiras refletem a radiação



de forma especular, com reflexão nula à direita e reflexão de Fresnel à esquerda, dada por [25]

$$\rho_1^s(\mu) = 1 + [W(\mu) - 1] H\left(\mu - \sqrt{1 - 1/\eta^2}\right), \quad (5.6)$$

onde  $W$  é a função

$$W(\mu) = \frac{1}{2} \left[ \left( \frac{\mu - \eta\sqrt{1 - \eta^2(1 - \mu^2)}}{\mu + \eta\sqrt{1 - \eta^2(1 - \mu^2)}} \right)^2 + \left( \frac{\eta\mu - \sqrt{1 - \eta^2(1 - \mu^2)}}{\eta\mu + \sqrt{1 - \eta^2(1 - \mu^2)}} \right)^2 \right], \quad (5.7)$$

$H$  é a função degrau de Heaviside [1] e  $\eta = \eta_1/\eta_2$  é o quociente entre os índices de refração da epiderme (e de todo os tecidos),  $\eta_1 = 1.45$ , e do ar,  $\eta_2 = 1$ . Sobre essa fronteira, a radiação laser incide e penetra o meio com direção  $\mu_c = 1$  e magnitude  $q_c = [1 - \rho_1^s(\mu_c)]q_0$ , com  $q_0 = 20 \text{ kW/m}^2$ . A emissão de radiação dos tecidos é desconsiderada. Para o caso com nanopartículas, supõe-se que estas têm raio  $r_n = 20 \text{ nm}$ <sup>4</sup>, fatores de eficiência de absorção e de espalhamento  $Q_a = 7.828$  e  $Q_s = 1.144$ , respectivamente, e que estão distribuídas uniformemente entre os planos  $z = 0.1 \text{ mm}$  e  $z = 4 \text{ mm}$ <sup>5</sup> a uma fração volumétrica  $f_v = 10^{-6} \%$  [23]. Nesse caso, os coeficientes de absorção e de espalhamento dos tecidos com nanopartículas foram calculados de acordo com as equações [23]

$$\kappa_n = \kappa + 0.75f_v \frac{Q_a}{r_n} \quad (5.8)$$

e

$$\sigma_{s,n} = \sigma_s + 0.75f_v \frac{Q_s}{r_n}, \quad (5.9)$$

onde  $\kappa$  e  $\sigma_s$  são os coeficientes de absorção e de espalhamento dos tecidos sem nanopartículas.

---

<sup>4</sup>Valor extraído da referência [24].

<sup>5</sup>De acordo com Dombrovsky *et al.* [23], as nanopartículas estão posicionadas entre os planos  $z = 0$  e  $z = 4 \text{ mm}$ . Entretanto, os resultados concordaram apenas quando desconsideradas as nanopartículas presentes na epiderme.

Tabela 5.8: Problema 4: espessura e propriedades óticas dos tecidos [23].

	Epiderme	Derme papilar e reticular	Gordura	Músculo
Espessura (mm)	0.1	1.4	2	6.5
$\kappa$ (1/m)	300	270	190	120
$\sigma_s$ (1/m)	12500	18750	27000	9000
$g$	0.8	0.8	0.9	0.9

Para fins comparativos, a radiação absorvida,  $q_{ex}$ , foi calculada para três aproximações da função de fase de Henyey-Greenstein: a aproximação em polinômios de Legendre de ordem  $L$  e as aproximações Delta-Eddington isotrópica e linearmente anisotrópica, denotadas por  $HG_L$ ,  $DE_0$  e  $DE_1$ , respectivamente. A expansão em polinômios de Legendre foi calculada com grau de anisotropia  $L = 300$ , valor para o qual os erros relativos à função de fase original foram menores do que  $2 \times 10^{-10}$  (Figura 5.1). Para as aproximações Delta-Eddington, utilizou-se os coeficientes de transporte (2.12) e (2.13) com  $f_{s,r} = g_r$ , para o caso isotrópico, e  $f_{s,r} = (3g_r - 1)/2$ , para o caso linearmente anisotrópico, conforme discutido no capítulo 2. Com o valor inicial  $N = 20$ , o método ADO foi executado dobrando-se o número de ordenadas discretas até que o erro relativo máximo entre duas iterações consecutivas fosse menor do que 0.1%, o que ocorreu, em todos os casos, entre as iterações com  $N = 80$  e  $N = 160$ .

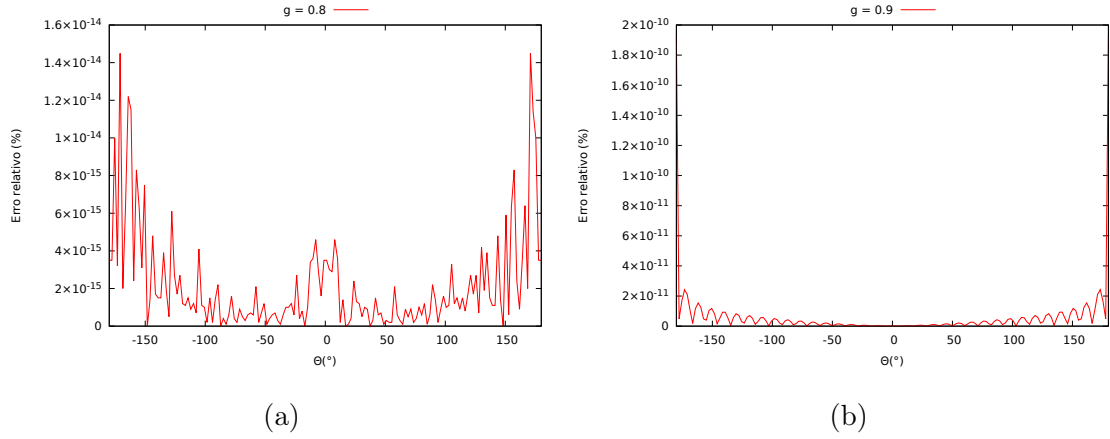


Figura 5.1: Problema 4: erro relativo entre a função de fase de Henyey-Greenstein exata e a aproximação em polinômios de Legendre com grau de anisotropia  $L = 300$ : (a)  $g = 0.8$ ; (b)  $g = 0.9$ .

Os resultados obtidos para a radiação absorvida pelos tecidos (normalizada por  $q_0$ ) são apresentados na Figura 5.2, onde são comparados aos publicados por Dombrovsky *et al.* [23] para os métodos de Monte Carlo com função de fase de Henyey-Greenstein e  $P_1$  com aproximação Delta-Eddington isotrópica. A fim de avaliar a solução de menor ordem, os valores obtidos pelo método  $ADO_2$  com função de fase  $DE_0$  também são apresentados. Como é possível observar, a solução  $ADO_{160}$  com função de fase  $HG_{300}$  produziu resultados muito próximos aos resultados de Monte Carlo, sendo a diferença entre ambas as soluções quase imperceptível na escala do gráfico. Apesar de algumas imprecisões, as aproximações Delta-Eddington também apresentaram bons resultados para  $N = 160$ , mas a aproximação de menor ordem subestimou a radiação absorvida de forma considerável. Ainda assim, nota-se que esta produziu resultados melhores do que o método  $P_1$ , um comportamento que já era previsto pois, por utilizar quadraturas de semi-intervalo, o método  $ADO_N$  tende a ser mais preciso do que o método de Ordenadas Discretas padrão  $S_N$ , equivalente ao método  $P_N$  nas condições do problema [8].

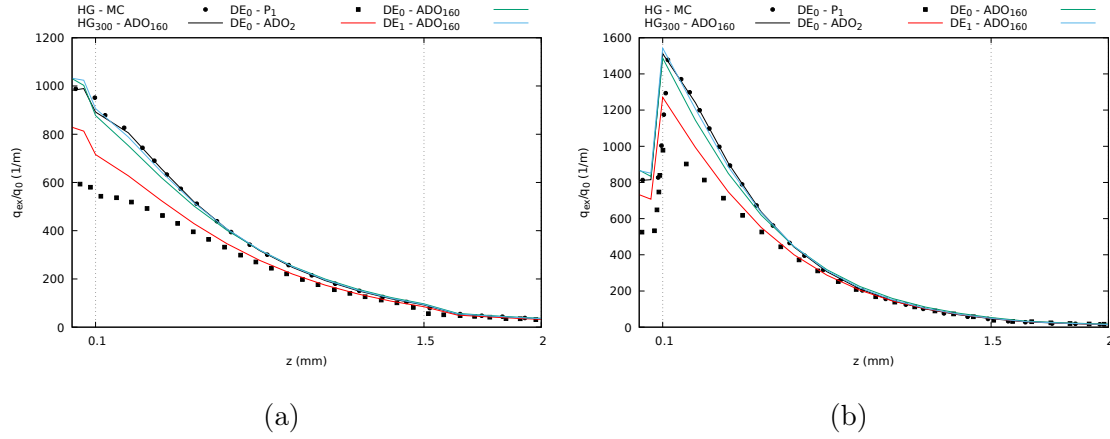


Figura 5.2: Problema 4: radiação absorvida pelos tecidos (normalizada por  $q_0 = 20$  kW/m<sup>2</sup>). Tecidos (a) sem nanopartículas; (b) com nanopartículas. Valores obtidos pelo método  $ADO_N$  para as aproximações da função de fase de Henyey-Greenstein  $HG_{300}$ ,  $DE_0$  e  $DE_1$  e comparados aos publicados por Dombrovsky *et al.* [23] para os métodos de Monte Carlo (MC) com função de fase de Henyey-Greenstein e  $P_1$  com aproximação Delta-Eddington isotrópica.

A fim de analisar a performance do método ADO para discretizações com um número menor de ordenadas discretas, para cada função de fase o erro relativo foi calculado tomando-se como referência o respectivo resultado obtido para  $N = 160$ . Ao contrário do que foi observado na seção anterior, um número maior de direções foi necessário para produzir bons resultados. Com respeito à aproximação  $HG_{300}$  (Figura 5.3), o erro relativo para  $N = 20$  foi pequeno na camada inicial, mas cresceu consideravelmente nas camadas mais profundas, atingindo quase 90% para o caso sem nanopartículas e um pouco mais de 70% para o caso com nanopartículas. Com respeito às funções de fase  $DE_0$  (Figura 5.4) e  $DE_1$  (Figura 5.5), a convergência foi melhor. Na ausência de nanopartículas, os erros relativos máximos foram inferiores a 20%, para  $N = 2$ , e a 0.7%, para  $N = 20$ , enquanto na presença de nanopartículas foram inferiores a 16% e a 0.55%, respectivamente. Nota-se que, de modo geral, o caso com nanopartículas apresentou erros relativos um pouco menores, o que ocorreu

devido à redução do albedo de espalhamento das camadas com nanopartículas. Além disso, observa-se que o erro relativo máximo foi detectado, na maioria dos casos, sobre a fronteira  $z = 0$ , local onde o termo fonte de radiação foi posicionado.

