

BR 92 30220  
INIS-BR - - 2882

**INSTITUTO DE PESQUISAS ENERGÉTICAS E NUCLEARES  
AUTARQUIA ASSOCIADA À UNIVERSIDADE DE SÃO PAULO**

**ESTUDO DE UM MÉTODO PARA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE  
MONOENERGÉTICA E EM GEOMETRIA TRIDIMENSIONAL  
PELO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS E PELA EXPANSÃO EM  
HARMÔNICOS ESFÉRICOS**

**ALMIR FERNANDES**

**Disertação apresentada ao Instituto de  
Pesquisas Energéticas e Nucleares como  
parte dos requisitos para obtenção do grau  
de Mestre em Tecnologia Nuclear.**

**Orientador: *Dr. José Rubens Maiorino.***

**SÃO PAULO**

**1991**

---

"Que nunca mais há de voltar,  
eis o que faz tão doce a vida"

Emily Dickinson

A meus pais, Emilio e Elide,  
a meus irmãos, Ana e André.  
E também a Ti.

Obrigado por vocês existirem.

## **Agradecimentos**

À Coordenadoria para Projetos Especiais (COPESP) do Ministério da Marinha, na pessoa de seu Presidente, Dr. Othon Luiz Pinheiro da Silva, pelo fornecimento das instalações, equipamento e apoio financeiro.

Ao Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares da Comissão Nacional de Energia Nuclear (IPEN/CNEN-SP) na pessoa de seu Superintendente, Dr. Spero Penha Morato, pelo fornecimento das instalações e pelo curso de Pós-Graduação oferecido.

À Fundação de Amparo à Pesquisa do Estado de São Paulo (FAPESP) pela bolsa de estudos concedida que permitiu a realização deste trabalho. (Processo número 86/2668-0)

À Jaako Poyre Engenharia, na pessoa do Dr. Roberto Scarciofolo, pelo apoio financeiro durante a realização de parte deste trabalho.

Ao Prof. Dr. José Rubens Maiorino, meu orientador, pelo difícil trabalho de orientação, no qual, julgo, tanto aprendemos. Muito obrigado por todos os incentivos e pela dedicação.

Ao Dr. Gilberto Gomes de Andrade, Chefe do Departamento de Sistemas Nucleares da COPESP, pelo suporte concedido.

Ao Prof. Dr. José Messias de Oliveira Neto, Chefe da Divisão de Engenharia de Segurança Nuclear da COPESP, ao Prof. Dr. Antonio Teixeira e Silva, Chefe da

Seção de Análise de Acidentes da COPESP, ao M.Sc. Arlindo Gilson Mendonça, Chefe da Seção de Blindagem da COPESP, aos companheiros todos das duas divisões em que tive o praser de trabalhar, muito em particular a Graciete, Margareth, Gaiandê, Thadeu, Adriano, Roberto Longo e João Moreira, e à nossa amiga e secretária Sandra, meu sincero muito obrigado.

Ao Prof. Dr. Roberto D. M. Garcia pelas sugestões, comentários e pela participação como membro da banca examinadora da defesa da dissertação.

Ao Prof. Dr. Daniel K. S. Ting pelo auxílio inicial com o método dos elementos finitos, pelas sugestões, comentários e pela participação como membro da banca examinadora da defesa da dissertação.

Aos amigos Gelson, Lúcia, Luiz, Edilson e Maria do Carmo pela ajuda no desenvolvimento computacional.

Aos companheiros maiores que sempre estiveram comigo nos principais momentos deste mestrado, que iniciaram como colegas e terminam como amigos: Alfredo Yuuitiro Abe, Antonio Belchior Junior, Fernando Ramos Martins, Marcos Roberto Rossini e Miriam Medeiros da Silva. Aos colegas do mestrado que vieram antes e que sempre nos ajudaram, em particular, a Paulo Sérgio Brasko Ferreira e Gilberto Alves dos Santos. Aos colegas do mestrado que vieram na nossa sequência e com os quais também aprendemos muito, em particular a Maurício Genta Maragni e Marco Antonio Rodrigues. A todos vocês, meu muito obrigado.

A todos enfim, que direta ou indiretamente, contribuíram para a realização deste trabalho e cujos nomes injustamente omito.

**ESTUDO DE UM MÉTODO PARA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE  
MONOENERGÉTICA E EM GEOMETRIA TRIDIMENSIONAL  
PELO MÉTODO DE ELEMENTOS FINITOS E PELA EXPANSÃO EM  
HARMÔNICOS ESFÉRICOS**

**ALMIR FERNANDES**

**RESUMO**

Este trabalho apresenta um método para solução da equação de transporte de nêutrons monoenergética, em geometria tridimensional, sendo baseado no trabalho originalmente sugerido por J.K. Fletcher [42, 43]. A dependência angular do fluxo é aproximada por funções associadas de Legendre e o método dos elementos finitos é aplicado às componente espaciais. Quando o fluxo angular, a seção de choque de espalhamento e a fonte externa são expandidos em funções associadas de Legendre, a equação de transporte de nêutrons é reduzida a um conjunto acoplado de equações diferenciais de segunda ordem, conhecidas neste trabalho por equações "tipo difusão". Estas equações são solucionadas de forma iterativa pelo método dos elementos finitos para os momentos da expansão.

**STUDY OF A METHOD TO SOLVE THE ONE SPEED, THREE DIMENSIONAL  
TRANSPORT EQUATION USING THE FINITE ELEMENT METHOD  
AND THE ASSOCIATED LEGENDRE FUNCTION**

**ALMIR FERNANDES**

**ABSTRACT**

This work presents a method to solve the three dimensional neutron transport equation, and it is based on the original work suggested by J.K.Fletcher [42, 43]. The angular dependence of the flux is approximated by associated Legendre functions and the finite element method is applied to the space components. When the angular flux, the scattering cross section and the neutrons source are expanded in associated Legendre functions, the first order neutron transport equation is reduced to a coupled set of second order "diffusion like" equations. These equations are solved in an iterative way by the finite element method to the moments.

## LISTA DE FIGURAS

|              |                                       | Pág. |
|--------------|---------------------------------------|------|
| Figura 5.1   | Disposição dos nós no tetraedro       | 52   |
| Figura 5.2   | Descrição do programa                 | 64   |
| Figura 6.1   | Modelagem do problema teste           | 67   |
| Figura 6.2   | Convergência do momento $\psi_{00}$   | 67   |
| Figura 6.3   | Convergência do momento $\psi_{20}$   | 68   |
| Figura 6.4   | Fluxo para o problema teste - corte 1 | 69   |
| Figura 6.5   | Fluxo para o problema teste - corte 2 | 69   |
| Figura A1.1  | Tela 1                                | 89   |
| Figura A1.2  | Tela 2                                | 90   |
| Figura A1.3  | Tela 3                                | 91   |
| Figura A1.4  | Tela 4                                | 92   |
| Figura A1.5  | Tela 5                                | 93   |
| Figura A1.6  | Tela 6                                | 94   |
| Figura A1.7  | Tela 1                                | 96   |
| Figura A1.8  | Tela 2/7                              | 97   |
| Figura A1.9  | Tela 3/8                              | 98   |
| Figura A1.10 | Tela 4/9                              | 99   |
| Figura A1.11 | Tela 5/10                             | 100  |
| Figura A1.12 | Tela 6/11                             | 101  |
| Figura A1.13 | Tela 7/12                             | 102  |
| Figura A1.14 | Tela 8/13                             | 103  |
| Figura A1.15 | Tela 9/14                             | 104  |
| Figura A1.16 | Domínio do problema 1                 | 105  |



