

**SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE EM GEOMETRIA
TRIDIMENSIONAL (X-Y-Z) PELO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS
E DA EXPANSÃO EM HARMÔNICOS ESFÉRICOS**

Almir Fernandes
José Rubens Maiorino

Divisão de Física de Reatores (RTF)
Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN)
Comissão Nacional de Energia Nuclear (CNEN)
São Paulo, SP

RESUMO

Este trabalho apresenta um método de solução da equação de transporte em três dimensões. A componente angular é aproximada por Polinômios Associados de Legendre enquanto que a componente espacial é aplicada a técnica de elementos finitos. O programa decorrente do desenvolvimento analítico encontra-se em fase inicial de testes e alguns resultados são apresentados.

ABSTRACT

This work presents a method to solve the neutron transport equation in three space dimensions. The angular flux is approximated by spherical harmonics and the finite element method is applied to the space component. The program originated by the analytical development is being tested and some results are presented.

1. Introdução

O sucesso alcançado pela aplicação do método dos elementos finitos na solução de equações diferenciais de interesse em diversos ramos da Física e da Engenharia [1] tem despertado o interesse de aplicação desta técnica na solução de problemas matemáticos de interesse da Física de Reatores [2], quais sejam, a solução da equação de difusão de neutrons que descreve o comportamento destes no núcleo dos reatores [3-5] e na solução da equação de transporte linear que descreve o transporte de partículas neutras (fótons e neutrons) através de meios materiais de interesse no projeto de blindagens de reatores nucleares [6-10]. Este interesse se justifica pela necessidade do desenvolvimento de poderosos códigos computacionais que possam tratar de geometrias complexas e fornecer precisão numérica dos resultados e economia em tempo computacional. Em particular, o método dos elementos finitos tem sido extensivamente pesquisado na solução da equação de transporte com o objetivo de se desenvolver programas computacionais capazes de solucionar problemas em geometria tridimensional, os quais atualmente apenas permitem solução pelo método de Monte Carlo, que é reconhecidamente caro em termos de tempo computacional.

Este trabalho tem por objetivo o desenvolvimento de um programa computacional para solução da equação de transporte dependente da energia em meios materiais tridimensionais. A dependência energética será tratada pela técnica de multigrupos, enquanto que a dependência angular será aproximada por uma expansão em harmônicos esféricos e a dependência espacial será tratada pelo método de elementos finitos. O estágio atual de trabalho é tal que o desenvolvimento analítico encontra-se em sua fase final enquanto o desenvolvimento computacional encontra-se em fase inicial de programação e testes.

2. Equação de Transporte

Seja a equação de transporte em geometria tridimensional ($x-y-z$) e dependência energética discretizada. A técnica usual de multigrupo permite que se monte um algoritmo para solução da equação monoenergética e que o mesmo seja solucionado para os diversos grupos. Desta forma, considere a equação de transporte monoenergética, em geometria tridimensional dada abaixo:

$$\Omega \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, \Omega) + \sigma(\mathbf{r}, \Omega) \cdot \phi(\mathbf{r}, \Omega) = \int_{4\pi} \sigma_s(\mathbf{r}, \Omega') \cdot \phi(\mathbf{r}, \Omega' \rightarrow \Omega) d\Omega' + S(\mathbf{r}, \Omega) \quad (1)$$

Se o fluxo neutrônico, a fonte total e a seção de choque de espalhamento forem expandidos em harmônicos esféricos, ou seja,

$$\phi(\mathbf{r}, \Omega) = \sum_{l=0}^N (2l+1) \sum_{m=0}^1 P_l^m(\mu) \cdot [\Psi_{lm}(\mathbf{r}) \cdot \cos m\varphi + \Gamma_{lm}(\mathbf{r}) \cdot \sin m\varphi] \quad (2)$$