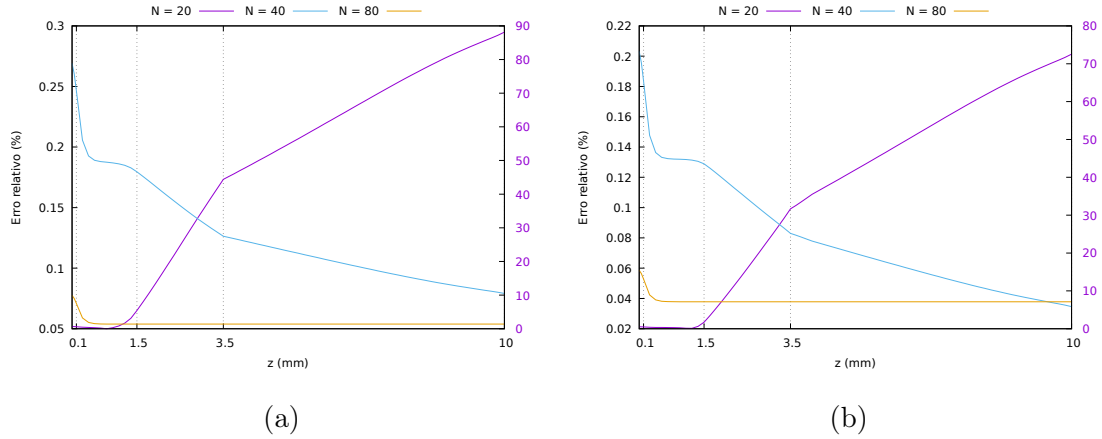


Figura 5.3: Problema 4: erros relativos para a radiação absorvida pelos tecidos calculada pelo método  $ADO_N$  para a aproximação da função de fase Henyey-Greenstein  $HG_{300}$ . Tecidos (a) sem nanopartículas; (b) com nanopartículas. Valores de referência calculados pelo método  $ADO_{160}$  com função de fase  $HG_{300}$ .

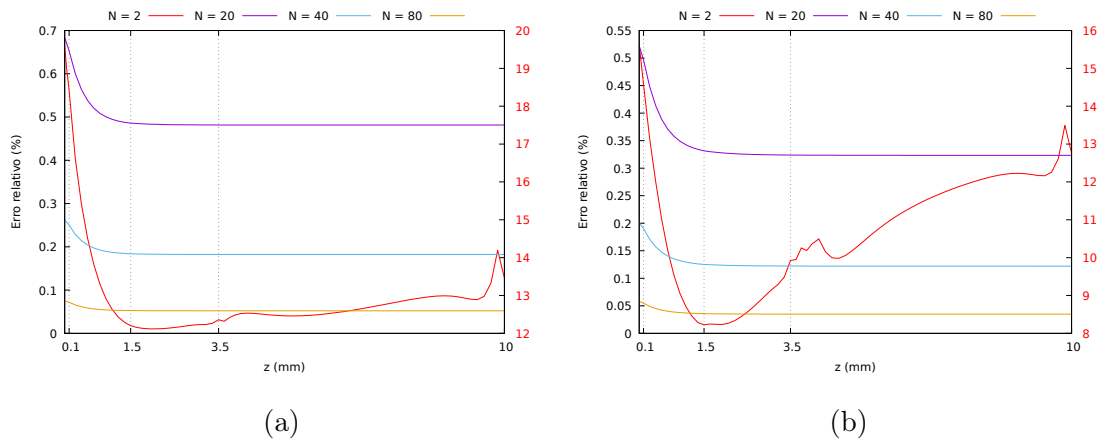


Figura 5.4: Problema 4: erros relativos para a radiação absorvida pelos tecidos calculada pelo método  $ADO_N$  para a aproximação da função de fase Henyey-Greenstein  $DE_0$ . Tecidos (a) sem nanopartículas; (b) com nanopartículas. Valores de referência calculados pelo método  $ADO_{160}$  com função de fase  $DE_0$ .

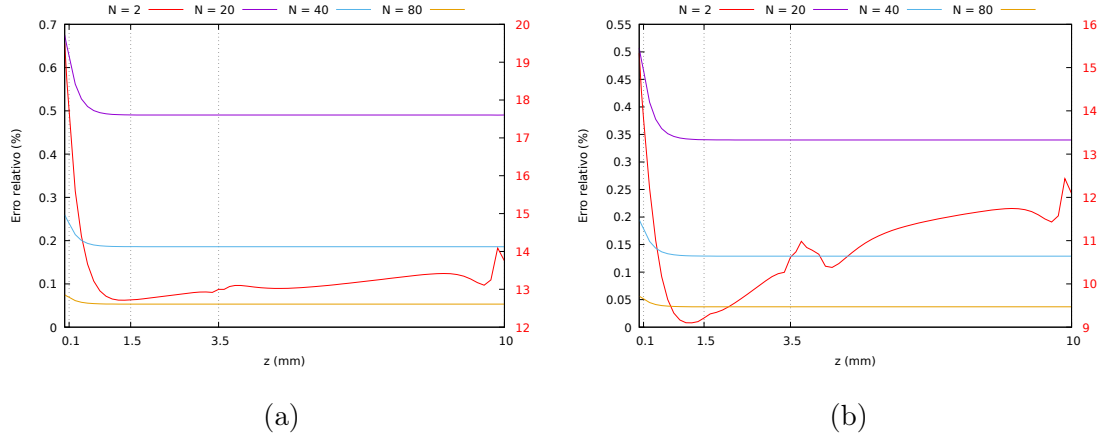


Figura 5.5: Problema 4: erros relativos para a radiação absorvida pelos tecidos calculada pelo método  $ADO_N$  para a aproximação da função de fase Henyey-Greenstein  $DE_1$ . Tecidos (a) sem nanopartículas; (b) com nanopartículas. Valores de referência calculados pelo método  $ADO_{160}$  com função de fase  $DE_1$ .

A maior dificuldade em calcular-se a solução do problema acima com  $N$  pequeno é justificada, em grande parte, pelo espalhamento fortemente para a frente caracterizado pela função de fase de Henyey-Greenstein com coeficiente de anisotropia próximo de 1, como já observado em [26]. Assim, as aproximações Delta-Eddington convergem mais rapidamente pois essa dificuldade é aproximada analiticamente, reduzindo a ordem (e, conseqüentemente, a complexidade) da expansão da função de fase em polinômios de Legendre. Além disso, analogamente ao efeito ocasionado pelas nanopartículas, o uso dos coeficientes de transporte também contribui para uma melhor convergência pois também reduz o albedo de espalhamento de transporte, visto que

$$\omega_r^{tr} = \frac{\sigma_{s,r}^{tr}}{\beta^{tr}} = \frac{\sigma_{s,r}(1 - f_{s,r})}{\kappa_r + \sigma_{s,r}(1 - f_{s,r})} < \frac{\sigma_{s,r}}{\kappa_r + \sigma_{s,r}} = \omega_r. \quad (5.10)$$

De qualquer forma, a função de fase  $HG_{300}$  apresentou resultados de convergência semelhantes às aproximações Delta-Eddington a partir de  $N = 40$ , onde o erro relativo máximo foi inferior a 0.3%.

Para finalizar, nota-se que, independentemente da função de fase, os tempos de execução foram aproximadamente os mesmos para um mesmo valor de  $N$ , variando de 0.9 s, para  $N = 2$ , a 14.5 s, para  $N = 160$ . Assim, para  $L$  e  $N$  suficientemente grandes, a combinação do método ADO com a aproximação da função de fase de Henyey-Greenstein  $HG_L$  mostrou-se, neste caso, uma ferramenta adequada para descrever com precisão o transporte radiativo em tecidos subcutâneos. Por outro lado, em casos onde há o interesse em reduzir a complexidade matemática e o tempo de execução, a combinação desse método com as aproximações Delta-Eddington mostrou-se útil para  $N$  menor. Em particular, a solução de menor ordem apresentou resultados melhores do que a aproximação  $P_1$ , amplamente utilizada nesse sentido. Para referência, os resultados numéricos obtidos para  $N = 160$  são apresentados nas Tabelas 5.9 e 5.10.

Tabela 5.9: Problema 4: resultados numéricos para a radiação absorvida ( $\text{W}/\text{m}^2$ ) pelos tecidos sem nanopartículas. Valores obtidos pelo método  $\text{ADO}_{160}$  para as aproximações da função de fase de Henyey-Greenstein  $HG_{300}$ ,  $\text{DE}_0$  e  $\text{DE}_1$ . Resultados normalizados por  $q_0 = 20 \text{ kW}/\text{m}^2$ .

$z$ (mm)	0	0.1	1.5	3.5	10
$HG_{300}$	981.77196	891.91699	91.89700	2.77601	0.02826
$\text{DE}_0$	1030.72650	877.61570	96.71799	3.02780	0.03378
$\text{DE}_1$	1032.13425	906.38637	93.67329	2.85351	0.03033

Tabela 5.10: Problema 4: resultados numéricos para a radiação absorvida ( $\text{W}/\text{m}^2$ ) pelos tecidos com nanopartículas. Valores obtidos pelo método  $\text{ADO}_{160}$  para as aproximações da função de fase de Henyey-Greenstein  $\text{HG}_{300}$ ,  $\text{DE}_0$  e  $\text{DE}_1$ . Resultados normalizados por  $q_0 = 20 \text{ kW}/\text{m}^2$ .