|               |  |     |
|---------------|--|-----|
| Figura A1.17a | Fluxo do problema 1 – corte 1                                    | 106 |
| Figura A1.17b | Fluxo do problema 1 – corte 2                                    | 106 |
| Figura A1.18  | Domínio do problema 2  | 107 |
| Figura A1.19  | Domínio do problema 3  | 109 |
| Figura A1.20  | Domínio do problema 4  | 111 |
| Figura A2.1   | Cubo   | 114 |
| Figura A2.2   | Cubo subdividido em seis tetraedros                              | 114 |
| Figura A2.3   | Esfera subdividida em 27 hexaedros                               | 116 |
| Figura A2.4   | Esfera subdividida em 162 tetraedros                             | 116 |
| Figura A2.5   | Toro subdividido em 384 hexaedros                                | 117 |
| Figura A2.6   | Toro com o contorno destacado                                    | 117 |
| Figura A2.7   | Cubo subdividido em 216 hexaedros                                | 118 |
| Figura A2.8   | Cilindro com o contorno destacado                                | 118 |
| Figura A3.1   | Matriz quadrada 7x7 com largura de banda 3                       | 121 |
| Figura A3.2   | Matriz reduzida 5x7 equivalente à matriz anterior                | 121 |
| Figura A3.3   | Domínio bidimensional numerada de modo a minimizar banda         | 123 |
| Figura A3.4a  | Numeração dos nós a partir da teoria dos grafos – primeira etapa | 123 |
| Figura A3.4b  | Numeração dos nós a partir da teoria dos grafos – segunda etapa  | 124 |
| Figura A6.1   | Domínio do problema 1  | 153 |
| Figura A6.2   | Fluxo para o problema 1  | 156 |
| Figura A6.3   | Domínio do problema 2  | 157 |
| Figura A6.4   | Fluxo para o problema 2  | 161 |

|              |                                   |     |
|--------------|-----------------------------------|-----|
| Figura A6.5  | Domínio do problema 3             | 162 |
| Figura A6.6  | Modelagem do problema 3           | 163 |
| Figura A6.7  | Fluxo para o problema 3 - corte 1 | 164 |
| Figura A6.8  | Fluxo para o problema 3 - corte 2 | 165 |
| Figura A6.9  | Fluxo para o problema 3 - corte 3 | 165 |
| Figura A6.10 | Modelagem do problema 4           | 166 |
| Figura A6.11 | Fluxo para o problema 4 - caso 1  | 167 |
| Figura A6.12 | Fluxo para o problema 4 - caso 2  | 168 |

## LISTA DE TABELAS

|             |  | Pág. |
|-------------|--|------|
| Tabela 5.1  | Descrição das rotinas do programa ETEFER | 65   |
| Tabela A1.1 | Resultados do problema 2                 | 108  |
| Tabela A1.2 | Dados do problema 3                      | 110  |
| Tabela A1.3 | Fator de multiplicação do problema 3     | 110  |
| Tabela A1.4 | Dados do problema 4                      | 112  |
| Tabela A1.5 | Fator de multiplicação do problema 4     | 112  |
| Tabela A6.1 | Resultados para o problema 1             | 155  |
| Tabela A6.2 | Resultados para o problema 2             | 160  |
| Tabela A6.3 | Dados do problema 3                      | 163  |

## SUMÁRIO

|  | Pág. |
|--|------|
| RESUMO   | v    |
| ABSTRACT   | vi   |
| LISTA DE FIGURAS   | vii  |
| LISTA DE TABELAS   | x    |
| CAPÍTULO 1 INTRODUÇÃO  | 1    |
| CAPÍTULO 2 TEORIA DE TRANSPORTE – MÉTODOS DE SOLUÇÃO<br>E REVISÃO DA LITERATURA                              | 5    |
| 2.1 Equação de transporte  | 5    |
| 2.2 Soluções analíticas  | 7    |
| 2.3 Soluções numéricas   | 9    |
| 2.3.1 Equação de transporte integral   | 9    |
| 2.3.2 Métodos de superfície  | 11   |
| 2.3.3 Equação de transporte integro-diferencial  | 12   |
| 2.3.3.1 Ordenadas discretas  | 13   |
| 2.3.3.2 Expansão em harmônicos esféricos   | 13   |
| 2.3.3.3 Método dos elementos finitos   | 14   |
| CAPÍTULO 3 MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS  | 18   |
| CAPÍTULO 4 DESENVOLVIMENTO ANALÍTICO RESULTANTE DA<br>EXPANSÃO DO FLUXO EM FUNÇÕES ASSOCIADAS<br>DE LEGENDRE | 24   |
| 4.1 Equação "tipo difusão"   | 30   |
| CAPÍTULO 5 MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS APLICADO<br>ÀS EQUAÇÕES "TIPO DIFUSÃO"                               | 48   |
| 5.1 Tratamento das condições de contorno   | 55   |

|                                 |   |     |
|---------------------------------|---|-----|
| 5.2                             | Tratamento do termo fonte   | 58  |
| 5.3                             | Programa ETEFEH   | 63  |
| CAPÍTULO 6 RESULTADOS NUMÉRICOS |   | 66  |
| BIBLIOGRAFIA                    |   | 73  |
| APÊNDICE 1                      | EDEF - UM PROGRAMA PARA SOLUCIONAR A<br>EQUAÇÃO DE DIFUSÃO EM GEOMETRIA X-Y PARA<br>MICROCOMPUTADOR | 83  |
| APÊNDICE 2                      | PRÉ-PROCESSADOR   | 113 |
| APÊNDICE 3                      | TRATAMENTO BANDEADO   | 120 |
| APÊNDICE 4                      | PROGRAMA ETEFEH - DADOS DE ENTRADA  | 125 |
| APÊNDICE 5                      | EXPANSÃO DO FLUXO ATÉ QUINTA ORDEM  | 129 |
| APÊNDICE 6                      | CONDIÇÃO DE CONTORNO DE REFLEXÃO  | 148 |

## CAPÍTULO 1

### INTRODUÇÃO

"Teoria de Transporte" é o nome geralmente atribuído à descrição matemática do transporte de partículas através de um meio qualquer. As origens desta teoria datam de 1872 quando Boltzmann deduziu um conjunto acoplado de equações integro-diferenciais que descrevem a evolução da função distribuição de velocidades das partículas de um gás no espaço-tempo [1].

As equações desenvolvidas originalmente por Boltzmann são não-lineares. Entretanto, para partículas não carregadas, hipóteses baseadas na física do problema tornam possível a redução das equações acopladas não-lineares a apenas uma equação integro-diferencial linear descrevendo a função distribuição de partículas [2]. Dentre estas hipóteses pode-se destacar:

- desprezar colisões entre partículas idênticas;
- admitir a densidade das partículas muito menor que a densidade do meio;
- considerar apenas colisões binárias;
- admitir que não haja correlação entre as posições de duas partículas que colidem (o meio é suposto amorfo);
- ausência de forças externas.

Estas hipóteses são adequadas para a descrição de partículas não carregadas tais como nêutrons e fótons, bem como para o movimento de moléculas em meios rarefeitos. Desta forma, a equação de Boltzmann linearizada é a equação básica nos campos da dinâmica dos gases rarefeitos, da propagação do som em gases, na teoria de transporte de nêutrons

e de radiação gama e ainda na transferência de luz e calor por radiação.

As mais antigas aplicações se deram no campo da transferência radiativa, na descrição da distribuição de radiação emitida por estrelas e na distribuição de radiação em atmosferas planetárias. Destes trabalhos, destacam-se os realizados por Milne [3], Ambarsumian [4] e Chandrasekhar [5, 6]. O clássico livro de Chandrasekhar [7] resume os princípios e aplicações destes métodos aplicados à astrofísica.

Quando da descoberta do nêutron, dos mecanismos de fissão e, conseqüentemente, dos reatores de fissão controlada, houve a generalização da Teoria de Transporte para o estudo da distribuição neutrônica em reatores. A importância deste estudo está no fato de que o conhecimento da distribuição e o movimento dos nêutrons dentro do reator é de máxima importância para o projeto e desenvolvimento destes.

O objetivo deste trabalho é estudar um método para solução da equação de transporte linear em três dimensões e em um grupo de energia. A dependência angular será tratada por uma expansão em harmônicos esféricos enquanto que a dependência espacial será tratada pelo método dos elementos finitos. Este trabalho representa um passo inicial na busca de um programa (ou código) para solução da equação de transporte dependente da energia em geometria tridimensional.

Neste primeiro capítulo, é apresentada uma breve introdução à teoria de transporte e são especificados os objetivos do trabalho. No segundo capítulo, apresenta-se um resumo sobre teoria de transporte com os aspectos característicos dos principais métodos de solução. Já no final deste capítulo o método dos elementos finitos é introduzido, como uma das opções para solucionar numericamente a equação de transporte. No terceiro

capítulo é apresentado o método dos elementos finitos, sem que haja particularização ao tipo de equação solucionada. No quarto capítulo, o desenvolvimento algébrico decorrente da expansão do fluxo em funções associadas de Legendre é apresentado, resultando nas equações diferenciais parciais, semelhantes à equação de difusão (e, por isso mesmo, conhecidas neste trabalho por equações "tipo difusão"), às quais será aplicado o método dos elementos finitos. No quinto capítulo, o método dos elementos finitos é aplicado às equações algébricas desenvolvidas no capítulo anterior, resultando no algoritmo computacional e, conseqüentemente, no programa ETEFEH (Equação de Transporte, Elementos Finitos Esféricos Harmônicos). No sexto capítulo, é apresentado o teste numérico a que o programa foi submetido, e no sétimo capítulo as conclusões finais e sugestões para trabalhos futuros.