$$S(\mathbf{r}, \Omega) = \sum_{l=0}^N (2l+1) \sum_{m=0}^1 P_l^m(\mu) \cdot [S_{lm}(\mathbf{r}) \cdot \cos m\varphi + S'_{lm}(\mathbf{r}) \cdot \sin m\varphi] \quad (3)$$

$$\sigma_s(\mathbf{r}, \Omega) = \frac{1}{4\pi} \cdot \sum_{l=0}^L (2l+1) \cdot \sigma^l(\mathbf{r}) \cdot \left[P_l(\mu) \cdot P_l(\mu') + \right.$$

$$2 \sum_{m=1}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\mu) \cdot P_l^m(\mu') \cdot \cos m(\varphi - \varphi') \quad (4)$$

pode-se obter a seguinte igualdade, após conveniente manipulação algébrica:

$$\begin{aligned} & \{ 2 \cdot H(l-1) \cdot (l-m) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{l-1,m} + 2(1+m+1) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{l+1,m} + \\ & H(l-1) \cdot [H(m-1) + \delta_{l,m}] \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{l-1,m-1} - [H(m-1) + \delta_{l,m}] \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{l+1,m-1} + \\ & (1+m+2) \cdot (1+m+1) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{l+1,m+1} - (l-m) \cdot (l-m-1) \cdot H(l-2) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{l-1,m+1} - \\ & H(l-2) \cdot H(m-2) \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{l-1,m-1} + H(m-2) \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{l+1,m-1} + \\ & (1+m+2) \cdot (1+m+1) \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{l+1,m+1} - H(l-2) \cdot (l-m) \cdot (l-m-1) \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{l-1,m+1} \\ & + 2 \cdot H(L-1) \cdot (2l+1) \cdot \sigma^l \cdot \Psi_{l,m} \} \cdot \cos m\varphi + \\ & \{ 2 \cdot H(l-1) \cdot (l-m) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l-1,m} + 2(1+m+1) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l+1,m} + \\ & H(l-1) \cdot [H(m-1) + \delta_{l,m}] \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Psi_{l-1,m-1} - [H(m-1) + \delta_{l,m}] \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Psi_{l+1,m-1} \\ & - (1+m+2) \cdot (1+m+1) \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Psi_{l+1,m+1} + (l-m) \cdot (l-m-1) \cdot H(l-2) \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Psi_{l-1,m+1} \\ & + H(l-2) \cdot H(m-2) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l-1,m-1} - H(m-2) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l+1,m-1} + \\ & (1+m+2) \cdot (1+m+1) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l+1,m+1} - H(l-2) \cdot (l-m) \cdot (l-m-1) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l-1,m+1} \\ & + 2 \cdot H(L-1) \cdot (2l+1) \cdot \sigma^l \cdot \Gamma_{l,m} \} \cdot \sin m\varphi = \\ & = 2 \cdot (2l+1) \cdot \{ S_{l,m} \cdot \cos m\varphi + S'_{l,m} \cdot \sin m\varphi \} , \end{aligned} \quad (5)$$

onde Ψ_{lm} e Γ_{lm} são os momentos da expansão do fluxo;

S_{lm} e S'_{lm} são os momentos da fonte externa;

L é a ordem da expansão da seção de choque;

$$H(a) = \begin{cases} 0, & a < 0 \\ 1, & a \geq 0 \end{cases} ;$$

$$\sigma^l = \sigma_t - \sigma_s .$$

A equação acima é válida para

$$\begin{aligned} l &= 0, 1, 2, \dots, N \\ m &= 0, 1, \dots, l . \end{aligned}$$