$z$ (mm)	0	0.1	1.5	3.5	10
$\text{HG}_{300}$	810.44898	1512.34973	46.74839	0.45568	0.00119
$\text{DE}_0$	868.21257	1487.44872	53.11262	0.58815	0.00179
$\text{DE}_1$	865.20240	1542.34817	48.77645	0.49156	0.00137

### 5.2.2 Problema 5: absorção da radiação laser e distribuição de temperatura no tratamento de um tumor subcutâneo

Com o intuito de simular o tratamento de um tumor subcutâneo por hipertermia induzida por laser, nesta subseção o acoplamento dos métodos ADO e de Volumes Finitos é utilizado para estimar a radiação absorvida e a distribuição de temperatura resultantes do aquecimento periódico da pele humana a partir de um feixe de luz colimado, como proposto por Dombrovsky *et al.* [24]. Visto que um modelo alternativo à equação de Pennes foi utilizado na referência, alguns dos parâmetros empregados na simulação do fenômeno de biotransferência de calor foram extraídos de [46], onde o mesmo problema foi estudado. Novamente, os casos sem e com nanopartículas são analisados.

Considera-se um meio multicamada composto por cinco regiões: a epiderme, o tumor, a derme papilar, a derme reticular e a gordura. A espessura e as propriedades termofísicas e óticas de cada região são apresentadas na Tabela 5.11 [24, 46], onde os coeficientes  $\sigma_{s,r}$  foram calculados a partir dos coeficientes  $\sigma_{s,r}^{tr}$  com  $f_{s,r} = g_r$ , conforme a equação (2.13). Para o caso com nanopartículas, considera-se que estas têm raio  $r_n = 20 \text{ nm}$ , fatores de eficiência de absorção e de espalhamento



$Q_a = 7.828$  e  $Q_s = 1.144$ , respectivamente, e que são distribuídas uniformemente sobre a epiderme e sobre o tumor a uma fração volumétrica  $f_v = 10^{-5}$  %, de acordo com as equações (5.8) e (5.9). Como no problema anterior, o espalhamento é descrito pela função de fase de Henyey-Greenstein, e as fronteiras refletem a radiação de forma especular. À esquerda, o coeficiente de reflexão é dado pela equação de Fresnel (5.6) com  $\eta_1 = 1.45$  e  $\eta_2 = 1$ , enquanto o coeficiente  $\rho_2^s(\mu) = 0.4188611699$  caracteriza a reflexão à direita. Com respeito às propriedades do sangue, a temperatura, a densidade e o calor específico são dados por  $T_b = 37^\circ\text{C}$ ,  $\rho_b = 1060 \text{ kg/m}^3$  e  $c_b = 3770 \text{ J/(kg K)}$ , respectivamente.

Tabela 5.11: Problema 5: espessura e propriedades termofísicas e óticas dos tecidos [24, 46]. Coeficientes de espalhamento calculados a partir dos coeficientes de espalhamento de transporte com  $f_{s,r} = g_r$ .

	Epiderme	Tumor	Derme Papilar	Derme Reticular	Gordura
Espessura (mm)	0.1	0.3	0.4	0.8	2
$\rho$ (kg/m <sup>3</sup> )	1200	1030	1200	1200	1000
$c$ (J/(kg K))	3589	3582	3300	3300	3674
$k$ (W/(m K))	0.235	0.558	0.445	0.445	0.185
$q_m$ (W/m <sup>3</sup> )	0	3680	368.1	368.1	368.3
$v_b$ (1/s)	0	0.0063	0.0002	0.0013	0.0001
$\kappa$ (1/m)	180	50	20	20	10
$\sigma_s$ (1/m)	23600	6000	2000	2000	4000
$g$	0.9	0.9	0.9	0.9	0.9

Por simplicidade, considera-se que os tecidos estão a uma temperatura inicial de  $37^\circ\text{C}$  e que não emitem radiação de forma significativa [46]. Sobre a fronteira  $z = 0$ , a radiação laser é aplicada de forma periódica (Figura 5.6), penetrando o meio com direção  $\mu_c = 1$  e magnitude  $q_c(t) = [1 - \rho_1^s(\mu_c)] q_0(t)$ . Nota-se que o fornecimento de energia é composto por períodos de aquecimento e de resfriamento,

com durações de 10 e 15 s, respectivamente. A interface ar-epiderme é mantida a  $37^\circ\text{C}$  durante todo o tratamento para simular o efeito de resfriamento da pele. Por outro lado, para simular a troca de calor com tecidos mais profundos e fora do domínio computacional, supõe-se que a superfície  $z = 3.6$  mm satisfaz a condição de contorno de convecção

$$-k_5 \frac{\partial T(z, t)}{\partial z} \Big|_{z=d} = h_d [T(d, t) - T_{ex}(t)] \quad (5.11)$$

onde  $h_d = 50$  W/(m<sup>2</sup>K) é o coeficiente de transferência de calor e  $T_{ex} = 37^\circ\text{C}$  é a temperatura à direita da gordura.

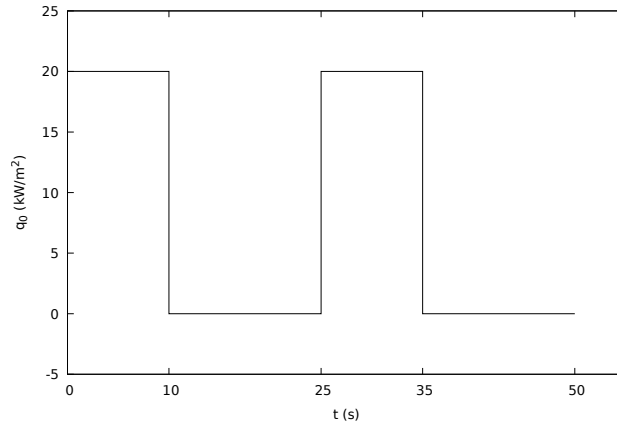


Figura 5.6: Problema 5: fluxo radiativo incidente para aquecimento periódico [24].

Novamente, executou-se o método ADO para as aproximações da função de fase de Henyey-Greenstein  $\text{HG}_{300}$ ,  $\text{DE}_0$  e  $\text{DE}_1$  dobrando-se o número de ordenadas discretas até que o erro relativo máximo entre duas iterações consecutivas fosse inferior a 0.1%, o que ocorreu, como anteriormente, entre  $N = 80$  e  $N = 160$ . Os resultados obtidos para a aproximação com função de fase  $\text{HG}_{300}$  foram utilizados para análise da radiação absorvida e da distribuição de temperatura resultante, bem como para estimar os erros obtidos a partir do uso das aproximações Delta-Eddington. Com respeito ao método de Volumes Finitos, este foi executado para os instantes em que encerram-se os períodos de aquecimento,  $t = 10$  s e  $t = 35$  s, e de resfriamento,  $t = 25$  s e  $t = 50$  s. A quantidade de pontos utilizada para a discretização da variável

espacial foi tomada de modo que  $h_r < 10^{-5}$  m, para  $r = 1, \dots, 5$ , enquanto, para cada instante considerado, a quantidade de pontos utilizada para a discretização da variável temporal foi escolhida a fim de obter  $h_t < 10^{-4}$  s.

Nas Figuras 5.7 e 5.8, a radiação laser absorvida (normalizada por  $q_0$ ) e a distribuição de temperatura são apresentadas para os casos sem e com nanopartículas. Nota-se que, na ausência de nanopartículas, os picos de temperatura foram de  $38.4^\circ\text{C}$ , para  $t = 10$  s, e  $40^\circ\text{C}$ , para  $t = 35$  s, valores para os quais nenhum efeito térmico favorável ao tratamento é observado de acordo com Niemz [48]. Além disso, embora a radiação tenha sido predominantemente absorvida na epiderme e no tumor, tais picos ocorreram somente na derme reticular. Por outro lado, a inserção de nanopartículas contribuiu para um aumento considerável da absorção da radiação laser nas camadas iniciais, reduzindo a quantidade absorvida nas camadas mais profundas e deslocando os picos de temperatura para a região do tumor. Nesse caso, a temperatura atingiu os valores máximos de  $43.5^\circ\text{C}$  e  $43.7^\circ\text{C}$  para  $t = 10$  s e  $t = 35$  s, respectivamente, suficientes para a ocorrência de hipertermia conforme Niemz [48].

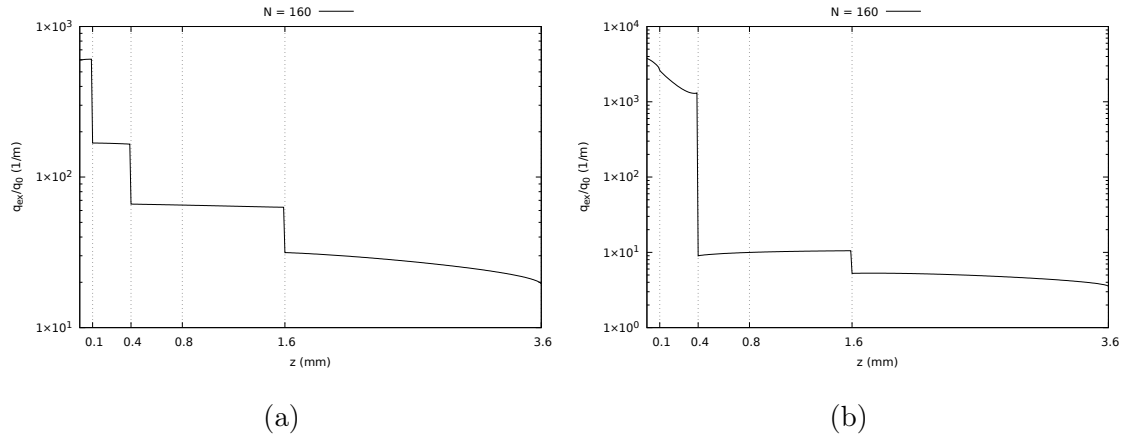


Figura 5.7: Problema 5: radiação absorvida pelos tecidos (normalizada por  $q_0 = 20$   $\text{kW}/\text{m}^2$ ). Tecidos (a) sem nanopartículas; (b) com nanopartículas. Valores obtidos pelo método  $\text{ADO}_{160}$  para a aproximação da função de fase de Henyey-Greenstein  $\text{HG}_{300}$ .