Como decorrência do desenvolvimento desta dissertação, paralelamente foi elaborado o programa EDEF (Equação de Difusão, Elementos Finitos) para microcomputadores compatíveis com IBM-PC, que soluciona a equação de difusão em geometria bidimensional ( $x-y$ ) e em dois grupos de energia. Este trabalho é apresentado no Apêndice 1. Ainda como decorrência do desenvolvimento desta dissertação resultou o programa PREPROC, também para microcomputadores compatíveis com IBM-PC, que representa uma interface amigável para a entrada de dados do programa ETEFEH. Este trabalho é apresentado no Apêndice 2.

Uma das características das matrizes envolvidas nestes trabalhos é a sua estrutura bandeda. Para o tratamento destas matrizes, técnicas especiais de armazenamento e manipulação são utilizadas. Estas técnicas são apresentadas no Apêndice 3.

Para a correta utilização do programa ETEFEH, um pequeno manual de instruções é apresentado no Apêndice 4.



O trabalho aqui apresentado faz uso das aproximações de terceira ordem (P-3) e da equação de difusão (P-1). Uma aproximação mais rigorosa que as implementadas atualmente no programa ETEFEH, com a expansão do fluxo sendo truncada na quinta ordem, é apresentada no Apêndice 5.

O Apêndice 6 é reservado para uma análise da condição de contorno de reflexão, não incluída no corpo principal do trabalho. Ainda neste apêndice, são apresentados problemas teste que exploram esta condição de contorno para as aproximações P1 e P3 (vale ressaltar que, para a aproximação P1, este tipo de condição de contorno é tratado coerentemente pelo programa).

O método dos elementos finitos tem sido empregado extensivamente em diversos campos de engenharia, sendo que sua utilização possibilita a análise de domínios complexos que, de outra forma, seriam inviáveis computacionalmente. Neste contexto, o método tem sido empregado em diversas áreas de engenharia nuclear e, em particular, na solução da equação de transporte.

Deve-se salientar também que, atualmente, códigos comerciais não-estocásticos para solução da equação de transporte em três dimensões ainda se encontram em fase de desenvolvimento, não se encontrando disponíveis no país. Por outro lado, não se obtém com facilidade problemas na literatura contra os quais o programa aqui apresentado possa ser testado. Desta forma, os testes aqui apresentados não podem ser vistos como definitivos por não explorarem toda a potencialidade do método (tanto do ponto de vista do método de elementos finitos em si, quanto da redução da equação de transporte a equações "tipo difusão").

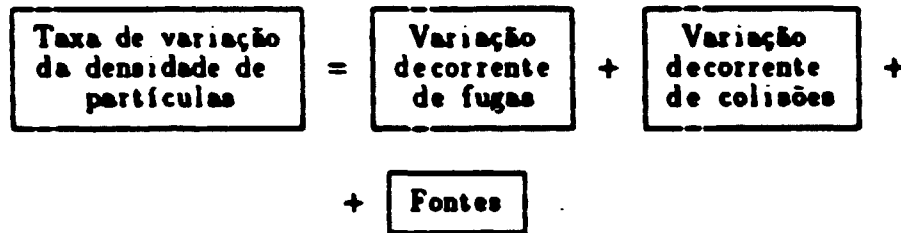
## CAPÍTULO 2

### TEORIA DE TRANSPORTE – MÉTODOS DE SOLUÇÃO E REVISÃO DA LITERATURA

#### 2.1 EQUAÇÃO DE TRANSPORTE

Sendo a equação de transporte o objeto principal de estudo deste trabalho, deve-se apresentar em linhas gerais os fundamentos que levam à sua formulação. Originalmente, a equação desenvolvida por Boltzmann foi deduzida dos princípios fundamentais da Mecânica Estatística aplicada à teoria cinética dos gases [1]. A equação de transporte linear pode ser deduzida a partir desta [2,8,9] por considerações físicas adequadas a cada problema específico. Outra forma de se deduzir a equação de transporte é por intermédio de uma equação de balanços. Esta é uma dedução heurística e encontra-se resumidamente apresentada a seguir.

Considere um volume de controle no espaço de fases e sua evolução temporal. A variação do número de partículas no volume de controle será igual ao número de partículas que não sofrem colisão e no instante anterior pertenciam ao volume considerado, adicionado ao número de partículas introduzido ao volume oriundos de outras regiões do espaço de fases e também por fontes externas, descontadas ainda as partículas que simplesmente se deslocaram para fora do volume de controle em seu trajeto normal:



Matematicamente, pode-se expressar a relação de balanço por:

$$\begin{aligned}
 & \frac{1}{v} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\mathbf{r}, \Omega, E, t) + \Omega \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, \Omega, E, t) + \sigma(\mathbf{r}, E) \cdot \phi(\mathbf{r}, \Omega, E, t) = \\
 & = \int_{4\pi} \int_E \phi(\mathbf{r}, \Omega', E', t) \cdot \sigma(\mathbf{r}, \Omega', E' \rightarrow \Omega, E) dE' d\Omega' + Q(\mathbf{r}, \Omega, E, t) .
 \end{aligned}
 \tag{2.1}$$

onde,  $\phi(\mathbf{r}, \Omega, E, t)$  é o fluxo angular de partículas ;  $\sigma(\mathbf{r}, E)$  é a seção de choque macroscópica total ;  $\sigma(\mathbf{r}, \Omega', E' \rightarrow \Omega, E)$  é a seção de choque macroscópica diferencial de transferência, descrevendo a probabilidade de que uma partícula com direção e energia iniciais  $\Omega'$  e  $E'$  emerge com direção e energia  $\Omega$  e  $E$  após uma colisão no ponto  $\mathbf{r}$  no instante  $t$  ; enquanto que  $Q(\mathbf{r}, \Omega, E, t)$  é a fonte externa de partículas.

Em muitas situações práticas, a solução estacionária da equação de transporte é suficiente. Nestes casos, a equação (2.1) acima pode ser reescrita como

$$\begin{aligned}
 & \Omega \cdot \nabla \phi(\mathbf{r}, \Omega, E) + \sigma(\mathbf{r}, E) \cdot \phi(\mathbf{r}, \Omega, E) = \\
 & = \int_{4\pi} \int_E \phi(\mathbf{r}, \Omega', E') \cdot \sigma(\mathbf{r}, \Omega', E' \rightarrow \Omega, E) dE' d\Omega' + Q(\mathbf{r}, \Omega, E) .
 \end{aligned}
 \tag{2.2}$$

A equação (2.2) acima é frequentemente referenciada como sendo a forma integro-diferencial da equação de transporte. Outras duas formulações são também utilizadas: a formulação integral e formulação integral de superfície. Nos tópicos seguintes será apresentada uma revisão dos principais métodos de solução para a equação de transporte.

## 2.2 SOLUÇÕES ANALÍTICAS

Soluções analíticas para a equação (2.2) acima apenas são possíveis para problemas altamente idealizados ou situações extremamente simplificadas, havendo deste modo, a necessidade de métodos numéricos para solucionar problemas mais complexos. As soluções analíticas são importantes principalmente por fornecer padrões ("benchmarks") que permitem validar determinado método numérico. Dois métodos se destacam para obtenção de soluções analíticas: transformada de Fourier e expansão em auto-funções angulares.

No primeiro método, a transformada de Fourier é aplicada à equação de transporte, obtendo-se uma equação algébrica para a função transformada. Soluciona-se esta equação algébrica e, em seguida, por meio da transformada inversa de Fourier, obtém-se a solução para o fluxo angular [10, 11].