Resumidamente, pode-se pensar a equação (5) como sendo

$$A_{l,m} \cos m\varphi + B_{l,m} \sin m\varphi = 0 , \quad (6)$$

e, desde que $\sin m\varphi$ e $\cos m\varphi$ são linearmente independentes,

$$A_{lm} = 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} l = 0, 1, 2, \dots, N \\ m = 0, 1, \dots, l \end{array} \right. , \quad (7)$$

$$B_{lm} = 0 \quad \left\{ \begin{array}{l} l = 0, 1, 2, \dots, N \\ m = 1, 2, \dots, l \end{array} \right. , \quad (8)$$

o que resulta nas equações para os momentos $\Psi(r)$ e $\Gamma(r)$:

$$\begin{aligned} & 2 \cdot H(l-1) \cdot (l-m) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{l-1,m} + 2(l+m+1) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{l+1,m} + \\ & H(l-1) \cdot [H(m-1) + \delta_{l,m}] \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{l-1,m-1} - [H(m-1) + \delta_{l,m}] \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{l+1,m-1} + \\ & (l+m+2) \cdot (l+m+1) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{l+1,m+1} - (l-m) \cdot (l-m-1) \cdot H(l-2) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{l-1,m+1} \\ & - H(l-2) \cdot H(m-2) \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{l-1,m+1} + H(m-2) \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{l+1,m-1} + \\ & (l+m+2) \cdot (l+m+1) \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{l+1,m+1} - H(l-2) \cdot (l-m) \cdot (l-m-1) \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{l-1,m+1} \\ & + 2 \cdot H(L-1) \cdot (2l+1) \cdot \sigma^1 \cdot \Psi_{l,m} = 2 \cdot (2l+1) \cdot S_{lm} \end{aligned} \quad (9)$$

e

$$\begin{aligned} & 2 \cdot H(l-1) \cdot (l-m) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l-1,m} + 2(l+m+1) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l+1,m} + \\ & H(l-1) \cdot [H(m-1) + \delta_{l,m}] \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Psi_{l-1,m-1} - [H(m-1) + \delta_{l,m}] \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Psi_{l+1,m-1} - \\ & (l+m+2) \cdot (l+m+1) \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Psi_{l+1,m+1} + (l-m) \cdot (l-m-1) \cdot H(l-2) \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Psi_{l-1,m+1} \\ & + H(l-2) \cdot H(m-2) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l-1,m-1} - H(m-2) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l+1,m-1} + \\ & (l+m+2) \cdot (l+m+1) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l+1,m+1} - H(l-2) \cdot (l-m) \cdot (l-m-1) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l-1,m+1} \\ & + 2 \cdot H(L-1) \cdot (2l+1) \cdot \sigma^1 \cdot \Gamma_{l,m} = 2 \cdot (2l+1) \cdot S_{lm} \end{aligned} \quad (10)$$

3. Equação Tipo Difusão *

As equações (9) e (10) obtidas na seção anterior representam um conjunto de equações acopladas para os momentos resultantes da expansão do fluxo em harmônicos esféricos. Para solucionar estas equações e, conseqüentemente, a equação de transporte, o método proposto é a redução deste conjunto acoplado de equações diferenciais de primeira ordem para um conjunto acoplado de equações diferenciais de segunda ordem, o que reduz o número de equações a serem resolvidas iterativamente.

Para exemplificar o método, considere a aproximação P-3. Neste caso, desesseis momentos surgem da expansão do fluxo (Ψ_{00} , Ψ_{10} , Ψ_{11} , Ψ_{20} , Ψ_{21} , Ψ_{22} , Ψ_{30} , Ψ_{31} , Ψ_{32} , Ψ_{33} , Γ_{11} , Γ_{21} , Γ_{22} , Γ_{31} , Γ_{32} , Γ_{33}) e as equações ficam:

$$l=0, m=0 \quad \frac{\partial}{\partial z} \Psi_{10} + \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{11} + \frac{\partial}{\partial y} \Psi_{11} + \sigma^0 \cdot \Psi_{00} = S_{00}, \quad (11)$$

$$l=1, m=0 \quad \frac{\partial}{\partial z} \Psi_{00} + 2 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \Psi_{20} + \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{21} + 3 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} + 3 \cdot \sigma^0 \cdot \Psi_{10} = 3 \cdot S_{10}, \quad (12)$$