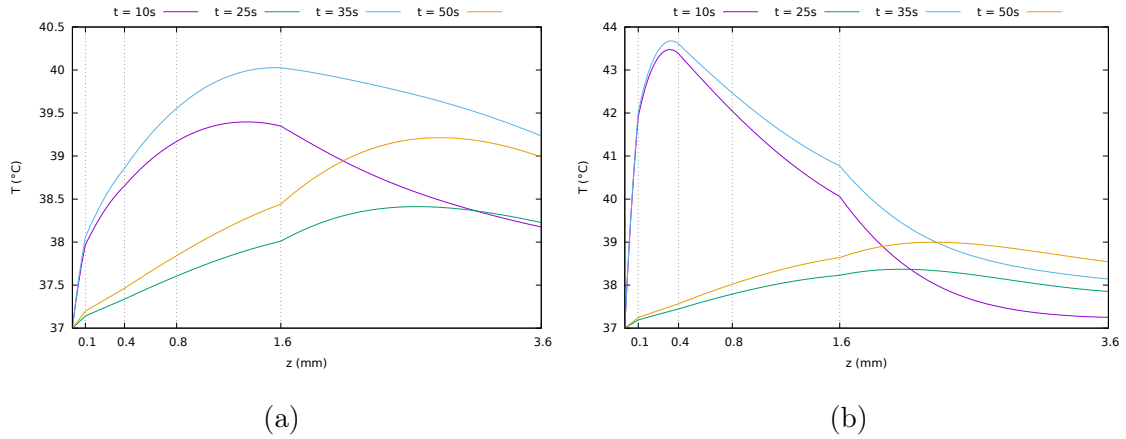


Figura 5.8: Problema 5: temperatura nos tecidos calculada em diferentes instantes. Tecidos (a) sem nanopartículas; (b) com nanopartículas. Valores obtidos pelo acoplamento dos métodos de Volumes Finitos e  $ADO_{160}$  para a aproximação da função de fase de Henyey-Greenstein  $HG_{300}$ .

Os erros relativos estimados para radiação absorvida calculada a partir das aproximações Delta-Eddington isotrópica (com  $N = 2$  e  $N = 160$ ) e linearmente anisotrópica (com  $N = 160$ ) são apresentados na Figura 5.9. Na ausência de nanopartículas, nota-se que o erro foi menor na camada inicial e maior nas camadas mais profundas, atingindo o valor máximo sobre a gordura. Por outro lado, o contrário foi observado no caso com nanopartículas, onde o erro foi maior nas camadas em que estas foram aplicadas, com picos sobre a interface ar-epiderme e sobre o tumor. À exceção da aproximação de menor ordem, observa-se ainda que, nesse caso, os erros relativos máximos foram um pouco maiores, mas as aproximações produziram, de modo geral, resultados melhores. Na ausência de nanopartículas, os erros relativos médios foram de aproximadamente 23% para a solução  $ADO_2$  com função de fase  $DE_0$ , 7.5% para a solução  $ADO_{160}$  com função de fase  $DE_0$  e 2.7% para a solução  $ADO_{160}$  com função de fase  $DE_1$ . Já na presença de nanopartículas, esses erros decaíram para aproximadamente 4.8%, 3.9% e 1.9%, respectivamente.

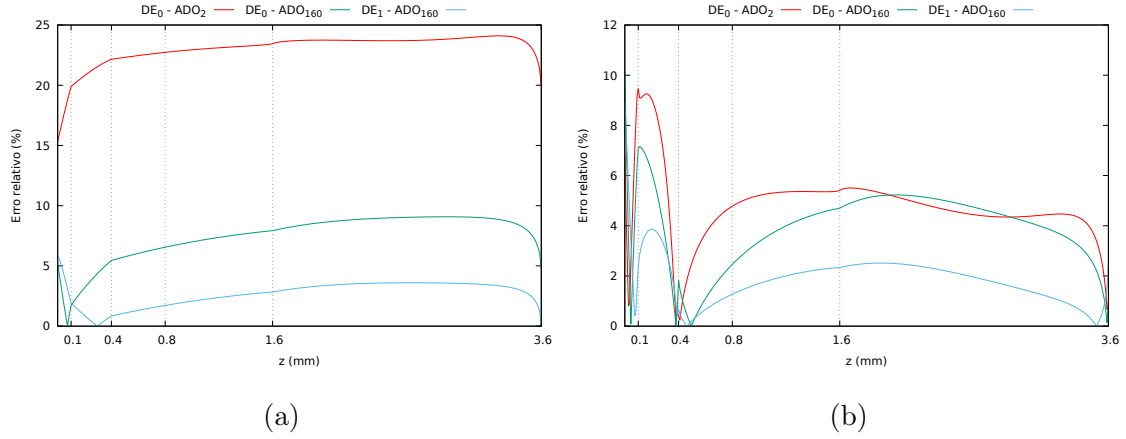


Figura 5.9: Problema 5: erros relativos para a radiação absorvida pelos tecidos calculada pelo método  $ADO_N$  para as aproximações da função de fase Henyey-Greenstein  $DE_0$  e  $DE_1$ . Tecidos (a) sem nanopartículas; (b) com nanopartículas. Valores de referência calculados pelo método  $ADO_{160}$  com função de fase  $HG_{300}$ .

O impacto do uso das aproximações Delta-Eddington sobre os resultados do problema acoplado é apresentado nas Figuras 5.10, 5.11, 5.12 e 5.13. Como é possível observar, os erros relativos foram consideravelmente menores em comparação aos obtidos para o problema de radiação isoladamente. De fato, mesmo no caso de menor ordem, a diferença de temperatura com respeito à solução referência foi inferior a 1.8% e a 1% para os tecidos sem e com nanopartículas, respectivamente. Para essa aproximação, nota-se ainda que em nenhum momento a diferença absoluta de temperatura ultrapassou  $0.7^\circ\text{C}$ . Evidentemente, as aproximações com  $N = 160$  produziram resultados mais precisos. Para o caso isotrópico, os erros relativo e absoluto máximos foram limitados por 0.7% e  $0.3^\circ\text{C}$ , enquanto para a aproximação linearmente anisotrópica estes foram limitados por 0.4% e  $0.15^\circ\text{C}$ , respectivamente. Cabe notar que, na presença de nanopartículas, os erros máximos foram atingidos na região de maior interesse, isto é, sobre o tumor. Além disso, observa-se um acúmulo de erro a medida que o tempo avança, resultado esperado dadas as diferentes aproximações do termo fonte de radiação.

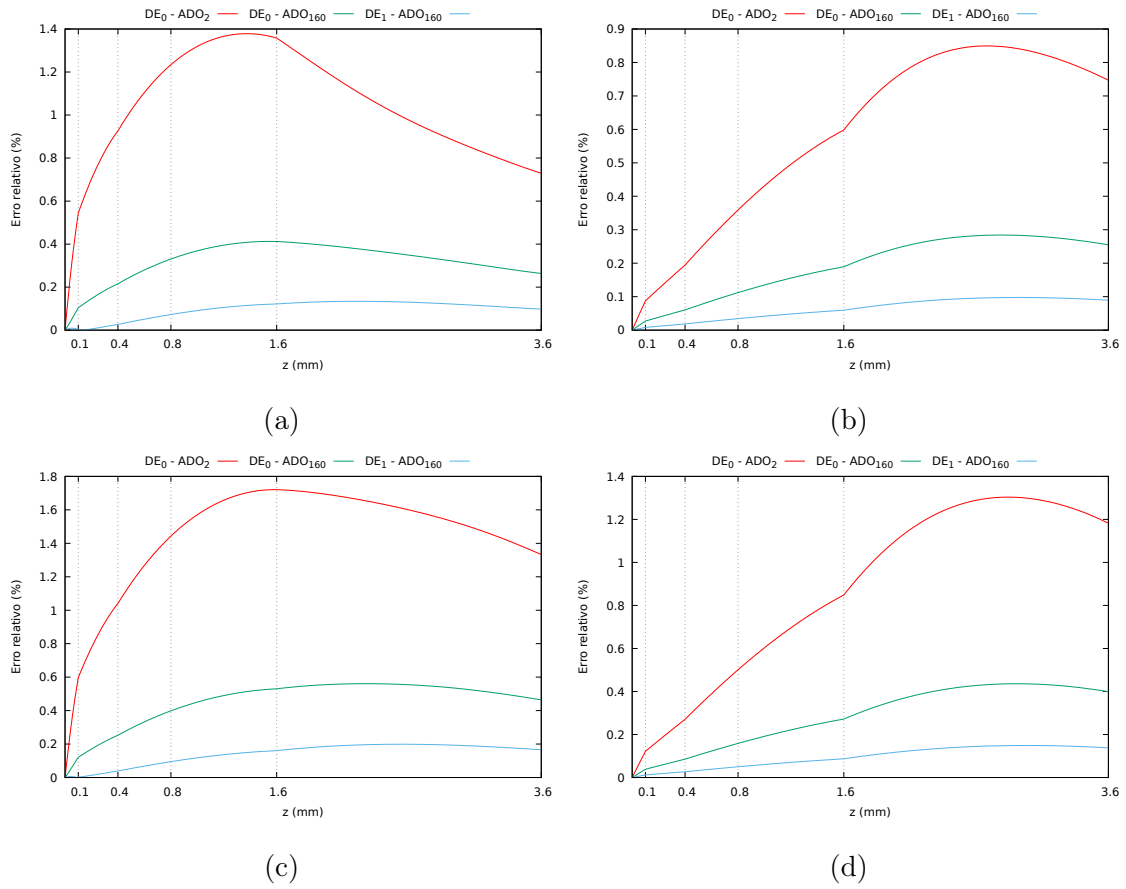


Figura 5.10: Problema 5: erros relativos para a temperatura nos tecidos sem nanopartículas calculada pelo acoplamento dos métodos de Volumes Finitos e  $ADO_N$  para as aproximações da função de fase Henyey-Greenstein  $DE_0$  e  $DE_1$ . Instante (a)  $t = 10$  s; (b)  $t = 25$  s; (c)  $t = 35$  s; (d)  $t = 50$  s. Valores de referência calculados pelo acoplamento dos métodos de Volumes Finitos e  $ADO_{160}$  para a função de fase  $HG_{300}$ .