No segundo método, a solução é escrita como uma combinação linear de auto-funções que podem ser obtidas por uma separação de variáveis adequada. Desta forma, é possível obter uma equação que define os possíveis autovalores e, conseqüentemente, as autofunções. Esta combinação linear contém duas auto-funções discretas e um conjunto contínuo de auto-funções singulares. Da ortogonalidade das

auto-funções, pode-se obter o valor das constantes da expansão. Case [12] demonstrou a completesa das auto-funções e por este motivo o método frequentemente leva o seu nome [13, 14, 15]

Outras técnicas podem também ser utilizadas para a obtenção de soluções analíticas para a equação de transporte. Dentre elas, pode-se citar a técnica de "invariant imbedding" [16] e a técnica de matriz-transferência [17]. No entanto, desde a década de 40, os principais esforços têm sido voltados para técnicas aproximadas de solução para as diversas aplicações da teoria de transporte. São desta época os trabalhos pioneiros de Wick [18] e Chandrasekhar [5, 6], onde o método de ordenadas discretas é introduzido e aplicado, inicialmente a problemas de transferência radiativa.

Os primeiros trabalhos envolvendo aplicações da teoria de transporte a física de reatores utilizaram-se da experiência adquirida nos estudos de transferência radiativa, levando a "teoria de difusão". Outras aproximações empregadas neste campo de aplicações da teoria de transporte são o método  $S_N$  [19, 20] (generalização do método de ordenadas discretas), e os métodos  $P_N$  e  $DP_N$  [10, 21] baseados em expansões da distribuição angular em polinômios de Legendre. Um resumo destes métodos e outras técnicas aproximadas relacionadas a problemas em reatores é apresentado por Davison [10], Bell e Glasstone [2] e Duderstadt e Martin [11].

Deve-se salientar que, embora as técnicas analíticas forneçam, em geral, formas fechadas para a solução das equações, isto não significa que nenhuma computação se faça necessária para a obtenção das respostas finais. Por outro lado, devido ao avanço dos modernos computadores digitais, as técnicas numéricas tendem a fornecer soluções aproximadas cada vez mais próximas destas soluções analíticas.

## 2.3 SOLUÇÕES NUMÉRICAS

### 2.3.1 EQUAÇÃO DE TRANSPORTE INTEGRAL

A equação de transporte em sua forma integral pode ser escrita como [11]:

$$\phi(\mathbf{r}) = \int d^3r' \frac{\exp(-\tau)}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|^2} (\sigma_a(\mathbf{r}) \cdot \phi(\mathbf{r}) + S(\mathbf{r})) \quad (2.3)$$

onde  $\tau = \int_0^{|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \sigma(\mathbf{r}-t\cdot\Omega) dt$  é a distância ótica entre  $\mathbf{r}$  e  $\mathbf{r}'$

Dentre os métodos de solução desta forma da equação de transporte, destacam-se [14] DIT ("Discrete Integral Transport"), CP ("collision probability") e colocação. O primeiro método aproxima a equação acima por meio da técnica numérica de quadratura e os dois últimos propõe a divisão do domínio em questão em zonas homogêneas e a expansão do fluxo em cada zona. De forma geral, os três métodos buscam relacionar a distribuição neutrônica em um nó devido à contribuição de outros nós no espaço de fases

Devido ao forte acoplamento entre as regiões em que se divide o domínio de um problema, os esforços computacionais necessários para a solução da equação de transporte integral dependente da energia faz com que a mesma não tenha tido um emprego generalizado em problemas de reatores. Entretanto, há casos específicos em que esta se mostrou muito útil. Pode-se citar, por exemplo [2], cálculos de espectros térmicos de nêutrons e a derivação de propriedades matemáticas das soluções da equação de transporte monoenergética.

Dentre os métodos de solução da equação integral, o método CP tem sido o mais empregado pelos pesquisadores da área

Outro método largamente utilizado para solucionar a equação de transporte integral e o método de Monte Carlo, que determina a densidade de partículas emergentes ( $E(x)$ ) por meio de uma série de Neumann [22, 23]. Este método pode ser apresentado como

$$E(\underline{r}, \underline{\Omega}, t) = \sum_{n=0}^{\infty} E_n^-(\underline{r}, \underline{\Omega}, t) \quad (2.4)$$

sendo

$$E = S(\underline{r}, \underline{\Omega}, t) \text{ e}$$

$$E_n^- = \mathcal{C}_{op}(\underline{r}, \underline{\Omega}' \rightarrow \underline{\Omega}) \cdot \mathcal{T}_{op}(\underline{r}' \rightarrow \underline{r}, \underline{\Omega}) \cdot E_{n-1}^-(\underline{r}', \underline{\Omega}', t) \text{ ,}$$

onde  $\mathcal{C}_{op}(\underline{r}, \underline{\Omega}' \rightarrow \underline{\Omega})$  é o operador colisão e  $\mathcal{T}_{op}(\underline{r}' \rightarrow \underline{r}, \underline{\Omega})$  é o operador de transporte.

E de se notar que a equação (2.4) é a forma da equação integral de transporte para a densidade de colisão,  $E$ , a qual é definida como:

$$E(\underline{r}, \underline{\Omega}, t) = S(\underline{r}, \underline{\Omega}, t) + \int d\underline{\Omega}' \sigma_s(\underline{r}, \underline{\Omega}' \rightarrow \underline{\Omega}) \cdot \phi(\underline{r}, \underline{\Omega}', t) \text{ .} \quad (2.5)$$

A solução por série de Neumann da equação (2.5) implica na seguinte sequência de eventos para o procedimento randômico:

- i) Nascimento da partícula. As coordenadas do espaço de fase são selecionadas de acordo com a fonte  $S(\underline{r}, \underline{\Omega}, t)$ .
- ii) Transporte da partícula. A partícula é transportada até a próxima posição de colisão de acordo com o operador de transporte  $\mathcal{T}_{op}(\underline{r}' \rightarrow \underline{r}, \underline{\Omega}')$ .

iii) Colisão da partícula. Na posição amostrada anteriormente, determina-se o tipo de colisão de acordo com o operador de colisão  $\mathcal{E}_{\sigma,p}(\underline{r}, \underline{\Omega}' - \underline{\Omega})$ . Caso a partícula morra (absorção ou peso limiar), deve-se iniciar uma nova história (retorna-se à etapa 1).

iv) Parâmetros posteriores à colisão. Amostra-se a nova posição da partícula no espaço de fases de acordo com a função densidade de probabilidade associada ao operador de colisão.

v) Sequência da história. A história da partícula continua (uma vez que a mesma não morreu), fazendo  $(\underline{r}' = \underline{r}, \underline{\Omega}' = \underline{\Omega})$  e retornando-se à segunda etapa.

## 2.3.2 MÉTODOS DE SUPERFÍCIE

A distribuição estacionária de partículas dentro de um corpo é unicamente definida pela fonte interna e pelas condições de contorno. Esta formulação apresenta como grande atrativo o fato de permitir o conhecimento do fluxo e da corrente na superfície sem a direta solução da equação de transporte no meio, sendo este conhecimento interessante quando se trata de solucionar problemas da área de blindagem. A técnica conhecida por "invariant imbedding" pode ser considerada como pioneira dentre os métodos de superfície, tendo sido introduzida pelo astrofísico russo Ambarzumian [4]. Este método não é diretamente baseado na equação de transporte de Boltzmann, mas nas equações que podem ser derivadas a partir dos princípios de conservação para funções transmissão e reflexão. Os livros de Schaeffer [24] e Case e Zweifel [13] apresentam uma discussão deste método.

Dentre outras técnicas de superfície, destacam-se ainda o método  $C_{\eta}$  introduzido por Montagnini e Pierpaolo [25], e o método  $F_{\eta}$  introduzido por Siewert e colaboradores



[25, 27] O artigo de Sanchez e McCormick [14] apresenta um resumo do método e os principais trabalhos desenvolvidos nesta área.

### 2.3.3 EQUAÇÃO DE TRANSPORTE INTEGRO-DIFERENCIAL

A solução da equação de transporte integro-diferencial resulta de procedimentos de discretização tais que

1. A dependência energética é aproximada pela técnica de multigrupo.
2. A dependência angular é aproximada por técnicas de discretização ou por expansão em funções base.
3. A dependência espacial é aproximada por uma técnica usual de solução de equações diferenciais (diferenças finitas, por exemplo), levando a equação de transporte a ser substituída em cada grupo de energia por um conjunto de equações algébricas para o cálculo dos coeficientes introduzidos com as aproximações.

Dentre as diversas técnicas de discretização três merecem um destaque especial, sendo aqui abordadas ordenadas discretas, expansão em harmônicos esféricos e elementos finitos.