$$l=1, m=1 \quad 3 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \Psi_{21} + \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{00} - \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{20} + 6 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{22} + 6 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} + 3 \cdot \sigma^1 \cdot \Psi_{11} = 3 \cdot S_{11}, \quad (13)$$

$$3 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \Gamma_{21} + \frac{\partial}{\partial y} \Psi_{00} - \frac{\partial}{\partial y} \Psi_{20} - 6 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Psi_{22} + 6 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} + 3 \cdot \sigma^1 \cdot \Gamma_{11} = 3 \cdot S_{11}, \quad (14)$$

e assim sucessivamente para os demais doses momentos da expansão [11].

Isolando-se Ψ_{10} na equação (12), Ψ_{11} na (13), Γ_{11} na (14) e substituindo em (11), obtém-se:

$$-\frac{1}{3} \cdot \nabla \cdot \left[\left[\frac{1}{\sigma_1} \right] \cdot \nabla \Psi_{00} \right] + \sigma^0 \cdot \Psi_{00} = S_{00}^0. \quad (15)$$

De modo semelhante, as demais equações tipo difusão podem ser obtidas:

$$\begin{aligned} & -\frac{4}{3} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial z} \Psi_{20} \right] - \frac{9}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial z} \Psi_{20} \right] - \frac{3}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{20} \right] \\ & - \frac{1}{6} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{20} \right] - \frac{3}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Psi_{20} \right] - \frac{1}{6} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Psi_{20} \right] \\ & + 5 \cdot \sigma^2 \cdot \Psi_{20} = S_{20}^0, \end{aligned} \quad (16)$$

$$\begin{aligned} & -\frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{2}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial z} \Psi_{21} \right] - \frac{16}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial z} \Psi_{21} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{21} \right] - \\ & \frac{13}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{21} \right] - \frac{10}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Psi_{21} \right] + \\ & 10 \cdot \sigma^2 \cdot \Psi_{21} = S_{21}^0, \end{aligned} \quad (17)$$

$$\begin{aligned} & -\frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{2}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial z} \Gamma_{21} \right] - \frac{16}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[\frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial z} \Gamma_{21} \right] - \frac{10}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} \right] - \\ & \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} \right] - \frac{13}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} \right] + \end{aligned}$$

$$10 \cdot \sigma^2 \cdot \Psi_{21} = -S_{11}^{\dagger} \quad (18)$$

$$\begin{aligned} & - \frac{10}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{22} \right] - 2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{22} \right] - \frac{16}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{22} \right] - \\ & \quad \frac{16}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Psi_{22} \right] - 2 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Psi_{22} \right] + \\ & 10 \cdot \sigma^2 \cdot \Psi_{22} = S_{12}^{\dagger} \quad (19) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} & - \frac{10}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} \right] - 2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} \right] - \frac{16}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} \right] - \\ & \quad \frac{16}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} \right] - 2 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} \right] + \\ & 10 \cdot \sigma^2 \cdot \Gamma_{22} = S_{13}^{\dagger} \quad (20) \end{aligned}$$

Nestas equações, todos os momentos que diferem do especificado à esquerda do sinal de igualdade, foram incorporados no termo fonte. Assim sendo, o termo fonte pode ser explicitado por:

$$\begin{aligned} S_{00}^{\dagger} = & S_{00} - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{S_{10}}{\sigma_1} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{S_{11}}{\sigma_1} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{S_{11}}{\sigma_1} \right] - \\ & \frac{1}{6} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{20} \right] - \frac{1}{6} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Psi_{20} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{20} \right] + \\ & \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{21} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{21} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} \right] - \\ & \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} \right] - 2 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Psi_{22} \right] + 2 \cdot \frac{1}{6} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Psi_{22} \right] \\ & + 2 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[\frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} \right] + 2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[\frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} \right] \quad (21) \end{aligned}$$

e assim sucessivamente para os demais termos fonte. Note que, mesmo no termo fonte, apenas os seis momentos destacados nas equações (15)–(20) estão presentes.