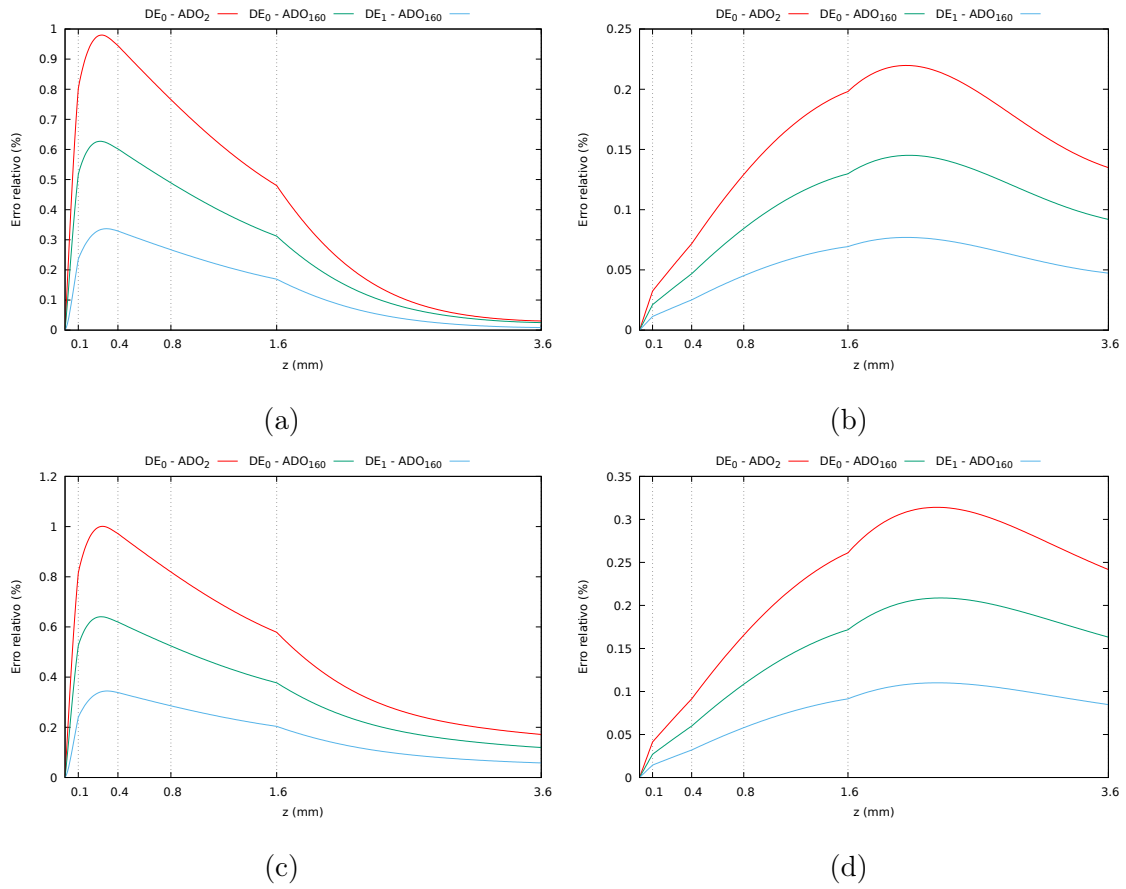


Figura 5.11: Problema 5: erros relativos para a temperatura nos tecidos com nanopartículas calculada pelo acoplamento dos métodos de Volumes Finitos e  $ADO_N$  para as aproximações da função de fase Henyey-Greenstein  $DE_0$  e  $DE_1$ . Instante (a)  $t = 10$  s; (b)  $t = 25$  s; (c)  $t = 35$  s; (d)  $t = 50$  s. Valores de referência calculados pelo acoplamento dos métodos de Volumes Finitos e  $ADO_{160}$  para a função de fase  $HG_{300}$ .

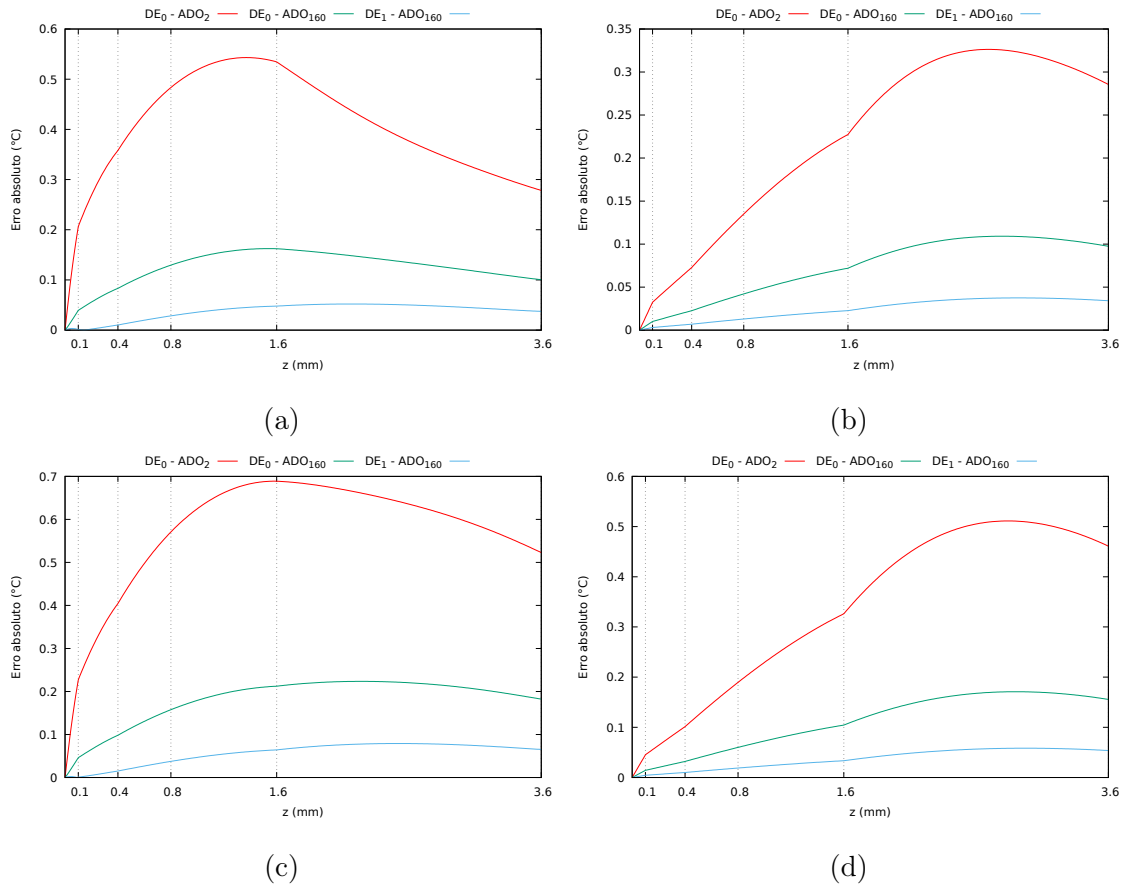


Figura 5.12: Problema 5: erros absolutos para a temperatura nos tecidos sem nanopartículas calculada pelo acoplamento dos métodos de Volumes Finitos e  $ADO_N$  para as aproximações da função de fase Henyey-Greenstein  $DE_0$  e  $DE_1$ . Instante (a)  $t = 10$  s; (b)  $t = 25$  s; (c)  $t = 35$  s; (d)  $t = 50$  s. Valores de referência calculados pelo acoplamento dos métodos de Volumes Finitos e  $ADO_{160}$  para a função de fase  $HG_{300}$ .



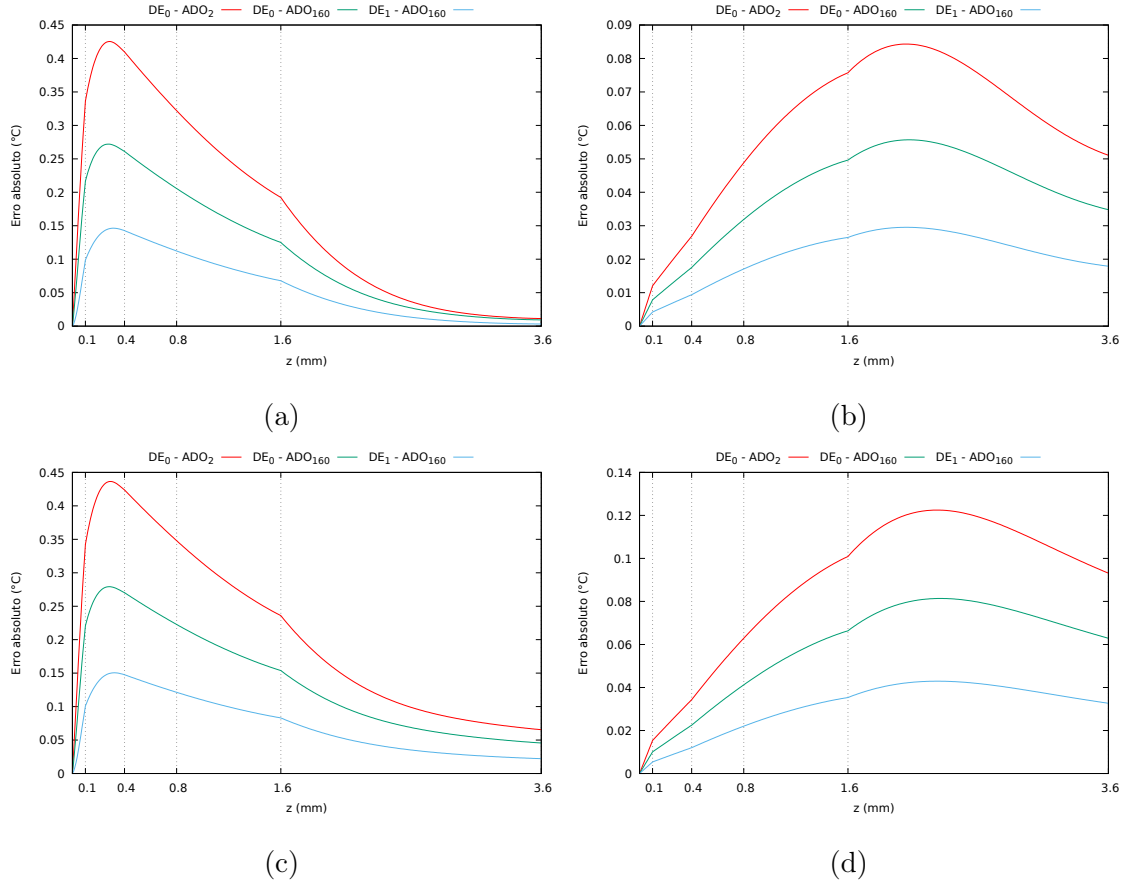


Figura 5.13: Problema 5: erros absolutos para a temperatura nos tecidos com nanopartículas calculada pelo acoplamento dos métodos de Volumes Finitos e  $ADO_N$  para as aproximações da função de fase Henyey-Greenstein  $DE_0$  e  $DE_1$ . Instante (a)  $t = 10$  s; (b)  $t = 25$  s; (c)  $t = 35$  s; (d)  $t = 50$  s. Valores de referência calculados pelo acoplamento dos métodos de Volumes Finitos e  $ADO_{160}$  para a função de fase  $HG_{300}$ .