### 2.3.3.1 ORDENADAS DISCRETAS

Neste primeiro caso, a dependência angular é discretizada em uma série de direções discretas (quadraturas angulares, com os respectivos pesos para aproximar as integrais). Esta é a técnica de discretização angular mais consagrada de solução da equação de transporte, sendo empregada em diversos códigos da área nuclear, dentre os quais pode-se destacar: DTF, ANISN, XSDRN (unidimensionais); DOT, TWOTRAN, TRIDENT (bidimensionais); TORT e THREETRAN (tridimensionais) [11].

### 2.3.3.2 EXPANSÃO EM HARMÔNICOS ESFÉRICOS

A idéia central deste método consiste na separação do componente angular do componente espacial no fluxo angular por meio de uma expansão do fluxo em harmônicos esféricos, isto é,

$$\phi(\mathbf{r}, \Omega) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^l \left[ \frac{2l+1}{4\pi} \right]^{1/2} \psi_{lm}(\mathbf{r}) \cdot Y_{lm}(\Omega) \quad (2.6)$$

sendo  $\psi_{lm}(\mathbf{r})$  os momentos da expansão e  $Y_{lm}(\Omega)$  os harmônicos esféricos.

Expandindo de forma semelhante a seção de choque de espalhamento e o termo fonte, pode-se trabalhar a equação de transporte de modo a simplificá-la consideravelmente. A mesma se tornará independente dos ângulos ao ser multiplicada pelo complexo conjugado de  $Y_{lm}(\Omega)$  e integrada sobre  $\Omega$ , permitindo desta forma a aplicação de técnicas usuais de solução de equações diferenciais para o componente espacial (elementos finitos, por exemplo) [28].

### 2.3.3.3 MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

O método dos elementos finitos pode ser aplicado para solução de equações diferenciais por dois métodos principais: o método variacional e o método dos resíduos ponderados. Quando é conhecido o funcional que representa a equação diferencial (ou conjunto de equações diferenciais), a função (ou conjunto de funções) que extremiza este funcional (ou conjunto de funcionais) sujeito às mesmas condições de contorno do problema diferencial é a mesma função que satisfaz a equação diferencial (ou conjunto de equações) [11, 29]. A solução do funcional apresenta vantagens sobre a solução da formulação diferencial tais como [29]: ordem das derivadas presentes é inferior no funcional; simplificação no tratamento de condições de contorno; do ponto de vista matemático, o método pode ser empregado para provar a existência de uma solução; em alguns casos, a equação diferencial apresenta dois funcionais distintos que a representa: o primeiro a ser minimizado e o segundo a ser maximizado – permitindo, desta forma, a obtenção de limites superiores e inferiores para o funcional. O método de resíduos ponderados é geralmente aplicado em situações em que não se conhece o funcional associado à equação diferencial, ampliando desta forma, a aplicabilidade do método de elementos finitos.

Na técnica de resíduos ponderados, a equação de transporte de primeira ordem é multiplicada por uma função arbitrária que pertence ao espaço de soluções possíveis e integrada no volume do problema em questão. A seguir, manipulam-se os termos da equação resultante, levando à forma fraca da equação de transporte. Quando da manipulação do termo de fuga (o termo que envolve o gradiente do fluxo), as condições de contorno são incluídas automaticamente. O passo seguinte é solucionar a equação resultante desta manipulação não no domínio como um todo, mas em subdomínios

"elementares e finitos" e em termos de funções base. A solução final será construída como sendo a soma da solução nos elementos.

Para a aplicação do princípio variacional, definem-se os fluxos de paridade par e ímpar:

$$\phi^*(x, \Omega) = [\phi(x, \Omega) + \phi(x, -\Omega)]/2 ; \quad (2.7)$$

$$\phi^-(x, \Omega) = [\phi(x, \Omega) - \phi(x, -\Omega)]/2 , \quad (2.8)$$

de modo a derivar-se a equação de segunda ordem, auto-adjunta para estas grandezas [28]:

$$-\Omega \cdot \nabla [G \Omega \cdot \nabla \phi^*] + C \phi^* = S^* - \Omega \cdot \nabla G S^* \quad (2.9)$$

e

$$-\Omega \cdot \nabla [C^{-1} \Omega \cdot \nabla \phi^-] + G^{-1} \phi^- = S^- - \Omega \cdot \nabla C^{-1} S^- , \quad (2.10)$$

onde

$$S^*(x, \Omega) = [S(x, \Omega) + S(x, -\Omega)]/2 , \quad (2.11)$$

enquanto que  $C$  e  $G$  representam os operadores de remoção e fuga, respectivamente [11].

As equações de segunda ordem apresentadas acima são auto-adjuntas, possuindo desta forma, um funcional associado a elas. Assim, com a aplicação do princípio variacional, é possível a obtenção de um funcional cuja extremização fornecerá a solução da equação diferencial.

A integral sobre todas as direções do fluxo de paridade par fornece o valor do fluxo total, enquanto que o fluxo de paridade ímpar está relacionado com a corrente de nêutrons. De forma geral, o conhecimento do fluxo total é de maior interesse que o conhecimento da corrente neutrônica, o que leva à aplicação do método dos elementos finitos usualmente para solução da equação para o fluxo de paridade par [28].

O método dos elementos finitos tem sido aplicado tanto às variáveis angulares quanto às variáveis espaciais para a formulação tradicional (não auto-adjunta ou de primeira ordem) [11, 30, 31], e também para a formulação de segunda ordem (paridade par e ímpar ou de segunda ordem) [28, 32, 33, 34] da equação de transporte. A aplicação do método às variáveis angulares e espaciais para problemas com muitas dimensões (três de espaço e duas de ângulo, por exemplo) torna-se pouco atrativo em virtude das grandes matrises que surgem no desenvolvimento algébrico do método. De modo geral, o método tem sido empregado às variáveis espaciais em conjunto com outra técnica para a dependência angular, em virtude da boa representação que se pode obter para uma geometria arbitrária.

Reed e Hill [35] aplicaram o método dos elementos finitos combinado com o método das ordenadas discretas nos ângulos. Este procedimento também foi adotado no desenvolvimento de alguns códigos computacionais tais como TRIDENT [36] e ONETRAN [37], levando a bons resultados [11], em particular por evitar fluxo negativo e possibilitar a utilização de malhas largas.

Fletcher [38, 39, 40, 41, 42, 43] propõe a aplicação do método em conjunto com a expansão do fluxo angular em harmônicos esféricos para duas e três dimensões espaciais. A expansão resulta em um conjunto acoplado de equações de segunda ordem para os momentos, conjunto este que poderá ser solucionado iterativamente pelo método dos elementos finitos.

Desde o trabalho de Vladimirov [44], a partir de onde é deduzida a formulação de segunda ordem da equação de transporte, muitos trabalhos tem sido publicados com o método dos elementos finitos aplicado a esta forma da equação. O princípio variacional dado por Ackroyd [45] para a equação de transporte de segunda ordem para um meio com espalhamento anisotrópico tem sido extensivamente empregado por Galliara e Williams [46], Ackroyd e Grenfell [47], Ackroyd, Goddard e Ziver [48], Ziver e Goddard [32], Issa [52], Splawski [50], Quah [51], Wood e Williams [34], Wood [52] e Oliveira [33], para analisar problemas-padrão ("benchmarks") [28]. Estes desenvolvimentos para uma, duas e três dimensões levaram aos códigos multigrupo FELICIT e FELTRAN para meios com espalhamento anisotrópico. Ambos os códigos utilizam uma representação em elementos finitos para a dependência espacial e expansão em harmônicos esféricos para a dependência direcional do fluxo angular de paridade par [28].

Duderstadt e Martin [11] apresentam uma revisão do método dos elementos finitos aplicado à equação de transporte de primeira ordem, enquanto que Ackroyd, Fletcher, Goddard, Issa, Williams e Wood [28] apresentam uma revisão do método aplicada à equação de transporte de segunda ordem.

## CAPÍTULO 3

### MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS

A análise matemática de diversos problemas em física e engenharia frequentemente leva à formulação de um conjunto de equações diferenciais que representam o problema em estudo. A solução analítica destas equações nem sempre é possível ou viável, havendo a necessidade de técnicas numéricas que forneçam soluções aproximadas. O método de elementos finitos é uma dentre várias técnicas de análise numérica para a obtenção destas soluções aproximadas.

Abaixo resumem-se os passos para solução de uma equação diferencial por meio do método dos elementos finitos:

1. Discretização da região de interesse:

Subdivide-se a região de interesse em subdomínios ou elementos, nos quais as propriedades físicas permanecem constantes (na verdade, admite-se a variação destas propriedades até a mesma ordem que as funções interpolantes).