3.1 Estratégia de Cálculo

A estratégia proposta para solucionar estas equações acopladas pode ser resumida nos seguintes passos:

1. estima-se o valor inicial dos momentos;
2. através de um algoritmo em elementos finitos soluciona-se a primeira equação dos momentos, levando em conta a estimativa inicial dos mesmos;
3. com o resultado obtido para este momento, calcula-se o termo fonte para a segunda equação;
4. repete-se o processo até que todos os momentos estejam calculados;
5. compara-se cada um dos momentos à estimativa anterior e verifica-se a convergência.

- 5.a convergiu → este grupo de energia está solucionado;
 5.b não convergiu → os momentos são recalculados.

As equações dos momentos (15) a (20) são equações diferenciais de segunda ordem que, considerando o termo fonte conhecido para cada uma das mesmas, podem ser solucionadas pela técnica usual de elementos finitos. Um detalhe importante a salientar é que as mesmas são muito semelhantes à equação de difusão, sendo denominadas neste trabalho por equações "tipo difusão". O passo seguinte é montar um algoritmo que solucione este tipo de equação. Para tanto, considere a equação tipo difusão genérica dada abaixo:

$$\frac{\partial}{\partial x} \left[a_1 \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[a_2 \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[a_3 \cdot \frac{\partial \phi}{\partial z} \right] + a_4 \cdot \phi = S, \quad (22)$$

onde ϕ é um dos momento da expansão do fluxo em harmônicos esféricos; S é a fonte, que inclui as fontes externas e todos os momentos da expansão, menos o momento ϕ ; e a_1, \dots, a_4 são funções relacionadas com a seção de choque.

Aproximando o momento por um conjunto de funções base, subdividindo o domínio em NE elementos tetraédricos, aplicando a técnica de Resíduos Ponderados à equação (22) e manipulando a equação resultante convenientemente [12,13,14], chega-se a:

$$\begin{aligned} \int_V \nabla \cdot (W_1 \cdot \tilde{\Delta}) d\Omega + \int_V a_4 \cdot \phi \cdot W_1 d\Omega + \int_V \tilde{\Delta} \cdot (\nabla W_1) d\Omega = \\ = \int_V S \cdot W_1 d\Omega, \end{aligned} \quad (23)$$

onde

$$\tilde{\Delta} = \left[a_1 \cdot \frac{\partial \phi}{\partial x}, a_2 \cdot \frac{\partial \phi}{\partial y}, a_3 \cdot \frac{\partial \phi}{\partial z} \right]$$

Se as condições de contorno do problema dadas forem por [15,16,17]:

- i) fluxo contínuo nas interfaces;
- ii) $\underline{n} \cdot \nabla \Psi_{00} = -3 \cdot \lambda \cdot \sigma_0 \cdot \Psi_{00}$, λ arbitrário e
 $\Psi_{1m} = 0$, $l \neq 0$ ou $m \neq 0$,
 para o caso de vácuo;
- iii) $\Psi_{1m} = 0$, $(l+m)$ par
 $\underline{n} \cdot \nabla \Psi_{1m} = 0$, $(l+m)$ ímpar,
 para o caso de reflexão;

o sistema matricial resultante da equação (23), para os diversos valores de l será então:

$$\underline{K} \cdot \underline{\phi} = \underline{S}, \quad (24)$$

onde a matriz dos coeficientes pode ser obtida por

$$\begin{aligned} K_{1m}^* = \frac{a_4^* (1 + \delta_{1m}) \cdot \Delta^*}{120} + \frac{(a_1^* \alpha_1^* \alpha_m^* + a_2^* \beta_1^* \beta_m^* + a_3^* \gamma_1^* \gamma_m^*) \cdot \Delta^*}{6} + \\ + \zeta_1 \frac{[(a_2^* - a_3^*) n_y \cdot \beta_m^* + (a_1^* - a_3^*) n_x \cdot \alpha_m^*] \cdot \Theta^*}{6} + \zeta_2 \frac{(1 + \delta_{1m}) \cdot \Theta^* \cdot \lambda \cdot \sigma_0^*}{24 \cdot \sigma_1} \end{aligned} \quad (25)$$