Algumas hipóteses podem ser levantadas para explicar por que foi possível resolver o problema de biotransferência de calor com boa precisão utilizando uma aproximação menos refinada da radiação absorvida. Uma possibilidade é que os parâmetros do problema de biotransferência de calor compensaram as imprecisões observadas no problema de transferência radiativa. Por exemplo, a temperatura fixada na fronteira  $z = 0$ , mesmo lugar em que a fonte de radiação foi posicionada, fez com que todas as soluções convergissem para o mesmo valor numa região relevante

para o fenômeno de transferência radiativa, amenizando o erro no restante do domínio. Outra possibilidade é que, nas condições do problema, o método de Volumes Finitos não seja tão sensível a variações no termo fonte. Tal hipótese é considerada pois uma diferença de temperatura mais significativa foi observada em [46], onde o método de Elementos Finitos foi utilizado junto do método  $P_1$  para comparar as soluções obtidas com as aproximações Delta-Eddington isotrópica e linearmente anisotrópica da função de fase de Henyey-Greenstein.

De todo modo, os resultados deste e dos problemas anteriores sugerem que os métodos ADO e de Volumes Finitos podem ser utilizados em conjunto para fornecer aproximações precisas de problemas unidimensionais de transferência de calor em tecidos biológicos. O estudo dessa abordagem a outras aplicações, bem como a problemas multidimensionais, é de interesse e pode ser considerado em trabalhos futuros. Por fim, para referência, os resultados numéricos para a radiação absorvida e para a distribuição de temperatura são apresentados nas Tabelas 5.12, 5.13, 5.14 e 5.15.

Tabela 5.12: Problema 5: resultados numéricos para a radiação absorvida ( $\text{W}/\text{m}^2$ ) pelos tecidos sem nanopartículas. Valores obtidos pelo método  $\text{ADO}_{160}$  para as aproximações da função de fase de Henyey-Greenstein  $\text{HG}_{300}$ ,  $\text{DE}_0$  e  $\text{DE}_1$ . Resultados normalizados por  $q_0 = 20 \text{ kW}/\text{m}^2$ .

$z$ (mm)	0	0.1	0.4	0.8	1.6	3.6
$\text{HG}_{300}$	601.02482	168.78102	66.31069	65.31201	31.57077	19.56500
$\text{DE}_0$	632.22734	165.81844	62.69610	61.03211	29.06800	18.63184
$\text{DE}_1$	636.36202	172.02515	65.74907	64.18883	30.67582	19.53502

Tabela 5.13: Problema 5: resultados numéricos para a temperatura ( $^{\circ}\text{C}$ ) nos tecidos sem nanopartículas calculada em diferentes instantes. Valores obtidos pelo acoplamento dos métodos de Volumes Finitos e  $\text{ADO}_{160}$  para as aproximações da função de fase de Henyey-Greenstein  $\text{HG}_{300}$ ,  $\text{DE}_0$  e  $\text{DE}_1$ .

$z$ (mm)	0	0.1	0.4	0.8	1.6	3.6	
$\text{HG}_{300}$	$t = 10$ s	37.00000	37.97111	38.65698	39.17463	39.35400	38.17839
	$t = 25$ s	37.00000	37.14178	37.33746	37.60562	38.01228	38.22942
	$t = 35$ s	37.00000	38.06236	38.86200	39.55995	40.03262	39.23877
	$t = 50$ s	37.00000	37.19763	37.46325	37.84395	38.44432	38.99318
$\text{DE}_0$	$t = 10$ s	37.00000	37.93176	38.57365	39.04515	39.19181	38.07784
	$t = 25$ s	37.00000	37.13170	37.31486	37.56351	37.94032	38.13196
	$t = 35$ s	37.00000	38.01637	38.76373	39.40231	39.82034	39.05647
	$t = 50$ s	37.00000	37.18336	37.43121	37.78393	38.33981	38.83760
$\text{DE}_1$	$t = 10$ s	37.00000	37.97246	38.64672	39.14621	39.30615	38.14102
	$t = 25$ s	37.00000	37.13870	37.33056	37.59269	37.98965	38.19527
	$t = 35$ s	37.00000	38.06157	38.84693	39.52242	39.96840	39.17353
	$t = 50$ s	37.00000	37.19317	37.45322	37.82505	38.41084	38.93946

Tabela 5.14: Problema 5: resultados numéricos para a radiação absorvida ( $\text{W}/\text{m}^2$ ) pelos tecidos com nanopartículas. Valores obtidos pelo método  $\text{ADO}_{160}$  para as aproximações da função de fase de Henyey-Greenstein  $\text{HG}_{300}$ ,  $\text{DE}_0$  e  $\text{DE}_1$ . Resultados normalizados por  $q_0 = 20 \text{ kW}/\text{m}^2$ .

$z$ (mm)	0	0.1	0.4	0.8	1.6	3.6
$\text{HG}_{300}$	3760.86356	2621.64393	8.99425	9.97627	5.26073	3.55455
$\text{DE}_0$	4141.28720	2435.41140	9.16056	9.73084	5.01352	3.59160
$\text{DE}_1$	4096.38836	2560.76007	9.05484	9.84923	5.13780	3.64528

Tabela 5.15: Problema 5: resultados numéricos para a temperatura ( $^{\circ}\text{C}$ ) nos tecidos com nanopartículas calculada em diferentes instantes. Valores obtidos pelo acoplamento dos métodos de Volumes Finitos e  $\text{ADO}_{160}$  para as aproximações da função de fase de Henyey-Greenstein  $\text{HG}_{300}$ ,  $\text{DE}_0$  e  $\text{DE}_1$ .

$z$ (mm)	0	0.1	0.4	0.8	1.6	3.6	
$\text{HG}_{300}$	$t = 10$ s	37.00000	41.91213	43.38192	42.04748	40.06001	37.25101
	$t = 25$ s	37.00000	37.19101	37.44539	37.79089	38.22834	37.85167
	$t = 35$ s	37.00000	42.01330	43.60852	42.46861	40.77116	38.14158
	$t = 50$ s	37.00000	37.24516	37.56722	38.02087	38.63992	38.54123
$\text{DE}_0$	$t = 10$ s	37.00000	41.69547	43.12083	41.84179	39.93498	37.24170
	$t = 25$ s	37.00000	37.18315	37.42788	37.75902	38.17872	37.81686
	$t = 35$ s	37.00000	41.79255	43.33826	42.24586	40.61728	38.09595
	$t = 50$ s	37.00000	37.23510	37.54475	37.97965	38.57357	38.47836
$\text{DE}_1$	$t = 10$ s	37.00000	41.81341	43.23916	41.93518	39.99220	37.24778
	$t = 25$ s	37.00000	37.18679	37.43599	37.77381	38.20183	37.83375
	$t = 35$ s	37.00000	41.91241	43.46088	42.34725	40.68805	38.11937
	$t = 50$ s	37.00000	37.23978	37.55521	37.99886	38.60459	38.50857



## 6 CONCLUSÕES

Neste trabalho, foi desenvolvida com sucesso uma formulação matemática para a resolução de problemas unidimensionais de transferência de calor em tecidos biológicos com influência da radiação térmica, definidos em um meio multicamada em geometria plana infinita. Com o objetivo de obter uma solução precisa e eficiente para o fenômeno de radiação, o método Analítico de Ordenadas Discretas (ADO) foi aplicado junto de uma decomposição da intensidade à equação de transferência radiativa monocromática em estado estacionário, com simetria azimutal, espalhamento anisotrópico arbitrário e condições de contorno gerais, incluindo a incidência de radiação colimada. Com respeito ao fenômeno de biotransferência de calor, uma versão recente do método de Volumes Finitos, capaz de preservar a estrutura tridiagonal da discretização clássica em meios homogêneos, foi aplicada à equação de Pennes, considerando interfaces em contato térmico ideal e condições de contorno gerais.

Resultados conhecidos de problemas de transporte de partículas encontrados na literatura foram utilizados para verificar a solução obtida pelo método ADO em diferentes configurações, a qual se mostrou rápida e precisa mesmo para as discretizações angulares de baixa ordem. Para malhas espaciais e temporais suficientemente finas, o método de Volumes Finitos também produziu bons resultados, apresentando ótima concordância com a solução analítica de um problema simplificado de biotransferência de calor.

A fim de testar a formulação em configurações mais realistas, dois problemas de hipertermia induzida por laser foram considerados para simular o tratamento de um tumor subcutâneo. Aqui, a qualidade da solução do problema de transferência radiativa, bem como sua influência sobre o problema de biotransferência de calor, foram investigadas analisando diferentes discretizações da variável angular e diferentes aproximações da função da fase de Henyey-Greenstein. Nesse contexto, foi observada

a relevância do uso de aproximações em ordenadas discretas de alta ordem para modelar com precisão o fenômeno de transferência radiativa, um reflexo dos parâmetros desafiadores característicos de tecidos biológicos. De fato, aproximações de baixa ordem não produziram resultados de alta qualidade, embora, ainda assim, tenham possibilitado o cálculo da radiação absorvida com precisão superior à encontrada na literatura para o método  $P_1$  quando combinadas com a aproximação Delta-Eddington da função de fase. Por outro lado, aproximações de alta ordem produziram resultados com precisão semelhante a de resultados encontrados na literatura para o método de Monte Carlo, principalmente quando utilizadas em conjunto com a representação da função de fase original em uma série de polinômios de Legendre com alto grau de anisotropia.