2. Seleção das funções interpolantes:

Nesta etapa, numeram-se os nós e os elementos e determina-se o tipo de função interpolante para representar a variável dependente no elemento.

3. Obtenção das propriedades dos elementos (matris dos elementos):

Determina-se a equação matricial relacionando as propriedades dos elementos individualmente.

4. Montagem da matris dos coeficientes:

Para que as propriedades do sistema sejam obtidas como um todo, deve-se agrupar todas as matrises dos elementos acondicionando-as na matris global dos coeficientes. Durante esta montagem deve-se levar em conta as condições de contorno,

incorporando-as aos respectivos nós de forma adequada. Também nesta etapa deve-se agrupar o termo independente (quando a equação em estudo não for homogênea).

#### 5. Solução do sistema de equações:

De modo geral, a inversão da matriz dos coeficientes fornecerá os valores desejados para a variável dependente. Há casos em que alguma computação final ainda se faz necessária.

Dado um conjunto de equações diferenciais para a variável  $u$ , válidas em um certo domínio  $\Omega$ ,

$$\Delta(u) = \begin{bmatrix} A_1(u) \\ A_2(u) \\ \vdots \end{bmatrix} = 0, \quad (3.1)$$

e um conjunto de condições de contorno válidas no contorno  $\Gamma$  deste domínio,

$$B(u) = \begin{bmatrix} B_1(u) \\ B_2(u) \\ \vdots \end{bmatrix} = 0, \quad (3.2)$$

o método dos elementos finitos propõe como solução aproximada

$$u \approx \hat{u} = \sum_i N_i \cdot a_i, \quad (3.3)$$

onde  $N_i$  são funções base definidas localmente e os parâmetros  $a_i$  deverão ser determinados pelo método.



Usualmente o problema de valor no contorno dado por (3.1) e (3.2) pode ser colocado na forma integral

$$\int_{\Omega} G_j(\underline{u})d\Omega + \int_{\Gamma} g_j(\underline{u})d\Gamma = 0, \quad (3.4)$$

com  $j=1,2,\dots,r$  ; e ainda,  $G_j$  e  $g_j$  funções ou operadores conhecidos. Com a aplicação do método dos elementos finitos, o domínio  $\Omega$  é subdividido em  $m$  elementos para se obter

$$\int_{\Omega} G_j(\underline{u})d\Omega + \int_{\Gamma} g_j(\underline{u})d\Gamma = \sum_{\alpha=1}^m \left\{ \int_{\Omega^{\alpha}} G_j(\underline{u})d\Omega + \int_{\Gamma^{\alpha}} g_j(\underline{u})d\Gamma \right\}, \quad (3.5)$$

onde  $\Omega^{\alpha}$  é o domínio de cada elemento e  $\Gamma^{\alpha}$  seu contorno apropriado.

Para a obtenção destas formas integrais aproximadas dois procedimentos distintos são propostos:

- i) método dos resíduos ponderados;
- ii) método variacional.

Quando a técnica de resíduos ponderados é empregada, busca-se a solução de uma equação diferencial (ou de um conjunto de equações diferenciais) por meio da integração desta equação (ou conjunto de equações). Quando a técnica variacional é empregada, o problema passa a ser a obtenção de uma função (ou conjunto de funções) que extremiza (maximiza ou minimiza) ou torna estacionário o funcional ou sistema de funcionais que representa a equação diferencial (ou conjunto de equações diferenciais) sujeito às mesmas condições de contorno do problema diferencial. As duas formulações são equivalentes porque as funções que satisfazem as equações diferenciais são as mesmas funções que

extremizam ou tornam estacionário os funcionais. Esta equivalência torna-se aparente por meio do cálculo variacional, que mostra que os funcionais são extremizados ou feitos estacionários somente quando uma ou mais Equações de Euler a ele associadas e suas condições de contorno são satisfeitas. Estas equações de Euler são coincidentes com as equações diferenciais que governam o problema [29, 53, 54]. Neste trabalho, apenas a aproximação por meio do método dos resíduos ponderados será abordada, ficando como sugestão para trabalhos futuros um tratamento variacional.

Sendo o conjunto de equações diferenciais dado em (3.1) identicamente nulo em todos os pontos do domínio  $\Omega$ , pode-se escrever

$$\int_{\Omega} \mathbf{v}^T \Delta(\mathbf{u}) d\Omega = \int_{\Omega} [v_1 A_1(\mathbf{u}) + v_2 A_2(\mathbf{u}) + \dots] d\Omega = 0, \quad (3.6)$$

onde

$$\mathbf{v} = \begin{bmatrix} v_1 \\ v_2 \\ \vdots \end{bmatrix}$$

é um conjunto de funções arbitrárias em igual número ao de equações diferenciais obedecidas por  $\mathbf{u}$ .

Da mesma forma, para as condições de contorno tem-se em todos os pontos do contorno  $\Gamma$ ,

$$\int_{\Gamma} \mathbf{w}^T \mathbf{B}(\mathbf{u}) d\Omega = \int_{\Gamma} [w_1 B_1(\mathbf{u}) + w_2 B_2(\mathbf{u}) + \dots] d\Omega = 0, \quad (3.7)$$

para um conjunto arbitrário de funções  $\mathbf{w}^T = \{w_1, w_2, \dots\}$ .

Assim, torna-se equivalente resolver o sistema de equações (3.1) e suas condições de contorno (3.2), ou o sistema de equações (3.6) e (3.7).

Em lugar de funções genéricas  $v$  e  $w$ , pode-se escolher

$$v = \{v_1, v_2, \dots, v_n\} \quad e \quad w = \{w_1, w_2, \dots, w_n\} ,$$

onde  $n$  é o número de parâmetros  $a_i$  introduzidos no problema.

Com esta escolha, bem como a aproximação (3.3) para a função  $u$ , chega-se a

$$\int_{\Omega} v_j^T \Delta(Na) d\Omega + \int_{\Gamma} w_j^T B(Na) d\Gamma = 0 , \quad (3.8)$$

com  $j=1, 2, \dots, n$  .

Na equação acima,  $\Delta(Na)$  é o resíduo ou erro obtido pela aproximação introduzida na equação diferencial e  $B(Na)$  é o resíduo ou erro das condições de contorno. Desta forma fica claro o motivo pelo qual a equação acima é conhecida por integral dos resíduos ponderados e a aproximação por método dos resíduos ponderados.

Qualquer conjunto de funções independentes  $w_j$  poderia ser utilizado para ponderação e, de acordo com a escolha, tem-se uma diferente denominação para o método. As principais escolhas são:

i) colocação pontual, isto é,  $w_j = \delta_j$ , onde  $\delta_j$  é tal que, para  $(x \neq x_j ; y \neq y_j)$ , tem-se  $w_j = 0$ , e ainda,  $\int_{\Omega} w_j d\Omega = 1$  ;

ii) colocação no subdomínio, isto é,  $w_j = 1$  em  $\Omega^e$  e zero fora;

iii) método de Galerkin, onde  $w_j = N_j$ , ou seja, as funções base são utilizadas como funções ponderação.

Neste trabalho apenas será abordado o método de Galerkin, devido este conduzir a melhores resultados em praticamente todos os casos em que é aplicado [29].

No Apêndice 1 apresenta-se a aplicação do método dos elementos finitos na solução da equação de difusão onde se ilustra de maneira prática os conceitos anteriormente discutidos.

## CAPÍTULO 4

### DESENVOLVIMENTO ANALÍTICO RESULTANTE DA EXPANSÃO DO FLUXO EM FUNÇÕES ASSOCIADAS DE LEGENDRE

A técnica de solução da equação de transporte através da expansão do componente angular em harmônicos esféricos, ou no caso de problemas unidimensionais em polinômios de Legendre, para a derivação de um conjunto acoplado de equações diferenciais de primeira ordem é bastante antiga [10]. Recentemente, Fletcher [38, 39, 40, 41, 42, 43] propõe um tratamento original às equações resultantes da aplicação do método em duas e três dimensões. A idéia desenvolvida por Fletcher é reduzir as equações acopladas de primeira ordem para os momentos da expansão do fluxo a um conjunto acoplado de equações de segunda ordem. Este conjunto apresentará equações matematicamente similares à equação de difusão, com o acoplamento dos momentos embutido no termo fonte. A solução deverá ser obtida de forma iterativa a partir de uma estimativa inicial para os momentos. Neste capítulo é apresentado o desenvolvimento analítico resultante da aplicação da expansão do fluxo angular em funções associadas de Legendre à equação de transporte.