e ainda

$$\alpha_i = \frac{[y_j(z_h - z_k) + y_k(z_i - z_h) + y_h(z_k - z_i)]}{\Delta^*},$$

$$\beta_i = \frac{[x_j(z_k - z_h) + x_k(z_h - z_i) + x_h(z_i - z_k)]}{\Delta^*},$$

Δ^* = duas vezes o volume do elemento tetraédrico definido pelos nós i, j, k, h numerados de forma positiva [13],

\mathcal{A}^* = duas vezes a área do elemento que pertence ao contorno que está sendo considerado ,

$\zeta_r = 1$ para os elementos cuja condição de contorno seja do tipo reflexão e a ordem do momento seja par ;
 $= 0$ nos demais casos ;

$\zeta_v = 1$ para os elementos cuja condição de contorno seja do tipo reflexão e o momento seja $(0,0)$;
 $= 0$ nos demais casos .

Para o termo fonte, um tratamento matemático semelhante deve ser realizado. Este tratamento encontra-se em desenvolvimento. No caso mais simples, pode-se considerar o termo fonte independente dos momentos (é uma boa aproximação para P1 e para a equação de difusão) e o resultado obtido será:

$$S_i^* = \frac{S_{00}^* \cdot \Delta^*}{24} \quad (26)$$

4. O Programa ETEFEH

Para solução destas equações, está sendo desenvolvido o programa ETEFEH (Equação de Transporte, Elementos Finitos, Esféricos Harmônicos) em linguagem FORTRAN-VS para computadores de grande porte. Para simplificar a entrada de dados, um pré-processador (PREPROC) foi elaborado em linguagem PASCAL e é disponível para micro-computador compatível com IBM-PC.

4.1 PREPROC

Este pré-processador foi desenvolvido com o objetivo de representar uma interface amigável para o usuário na entrada de dados. O mesmo foi realizado tomando por base o pré-processador do código ANSYS [18] (que não pode ser utilizado diretamente pela incompatibilidade de informações geradas pelo pré-processador e requeridas pelo programa ETEFEH), bem como as informações de entrada e saída de um pré-processador desenvolvido por Wood [19,20]. Para demonstrar a versatilidade do mesmo, bem como sua potencialidade gráfica, a figura 1 representa um oitavo de esfera modelado com 162 elementos tetraédricos.

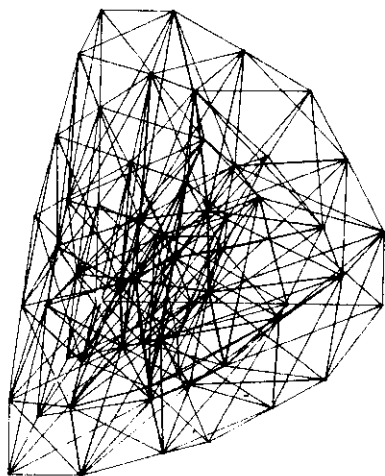


Figura 1. Uma esfera modelada por 162 elementos tetraédricos

4.2 ETEFEH

A estratégia de cálculo do programa ETEFEH pode ser resumida em seis passos:

- 1- Partindo de cada elemento, montam-se as matrizes dos coeficientes para os diversos momentos utilizando a topologia do sistema;
- 2- Aplicam-se as condições de contorno, alterando a matriz dos coeficientes;
- 3- Inverte-se a matriz para cada momento da expansão e armazenam-se as inversas em memória secundária;
- 4- calcula-se o novo termo-fonte levando em conta a iteração anterior do fluxo (caso o termo fonte dependa do fluxo);
- 5- calculam-se os novos momentos, com as matrizes inversas correspondentes;
- 6- verifica se todos os momentos convergiram:
 - 6a. sim - encerra e imprime os resultados;
 - 6b. não - seleciona os momentos que não convergiram e retorna a 4-.