Apesar das diferenças observadas, para os parâmetros considerados foi possível resolver o problema de biotransferência de calor com boa precisão utilizando aproximações menos refinadas da radiação absorvida. Ainda que uma análise mais detalhada seja necessária para melhor compreender esse resultado, uma possível explicação é que a condição de contorno de temperatura fixa na fronteira onde a fonte de radiação foi posicionada compensou as imprecisões introduzidas pelas aproximações de menor ordem do fenômeno de transferência radiativa. Além disso, é possível que, nas condições analisadas, o método de Volumes Finitos seja pouco sensível a variações no termo fonte de radiação. De todo modo, os resultados obtidos sugerem que aproximações de menor ordem do problema de transferência radiativa são uma alternativa para reduzir a complexidade matemática e o tempo computacional de resolução do problema acoplado, o que pode ser relevante em situações onde é necessário calcular a radiação absorvida diversas vezes. Já as aproximações de alta ordem podem ser utilizadas para produzir resultados de alta qualidade, sem aumentar o tempo computacional de forma significativa. Em particular, resultados numéricos precisos não publicados anteriormente na literatura, segundo nosso conhecimento, foram obtidos neste trabalho para ambos os problemas de hipertermia induzida por laser estudados.

A influência do problema de transferência radiativa sobre o tratamento de câncer por hipertermia induzida por laser também foi brevemente analisada para diferentes variações dos coeficientes de absorção e de espalhamento, visando simular a aplicação de nanopartículas como agentes fototérmicos. Nesse caso, observou-se um aumento considerável da radiação absorvida pelos tecidos com nanopartículas, reduzindo a absorção pelos demais tecidos. Como consequência, houve um deslocamento dos picos de temperatura de tecidos saudáveis para a região do tumor, favorecendo a hipertermia localizada e reduzindo possíveis efeitos colaterais. Além disso, ao contrário do caso sem nanopartículas, tais picos ultrapassaram os  $42^{\circ}\text{C}$ , temperatura suficiente para a ocorrência de hipertermia de acordo com a literatura.

Por fim, observa-se que os métodos estudados neste trabalho são uma alternativa de fácil implementação. Em particular, o método ADO é capaz de tratar diferentes aproximações da função de fase de espalhamento e diferentes discretizações angulares com facilidade. Os resultados obtidos aqui sugerem que os métodos ADO e de Volumes Finitos podem ser utilizados em conjunto para fornecer aproximações precisas de problemas unidimensionais de transferência de calor em tecidos biológicos com influência da radiação térmica. Em trabalhos futuros, é de interesse estender a aplicação desses métodos a formulações menos restritivas, possibilitando, por exemplo, o estudo de problemas com índice de refração variável, o estudo de problemas com termos fonte de radiação dependentes da temperatura e o estudo de problemas multidimensionais. Para melhor compreender o impacto do fenômeno de transferência radiativa sobre o fenômeno de biotransferência de calor, técnicas de adimensionalização das equações para simplificar o estudo de diferentes conjuntos de parâmetros, bem como a análise teórica de convergência e de estabilidade dos métodos, também são possíveis tópicos a serem abordados.





## REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- [1] ABRAMOWITZ, M., AND STEGUN, I. A. *Handbook of Mathematical Functions: with Formulas, Graphs, and Mathematical Tables*. Applied Mathematics Series. Dover Publications, 1965.
- [2] ASLLANAJ, F., CONTASSOT-VIVIER, S., HOHMANN, A., AND KIENLE, A. Light propagation in biological tissue. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 224 (2019), 78–90.
- [3] AZEVEDO, F. S., SAUTER, E., THOMPSON, M., AND VILHENA, M. T. *Green's Function Decomposition Method for Transport Equation*. Springer New York, 2013, pp. 15–39.
- [4] BARICHELLO, L. B. Explicit formulations for radiative transfer problems. In *Thermal Measurements and Inverse Techniques*, H. R. B. Orlande, O. Fudyin, D. Maillet, and R. M. Cotta, Eds., Heat Transfer. CRC Press, 2011, ch. 15, pp. 541–562.
- [5] BARICHELLO, L. B., GARCIA, R. D. M., AND SIEWERT, C. E. A spherical-harmonics solution for radiative-transfer problems with reflecting boundaries and internal sources. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 60 (1998), 247–260.
- [6] BARICHELLO, L. B., GARCIA, R. D. M., AND SIEWERT, C. E. Particular solutions for the discrete-ordinates method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 64 (2000), 219–226.
- [7] BARICHELLO, L. B., RUI, K., AND DA CUNHA, R. D. On the application of the ADO method to the solution of two-dimensional radiative transfer problems in anisotropic scattering media. *International Journal of Thermal Sciences* 179 (2022), 107685.

- [8] BARICHELLO, L. B., AND SIEWERT, C. E. On the equivalence between the discrete ordinates and the spherical harmonics methods in radiative transfer. *Nuclear Science and Engineering* 130 (1998), 79–84.
- [9] BARICHELLO, L. B., AND SIEWERT, C. E. A discrete-ordinates solution for a non grey model with complete frequency redistribution. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 62 (1999), 665–675.
- [10] BARICHELLO, L. B., AND SIEWERT, C. E. A discrete-ordinates solution for a polarization model with complete frequency redistribution. *The Astrophysical Journal* 513 (1999), 370–382.
- [11] BARICHELLO, L. B., AND SIEWERT, C. E. A new version of the discrete-ordinates method. In *Proceedings of the 2nd International Conference on Computational Heat and Mass Transfer* (Rio de Janeiro, Brazil, 2001), pp. 340–347.
- [12] BAYAZITOGU, Y., KHERADMAND, S., AND TULLIUS, T. K. An overview of nanoparticle assisted laser therapy. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 67 (2013), 469–486.
- [13] BEIK, J., ABED, Z., GHOREISHI, F. S., HOSSEINI-NAMI, S., MEHRZADI, S., SHAKERI-ZADEH, A., AND KAMRAVA, S. K. Nanotechnology in hyperthermia cancer therapy: From fundamental principles to advanced applications. *Journal of Controlled Release* 235 (2016), 205–221.
- [14] BHOWMIK, A., SINGH, R., REPAKA, R., AND MISHRA, S. C. Conventional and newly developed bioheat transport models in vascularized tissues: A review, 2013.
- [15] CASE, K. M., AND ZWEIFEL, P. F. *Linear Transport Theory*. Addison-Wesley series in nuclear engineering. Addison-Wesley Publishing Company, 1967.

- [16] CHALHOUB, E. S., AND GARCIA, R. D. M. The equivalence between two techniques of angular interpolation for the discrete-ordinates method. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 64 (2000), 517–535.
- [17] CHANDRASEKHAR, S. *Radiative transfer*, rev. ed. Dover Books on Intermediate and Advanced Mathematics. Dover Publications, 1960.
- [18] CHEONG, W. F., PRAHL, S. A., AND WELCH, A. J. A review of the optical properties of biological tissues. *IEEE Journal of Quantum Electronics* 26, 12 (1990), 2166–2185.
- [19] COELHO, P. J. Advances in the discrete ordinates and finite volume methods for the solution of radiative heat transfer problems in participating media. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 145 (2014), 121–146.
- [20] CRANK, J., AND NICOLSON, P. A practical method for numerical evaluation of solutions of partial differential equations of the heat-conduction type. *Mathematical Proceedings of the Cambridge Philosophical Society* 43, 1 (1947), 50–67.
- [21] CROSBIE, A. L., AND DAVIDSON, G. W. Dirac-delta function approximations to the scattering phase function. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 33, 4 (1985), 391–409.
- [22] DATTA, A. K. *Biological and Bioenvironmental Heat and Mass Transfer*, 1 ed. Food Science and Technology. Marcel Dekker, 2002.
- [23] DOMBROVSKY, L. A., RANDRIANALISOA, J., LIPINSKI, W., AND TIMCHENKO, V. Simplified approaches to radiative transfer simulations in laser-induced hyperthermia of superficial tumors. *Computational Thermal Sciences* 5 (2013), 521–530.
- [24] DOMBROVSKY, L. A., TIMCHENKO, V., JACKSON, M., AND YEOH, G. H. A combined transient thermal model for laser hyperthermia of tumors with

- embedded gold nanoshells. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 54 (2011), 5459–5469.
- [25] GARCIA, R. D. M., SIEWERT, C. E., AND YACOUT, A. M. Radiative transfer in a multi-layer medium subject to Fresnel boundary and interface conditions and uniform illumination by obliquely incident parallel rays. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 109, 12 (2008), 2151–2170.
- [26] GROFF, F., BARICHELLO, L. B., AND SAUTER, E. A concise and accurate solution for radiative transfer problems relevant in hyperthermia models. In *Proceedings of CHT-21 ICHMT International Symposium on Advances in Computational Heat Transfer* (Rio de Janeiro, Brazil, 2021), pp. 445–460.
- [27] GUDNASON, K., SIGURDSSON, S., SNORRADOTTIR, B. S., MASSON, M., AND JONSDOTTIR, F. A numerical framework for drug transport in a multi-layer system with discontinuous interlayer condition. *Mathematical Biosciences* 295 (2018), 11–23.
- [28] HAHN, D. W., AND ÖZİŞİK, M. N. *Heat Conduction*. Wiley, 2012.
- [29] HAN, W., LONG, F., CONG, W., INTES, X., AND WANG, G. Radiative transfer with delta-eddington-type phase functions. *Applied Mathematics and Computation* 300 (2017), 70–78.
- [30] HICKSON, R. I., BARRY, S. I., MERCER, G. N., AND SIDHU, H. S. Finite difference schemes for multilayer diffusion. *Mathematical and Computer Modelling* 54, 1 (2011), 210–220.
- [31] HOBINY, A. D., AND ABBAS, I. A. Nonlinear analysis of dual-phase lag bio-heat model in living tissues induced by laser irradiation. *Journal of Thermal Stresses* 43, 4 (2020), 503–511.
- [32] HOWELL, J., MENGÜC, M., DAUN, K., AND SIEGEL, R. *Thermal Radiation Heat Transfer*. CRC Press, 2020.