Para tanto, seja a equação de transporte em geometria tridimensional ( $x-y-z$ ) e independente da energia:

$$\Omega \nabla \psi(\mathbf{r}, \Omega) + \sigma(\mathbf{r}, \Omega) \psi(\mathbf{r}, \Omega) = \int_{\Omega'} \sigma_s(\mathbf{r}, \Omega' \rightarrow \Omega) \psi(\mathbf{r}, \Omega') d\Omega' + S(\mathbf{r}, \Omega) \quad (4.1)$$

Aproximando-se o fluxo angular, a fonte total e a seção de choque de espalhamento por uma expansão em funções associadas de Legendre, isto é,

$$\phi(\mathbf{r}, \Omega) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^l (2l+1) P_l^m(\mu) \cdot [\Psi_{1m}(\mathbf{r}) \cos m\varphi + \Gamma_{1m}(\mathbf{r}) \sin m\varphi] , \quad (4.2)$$

$$S(\mathbf{r}, \Omega) = \sum_{l=0}^{\infty} \sum_{m=0}^l (2l+1) P_l^m(\mu) \cdot [S_{1m}(\mathbf{r}) \cos m\varphi + Q_{1m}(\mathbf{r}) \sin m\varphi] , \quad (4.3)$$

$$\begin{aligned} \sigma_d(\mathbf{r}, \Omega \cdot \Omega') &= \frac{1}{4\pi} \sum_{l=0}^L (2l+1) \sigma_l^d(\mathbf{r}) [P_l(\mu) \cdot P_l(\mu') + \\ & 2 \sum_{m=1}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\mu) \cdot P_l^m(\mu') \cdot \cos m(\varphi - \varphi')] , \end{aligned} \quad (4.4)$$

e substituindo estas expansões em (4.1), obtém-se

$$\begin{aligned} & \sum_{l=0}^N (2l+1) \sum_{m=0}^l \left\{ \mu \cdot P_l^m(\mu) \cdot \frac{\partial}{\partial x} [\Psi_{1m}(\mathbf{r}) \cdot \cos m\varphi + \Gamma_{1m}(\mathbf{r}) \cdot \sin m\varphi] + \right. \\ & \sqrt{(1-\mu^2)} \cdot P_l^m(\mu) \cdot \frac{\partial}{\partial x} [\Psi_{1m}(\mathbf{r}) \cdot \cos m\varphi + \Gamma_{1m}(\mathbf{r}) \cdot \sin m\varphi] \cdot \cos\varphi + \\ & \left. \sqrt{(1-\mu^2)} \cdot P_l^m(\mu) \cdot \frac{\partial}{\partial y} [\Psi_{1m}(\mathbf{r}) \cdot \cos m\varphi + \Gamma_{1m}(\mathbf{r}) \cdot \sin m\varphi] \cdot \sin\varphi + \right. \\ & \left. \sigma(\mathbf{r}) \cdot P_l^m(\mu) \cdot [\Psi_{1m}(\mathbf{r}) \cdot \cos m\varphi + \Gamma_{1m}(\mathbf{r}) \cdot \sin m\varphi] \right\} = \\ & \frac{1}{4\pi} \int_{\Omega'} \left\{ \sum_{l=0}^L (2l+1) \sigma_l^d(\mathbf{r}) \cdot \sum_{l=0}^N (2l+1) \sum_{m=0}^l P_l^m(\mu) \cdot [\Psi_{1m}(\mathbf{r}) \cdot \cos m\varphi + \Gamma_{1m}(\mathbf{r}) \cdot \sin m\varphi] \right\} = \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \cdot \left[ P_l(\mu) \cdot P_l(\mu') + 2 \cdot \sum_{n=1}^l \frac{(l-n)!}{(l+n)!} P_n^{\square}(\mu) \cdot P_n^{\square}(\mu') \cdot \cos n(\varphi - \varphi') \right] \} + \\
& \sum_{l=0}^N (2l+1) \sum_{n=0}^l P_l^{\square}(\mu) \cdot [S_{ln}(\xi) \cdot \cos n\varphi + Q_{ln}(\xi) \cdot \sin n\varphi] \quad (4.5)
\end{aligned}$$

Utilizando as relações trigonométricas e de recorrência dadas abaixo [55]

$$\cos m\varphi \cdot \cos \varphi = \frac{1}{2} [\cos(m+1)\varphi + \cos(m-1)\varphi] ,$$

$$\sin m\varphi \cdot \cos \varphi = \frac{1}{2} [\sin(m+1)\varphi + \sin(m-1)\varphi] ,$$

$$\cos m\varphi \cdot \sin \varphi = \frac{1}{2} [\sin(m+1)\varphi - \sin(m-1)\varphi] ,$$

$$\sin m\varphi \cdot \sin \varphi = \frac{1}{2} [\cos(m-1)\varphi - \cos(m+1)\varphi] ,$$

$$(2l+1)\mu P_l^{\square}(\mu) = (l-m+1)P_{l-1}^{\square}(\mu) + (l+m)P_{l+1}^{\square}(\mu) , \quad l \geq 1 ,$$

$$(2l+1)\sqrt{(1-\mu^2)} P_l^{\square}(\mu) = P_{l-1}^{\square 1}(\mu) + P_{l+1}^{\square 1}(\mu) , \quad l \geq 1 ,$$

$$(2l+1)\sqrt{(1-\mu^2)} P_l^{\square}(\mu) = (l+m)(l-m-1)P_{l-1}^{\square 1}(\mu) - (l-m+1)(l-m+2)P_{l+1}^{\square 1}(\mu) , \quad l \geq 1 ,$$

e ainda isolando termos com  $l=m=0$ , obtém-se

$$\begin{aligned}
& 2 \cdot \mu \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{00} + 2\sqrt{(1-\mu^2)} \cos \varphi \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{00} + 2\sqrt{(1-\mu^2)} \sin \varphi \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{00} + \\
& \sum_{l=1}^{\infty} \sum_{m=0}^l \left\{ 2 \cdot [(l-m+1)P_{l,m}^m + (l+m)P_{l,m}^{m-1}] \cdot \frac{\partial}{\partial x} (\psi_{l,m} \cdot \cos m\varphi + \Gamma_{l,m} \cdot \sin m\varphi) + \right. \\
& (P_{l,m}^{m+1} - P_{l,m}^{m-1}) \cdot \left[ \cos(m+1)\varphi \cdot \left[ \frac{\partial}{\partial x} \psi_{l,m} - \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{l,m} \right] + \sin(m+1)\varphi \cdot \left[ \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l,m} - \frac{\partial}{\partial y} \psi_{l,m} \right] \right] + \\
& [(l+m)(l+m-1)P_{l,m}^{m-1} - (l-m+1)(l-m+2)P_{l,m}^{m-2}] \cdot \left[ \cos(m-1)\varphi \cdot \left[ \frac{\partial}{\partial x} \psi_{l,m} + \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{l,m} \right] + \right. \\
& \left. \left. \sin(m-1)\varphi \cdot \left[ \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l,m} - \frac{\partial}{\partial y} \psi_{l,m} \right] \right] \right\} + 2 \cdot \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sum_{m=0}^l P_l^m \cdot \sigma_l (\psi_{l,m} \cdot \cos m\varphi + \Gamma_{l,m} \cdot \sin m\varphi) - \\
& \frac{1}{2\pi} \int_0^{2\pi} d\varphi' \int_{-1}^1 d\mu' \sum_{l=0}^L \sum_{l'=0}^L \sum_{m=0}^l (2l+1)(2l'+1) \sigma_l \sigma_{l'} P_l^m(\mu') \cdot (\psi_{l,m} \cdot \cos m\varphi + \Gamma_{l,m} \cdot \sin m\varphi) = \\
& \cdot \left[ P_l(\mu) \cdot P_l(\mu') + 2 \cdot \sum_{m=1}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\mu) \cdot P_l^m(\mu') \cdot \cos m(\varphi - \varphi') \right] = \\
& \sum_{l=0}^{\infty} (2l+1) \sum_{m=0}^l P_l^m(\mu) \cdot [S_{l,m} \cdot \cos m\varphi + Q_{l,m} \cdot \sin m\varphi] \quad (4.6)
\end{aligned}$$

É de se notar que para se obter a equação (4.6), foi utilizada a relação

$$P_l^{-m}(\mu) = \frac{(-1)^m (l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\mu) \quad , \quad m \geq 0 \quad ,$$

para o caso  $m \neq l=1$ .