Um primeiro teste que pode ser realizado com o programa refere-se à sua aproximação de difusão. Para tanto, substitui-se na equação (22) os valores convenientes das funções a_i . O problema teste proposto é um cubo com duas regiões em que a seção de choque é constante e vale 1 cm^{-1} . A região interna, um cubo de lado 3 cm, apresenta fonte unitária enquanto que a região externa, um cubo de 6 cm, não possui fonte (vide figura 2). O mesmo problema também foi solucionado pelo código CITATION e os resultados comparativos são apresentados na figura 3. Para o código CITATION tem-se $12 \times 12 \times 12$ intervalos, enquanto que para o programa ETEFEH tem-se $6 \times 6 \times 6$ intervalos. Os cortes apresentados na figura são realizados sobre a diagonal principal do cubo ($x=y=z$). Este corte foi selecionado uma vez que o código CITATION apresenta seus resultados no centro do intervalo, ao passo que o programa ETEFEH apresenta seus resultados nos nós; desta forma, sobre a linha escolhida tem-se resultados dos dois programas, simplificando a comparação.

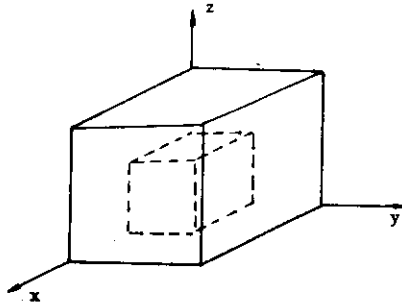


Figura 2. Domínio do problema 1

No primeiro caso, tem-se reflexão em todas as faces do cubo. Para o segundo caso, três faces são refletidas e três faces apresentam contorno tipo vácuo.

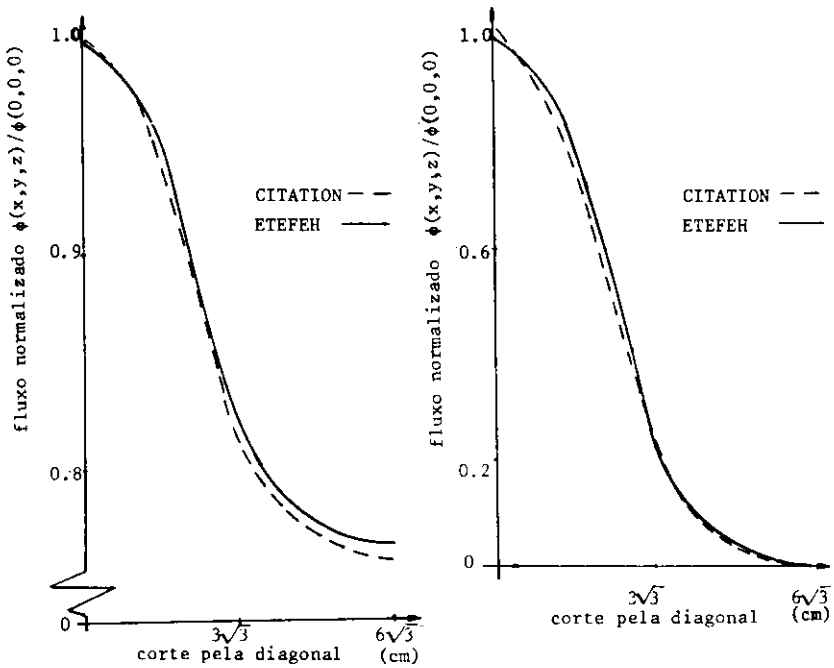


Figura 3. Cortes do fluxo para o problema 1, casos 1 e 2

Salienta-se que os resultados apresentados acima referem-se a um primeiro teste efetuado sobre o programa, não servindo como base para testar o método como um todo, mas apenas sua aproximação mais simples, qual seja, a de difusão.