- [33] HOWELL, J. R. The Monte Carlo method in radiative heat transfer. *Journal of Heat Transfer* 120, 3 (1998), 547–560.
- [34] KHALED, A. R. A., AND VAFAI, K. The role of porous media in modeling flow and heat transfer in biological tissues. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 46, 26 (2003), 4989–5003.
- [35] KISHORE, P., KUMAR, S., AND PATEL, V. M. Conjugate heat transfer analysis of laser-irradiated cylindrical-shaped biological tissue embedded with the optical inhomogeneity. *International Communications in Heat and Mass Transfer* 137 (2022), 106302.
- [36] KULIKOV, K., AND KOSHLAN, T. *Laser Interaction with Heterogeneous Biological Tissue: Mathematical Modeling*. Springer, 2018.
- [37] KUMAR, S., AND FELSKE, J. D. Radiative transport in a planar medium exposed to azimuthally unsymmetric incident radiation. *Journal of Quantitative Spectroscopy and Radiative Transfer* 35, 3 (1986), 187–212.
- [38] KUMAR, S., MAJUMDAR, A., AND TIEN, C. L. The differential-discrete-ordinate method for solutions of the equation of radiative transfer. *Journal of Heat Transfer* 112, 2 (1990), 424–429.
- [39] LAMIEN, B. *Problema de estimativa de estado no tratamento de câncer por hipertermia com aquecimento por laser diodo na faixa do infravermelho próximo*. PhD thesis, Universidade Federal do Rio de Janeiro, 2015.
- [40] LAZZARI, L., SAUTER, E., AND DE AZEVEDO, F. S. Simulation for non-homogeneous transport equation by Nyström method. *Brazilian Journal of Radiation Sciences* 8 (2020).
- [41] LEVEQUE, R. J. *Finite Volume Methods for Hyperbolic Problems*, 1 ed. Cambridge Texts in Applied Mathematics. Cambridge University Press, 2002.

- [42] LEWIS, E. E., AND MILLER, W. F. *Computational Methods of Neutron Transport*. American Nuclear Society, 1993.
- [43] LYU, C., AND ZHAN, R. Constitutive equations developed for modeling of heat conduction in bio-tissues: A review. *International Journal of Thermophysics* 42, 27 (2021).
- [44] MAILLET, D. A review of the models using the Cattaneo and Vernotte hyperbolic heat equation and their experimental validation. *International Journal of Thermal Sciences* 139 (2019), 424–432.
- [45] MARCH, N. G., AND CARR, E. J. Finite volume schemes for multilayer diffusion. *Journal of Computational and Applied Mathematics* 345 (2019), 206–223.
- [46] MAURENTE, A., LAMIEN, B., ORLANDE, H. R. B., AND ELIÇABE, G. E. Analysis of the  $P_1$ -approximation for the radiative heat transfer in skin tissue loaded with nanoparticles. In *22nd International Congress of Mechanical Engineering (COBEM 2013)* (Ribeirão Preto, Brazil, 2013).
- [47] MODEST, M. F. *Radiative Heat Transfer*, 3 ed. Academic Press, 2013.
- [48] NIEMZ, M. H. *Laser-tissue Interactions: Fundamentals and Applications*. Biological and medical physics series. Springer, 1996.
- [49] NUNES, C. E. A., AND BARROS, R. C. Aplicativo computacional para cálculos de blindagem com modelo de transporte  $S_N$  unidimensional e monoenergético. *Proceeding of INAC 2009 International Nuclear Atlantic Conference* (2009).
- [50] ÖZİŞİK, M. N. *Radiative Transfer and Interactions with Conduction and Convection*. A Wiley-Interscience publication. Wiley, 1973.
- [51] PENNES, H. H. Analysis of tissue and arterial blood temperatures in the resting human forearm. *Journal of Applied Physiology* 1, 2 (1948), 93–122.

- [52] PRAKASH, P., AND SRIMATHVEERAVALLI, G. *Principles and Technologies for Electromagnetic Energy Based Therapies*. Elsevier Science, 2021.
- [53] PRESS, W. H., TEUKOLSKY, S. A., VETTERLING, W. T., AND FLANNERY, B. P. *Numerical Recipes: The Art of Scientific Computing*, 3 ed. Cambridge University Press, 2007.
- [54] RANDRIANALISOA, J. H., DOMBROVSKY, L. A., LIPIŃSKI, W., AND TIMCHENKO, V. Effects of short-pulsed laser radiation on transient heating of superficial human tissues. *International Journal of Heat and Mass Transfer* 78 (2014), 488–497.
- [55] RAO, W., DENG, Z., AND LIU, J. A review of hyperthermia combined with radiotherapy/chemotherapy on malignant tumors. *Critical Reviews<sup>TM</sup>; in Biomedical Engineering* 38, 1 (2010), 101–116.
- [56] WELCH, A. J., AND VAN GEMERT, M. J. C. *Optical-Thermal Response of Laser-Irradiated Tissue*. Springer Netherlands, 2011.
- [57] ÇETİNGÜL, M. P., AND HERMAN, C. A heat transfer model of skin tissue for the detection of lesions: sensitivity analysis. *Physics in Medicine and Biology* 55 (2010), 5933–5951.





## APÊNDICE A

### SOLUÇÃO ANALÍTICA PARA O PROBLEMA 3

Neste apêndice, a solução analítica do problema de biotransferência de calor abordado na seção 5.1.3 é apresentada. Para isso, considera-se a equação diferencial parcial

$$\frac{\partial}{\partial t}T(z, t) = \alpha \frac{\partial^2}{\partial z^2}T(z, t) - \gamma T(z, t) + Q(z), \quad (\text{A.1})$$

para  $z \in (0, d)$  e  $t > 0$ , sujeita à condição inicial

$$T(z, 0) = T_i(z) \quad (\text{A.2})$$

para  $z \in (0, d)$ , e às condições de contorno

$$T(0, t) = f_1 \quad (\text{A.3})$$

e

$$aT(d, t) + b \frac{\partial}{\partial z}T(z, t) \Big|_{z=d} = f_2 \quad (\text{A.4})$$

para  $t > 0$ . Aqui, supõe-se que a função  $Q$  é da forma

$$Q(z) = A + Be^{-Cz}, \quad (\text{A.5})$$

e que as constantes  $A, B, C, \alpha, \gamma, a, b, f_1, f_2$  são todas positivas.

O problema (A.1)-(A.4) pode ser resolvido reescrevendo-se  $T$  como

$$T(z, t) = u(z, t) + v(z), \quad (\text{A.6})$$

onde  $u$  e  $v$  satisfazem os problemas

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial t}u(z, t) &= \alpha \frac{\partial^2}{\partial z^2}u(z, t) - \gamma u(z, t), \quad z \in (0, d), \quad t > 0 \\ u(z, 0) &= T_i(z) - v(z), \quad z \in (0, d) \\ u(0, t) &= 0, \quad au(d, t) + b \frac{\partial}{\partial z}u(z, t) \Big|_{z=d} = 0, \quad t > 0, \end{aligned} \quad (\text{A.7})$$

e

$$\begin{aligned} \alpha \frac{d^2}{dz^2} v(z) - \gamma v(z) + Q(z) &= 0, \quad z \in (0, d) \\ v(0) = f_1, \quad av(d) + b \frac{d}{dz} v(z) \Big|_{z=d} &= f_2, \end{aligned} \quad (\text{A.8})$$

respectivamente.

Aplicando-se a técnica de separação de variáveis, encontra-se, para o problema (A.7), a solução

$$u(z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin(\lambda_n z) e^{-(\gamma + \alpha \lambda_n^2)t}, \quad (\text{A.9})$$

sendo  $\lambda_n$  as raízes positivas da equação transcendente

$$\tan(\lambda_n d) = -\frac{b}{a} \lambda_n, \quad (\text{A.10})$$

e  $b_n$  os coeficientes

$$b_n = \frac{4\lambda_n}{2\lambda_n d - \sin(2\lambda_n d)} \int_0^d [T_i(z) - v(z)] \sin(\lambda_n z) dz. \quad (\text{A.11})$$

Com respeito ao problema (A.8), decompondo-se a função  $v$  como a soma da solução do problema homogêneo associado a uma solução particular, obtém-se

$$v(z) = \left( \frac{\mathcal{F}_2 - Y\mathcal{F}_1}{X - Y} \right) e^{-\sqrt{\gamma/\alpha}z} + \left( \frac{X\mathcal{F}_1 - \mathcal{F}_2}{X - Y} \right) e^{\sqrt{\gamma/\alpha}z} + \frac{A}{\gamma} + \frac{B}{\gamma - \alpha C^2} e^{-Cz}, \quad (\text{A.12})$$

onde

$$\mathcal{F}_1 = f_1 - \frac{A}{\gamma} - \frac{B}{\gamma - \alpha C^2}, \quad (\text{A.13})$$

$$\mathcal{F}_2 = f_2 - a \frac{A}{\gamma} - (a - bC) \frac{B}{\gamma - \alpha C^2} e^{-Cd}, \quad (\text{A.14})$$

$$X = \left( a - b\sqrt{\gamma/\alpha} \right) e^{-\sqrt{\gamma/\alpha}d} \quad (\text{A.15})$$

e

$$Y = \left( a + b\sqrt{\gamma/\alpha} \right) e^{\sqrt{\gamma/\alpha}d}. \quad (\text{A.16})$$

Logo, a solução do problema (A.1)-(A.4) é dada por

$$T(z, t) = \sum_{n=1}^{\infty} b_n \sin(\lambda_n z) e^{-(\gamma + \alpha \lambda_n^2)t} + \left( \frac{\mathcal{F}_2 - Y \mathcal{F}_1}{X - Y} \right) e^{-\sqrt{\gamma/\alpha}z} + \left( \frac{X \mathcal{F}_1 - \mathcal{F}_2}{X - Y} \right) e^{\sqrt{\gamma/\alpha}z} + \frac{A}{\gamma} + \frac{B}{\gamma - \alpha C^2} e^{-Cz}, \quad (\text{A.17})$$

onde  $\lambda_n$ ,  $b_n$ ,  $\mathcal{F}_1$ ,  $\mathcal{F}_2$ ,  $X$  e  $Y$  são dadas pelas equações (A.10), (A.11), (A.13), (A.14), (A.15) e (A.16), respectivamente.

Por fim, para obter a solução analítica do problema de biotransferência de calor da seção 5.1.3, basta considerar nas equações acima os parâmetros

$$\alpha = \frac{k}{\rho c}, \quad (\text{A.18})$$

$$\gamma = \frac{\rho_b c_b v_b}{\rho c}, \quad (\text{A.19})$$

$$A = \gamma T_b + \frac{q_m}{\rho c}, \quad (\text{A.20})$$

$$B = \kappa \frac{q_c}{\rho c}, \quad (\text{A.21})$$

$$C = \frac{\kappa}{\mu_c}, \quad (\text{A.22})$$

$$a = h_d, \quad (\text{A.23})$$

$$b = k, \quad (\text{A.24})$$

$$f_1 = T_0 \quad (\text{A.25})$$

e

$$f_2 = h_d T_{ex}, \quad (\text{A.26})$$

conforme a notação utilizada no problema em questão.