5. Conclusões

Os resultados obtidos até o presente momento são muito animadores. Do trabalho restante, qual seja, conclusão do tratamento do termo-fonte e sua incorporação ao programa, bem como o desenvolvimento de uma rotina para recalcular os momentos originais da expansão (através das equações (11-14)), a única dúvida se encontra no tempo que será necessário para que o termo fonte venha a convergir, sendo que algum tipo de aceleração talvez se faça necessário com o intuito de aprimorar o processo.

Em trabalho futuro, pretende-se incluir o tratamento energético e também outras ordens de aproximação (o atual trabalho restringe-se às aproximações P1-P3). Um estudo sobre outros tipos de elementos, além do tetraédrico, também poderá ser incorporado ao programa, sendo que estes poderão inclusive não se restringir à aproximação linear.

Agradecimentos

Um dos autores, Almir Fernandes, gostaria de agradecer à Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pelo apoio financeiro, sem o qual não teria sido possível o desenvolvimento do presente trabalho (processo número 86/2668-0).

Referências

- [1] O.C.Zienkiewicz, *The Finite Element Method in Engineering Science*, McGraw-Hill, London, (1981).
- [2] Proceedings of the International Topical Meeting on Advances in Mathematical Methods for the Solution of Nuclear Engineering Problems, München, (1981).
- [3] C.M.Kang e M.F.Hansen, *Nucl.Sci.Eng.* 47, 456-495, (1973)
- [4] S.Ono e J.R.Maiorino, "Aplicação do Método dos Elementos Finitos na Solução da Equação de Difusão em Estado Estacionário", *Anais do IV Encontro Nacional de Física de Reatores*, Itaipava, 3-5 novembro 1983, Vol.1,ST1-A, CENTRECON - Itaipava, RJ.
- [5] J.R.Maiorino e W.J.Vieira, "Aplicação do Método dos Elementos Finitos na solução da Equação de Transporte", *Anais do V Encontro Nacional de Física de Reatores*, 10-12 abril 1985, Vol.1 ST5 A, Comissão Nacional de Energia Nuclear, Rio de Janeiro, (1985).
- [6] J.Wood e M.M.R.Williams, *Progr.Nucl.Energy* 4, 21-40, (1984).
- [7] J.Wood, *Ann.Nucl.Energy* 12, 217-231, (1985).
- [8] R.T.Ackroyd, *Ann.Nucl.Energy* 5, 75-94, (1978).
- [9] R.T.Ackroyd, *Ann.Nucl.Energy* 6, 563-577, (1979).
- [10] R.T.Ackroyd, A.K.Ziver e J.H.Goddard, *Ann.Nucl.Energy* 7, 335-349, (1980).
- [11] A.Fernandes, Primeiro Relatório de Mestrado FAPESP, processo número 86/2668-0 (1987).
- [12] A.Fernandes, Terceiro Relatório de Mestrado FAPESP, processo número 86/2668-0 (1988).
- [13] K.H.Huebner e E.A.Thronton, *The Finite Element Method for Engineers*, 2nd edition, (1982).
- [14] O.C.Zienkiewicz e K.Morgan, *Finite Element and Approximation*, John Willey &

- Sons, (1982).
- [15] J.K.Fletcher, *TRG Report*, (1973).
 - [16] J.K.Fletcher, *TRG report*, (1976).
 - [17] J.K.Fletcher, *Nuc.Sci.Eng.* **84**, 33–46, (1983).
 - [18] ANSYS COMMAND REFERENCE GUIDE, rev. 4.2, Swanson Analysis Systems Inc. USA, (1985).
 - [19] C.R.E.Oliveira, *Prog.Nucl.Energy* **18**, 227–236, (1986).
 - [20] J.Wood e M.M.R.Williams, *Prog.Nucl.Energy* **14**, 21–40 (1984).