Multiplicando-se a equação (4.6) por  $P_n^2(\mu)d\mu$ , integrando em  $\mu$  no intervalo  $[-1, 1]$ , e reagrupando, obtém-se:

$$A_{1n} \cos m\varphi + B_{1n} \sin m\varphi = 0, \quad (4.7)$$

onde

$$\begin{aligned} A_{1n} = & \left\{ 2(l-m) \cdot H(l-1) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{l-1, n} + 2 \cdot (l+m+1) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{l+1, n} + H(l-1) \cdot \delta_{n,1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{l-1,0} \right. \\ & + H(l-1) \cdot H(m-1) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{l-1, m-1} - H(l-2) \cdot H(m-2) \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{l-1, m-1} - [1-H(l-N)] \cdot \delta_{n,1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{l+1,0} \\ & - [H(l-1)-H(l-N)] \cdot H(m-1) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{l+1, m-1} + [H(l-1)-H(l-N)] \cdot H(m-2) \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{l+1, m-1} \\ & + (l+m+1)(l+m+2)[1-H(l-N)] \cdot [1-H(m-N)] \cdot \left[ \frac{\partial}{\partial x} \psi_{l+1, m+1} + \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{l+1, m+1} \right] - \\ & \left. (l-m)(l-m-1) \cdot H(l-1) \cdot [1-H(m-N)] \left[ \frac{\partial}{\partial x} \psi_{l-1, m+1} + \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{l-1, m+1} \right] + \right. \\ & \left. 2(2l+1) \cdot \sigma^1 \cdot \psi_{1n} - 2(2l+1) S_{1n} \right\} \quad (4.8) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
B_{l,m} = & \left\{ 2(l-m) \cdot H(l-1) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l-1,m} + 2(l+m+1) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l+1,m} + H(l-1) \cdot \delta_{m,1} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{l-1,0} \right. \\
& + H(l-2) \cdot H(m-2) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l-1,m-1} + H(l-1) \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{l-1,m-1} - [1-H(l-N)] \cdot \delta_{m,1} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{l,0} \\
& - H(m-2) \cdot [H(l-2)-H(l-N)] \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l+1,m-1} - H(m-1) \cdot [H(l-1)-H(l-N)] \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{l+1,m-1} + \\
& (l+m+1)(l+m+2) \cdot [1-H(l-N)] \cdot [1-H(m-N)] \left[ \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l+1,m+1} - \frac{\partial}{\partial y} \psi_{l+1,m+1} \right] - \\
& (l-m)(l-m-1) \cdot H(l-1) [1-H(m-N)] \left[ \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l-1,m+1} - \frac{\partial}{\partial y} \psi_{l-1,m+1} \right] + \\
& \left. 2(2l+1) \cdot \sigma^l \cdot \Gamma_{l,m} - 2(2l+1) Q_{l,m} \right\} . \tag{4.9}
\end{aligned}$$

com

$$\sigma^l = \sigma_l - \sigma_0^l ;$$

e

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

Desde que  $\cos m\varphi$  e  $\sin m\varphi$  são linearmente independentes, tem-se necessariamente que  $A_{l,m} = 0$  e, exceto para o caso  $m=0$ ,  $B_{l,m} = 0$  (pois neste último caso tem-se  $\sin m\varphi=0$ ). Como as equações (4.8) e (4.9) são válidas para  $l=0,1,\dots,N$  e  $m=0,1,\dots,l$ , tem-se um conjunto acoplado de  $(N+1)^2$  equações de primeira ordem, sendo  $N$  a ordem da expansão do fluxo.

#### 4.1 EQUAÇÃO "TIPO DIFUSÃO"

Considerando as equações (4.8) e (4.9) obtidas anteriormente para os diversos valores positivos de  $l$  e  $m$ , têm-se um conjunto acoplado de equações de primeira ordem para os momentos  $\psi$  e  $\Gamma$  resultantes da aproximação do fluxo em uma expansão finita em harmônicos esféricos. Para solucionar estas equações e, conseqüentemente, obter-se uma solução aproximada da equação de transporte, o método proposto é a redução deste conjunto acoplado de equações diferenciais de primeira ordem a um conjunto acoplado de equações diferenciais de segunda ordem, o que reduz o número de equações a serem solucionadas iterativamente.

Para exemplificar o método, considere inicialmente a aproximação P1. Neste caso, 4 momentos surgem da expansão do fluxo ( $\psi_{00}$ ,  $\psi_{10}$ ,  $\psi_{11}$  e  $\Gamma_{11}$ ):

$$\phi(\mathbf{r}, \Omega) \cong \psi_{00}(\mathbf{r}) + 3 \cdot \cos\theta \cdot \psi_{10}(\mathbf{r}) - 3 \cdot \sin\theta [\cos\varphi \cdot \psi_{11}(\mathbf{r}) + \sin\varphi \cdot \Gamma_{11}(\mathbf{r})] , \quad (4.10)$$

e quatro equações podem ser obtidas a partir de (4.8) e (4.9):

$l=0, m=0$  :

$$2 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \psi_{10} + 2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{11} + 2 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{11} + 2 \cdot \sigma_0 \cdot \psi_{00} = 2 \cdot S_{00} , \quad (4.11.a)$$

$l=1, m=0$  :

$$2 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \psi_{00} + 6 \cdot \sigma_1 \cdot \psi_{10} = 6 \cdot S_{10} , \quad (4.11.b)$$

$l=1, m=1$  :

$$2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{00} + 6 \cdot \sigma_1 \cdot \psi_{11} = 6 \cdot S_{11} \quad (4.11.c)$$

$$2 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{00} + 6 \cdot \sigma_1 \cdot \Gamma_{11} = 6 \cdot Q_{11} \quad (4.11.d)$$

Pode-se definir o fluxo total [2] como sendo dado pela integral do fluxo angular sobre todo o domínio angular, resultando, em particular para os métodos que empregam a aproximação do fluxo angular por uma expansão em funções de Legendre, em que o fluxo total será sempre dado pelo momento  $\psi_{00}$ . Isolando os momentos  $\psi_{10}$ ,  $\psi_{11}$  e  $\Gamma_{11}$  em função de  $\psi_{00}$  nas equações (4.11) acima, resulta em (4.11.a):

$$-\frac{1}{3} \cdot \nabla \cdot \left[ \frac{1}{\sigma_1} \cdot \nabla \psi_{00} \right] + \sigma_0 \cdot \psi_{00} = S^* \quad (4.12.a)$$

onde

$$S^* = S_{00} - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{S_{10}}{\sigma_1} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{S_{11}}{\sigma_1} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{Q_{11}}{\sigma_1} \right] \quad (4.12.b)$$

Desde que o termo fonte dado em (4.12.b) pode ser conhecido a partir da especificação do problema, a equação (4.12.a) pode ser solucionada diretamente, fornecendo o valor do fluxo total  $\psi_{00}$ .

Para a aproximação P3, 16 momentos surgem da expansão do fluxo:  $\psi_{00}$ ,  $\psi_{10}$ ,  $\psi_{11}$ ,  $\Gamma_{11}$ ,  $\psi_{20}$ ,  $\psi_{21}$ ,  $\Gamma_{21}$ ,  $\psi_{22}$ ,  $\Gamma_{22}$ ,  $\psi_{30}$ ,  $\psi_{31}$ ,  $\Gamma_{31}$ ,  $\psi_{32}$ ,  $\Gamma_{32}$ ,  $\psi_{33}$ ,  $\Gamma_{33}$ , e também 16 equações:

$l=0, m=0$  :

$$\frac{\partial}{\partial z}\psi_{10} + \frac{\partial}{\partial x}\psi_{11} + \frac{\partial}{\partial y}\Gamma_{11} + \sigma_0 \cdot \psi_{00} = S_{00} . \quad (4.13.a)$$

$l=1, m=0$  :

$$\frac{\partial}{\partial z}\psi_{00} + 2 \cdot \frac{\partial}{\partial z}\psi_{20} + 3 \cdot \frac{\partial}{\partial x}\psi_{21} + 3 \cdot \frac{\partial}{\partial y}\Gamma_{21} + 3 \cdot \sigma_1 \cdot \psi_{10} = 3 \cdot S_{10} . \quad (4.13.b)$$

$l=1, m=1$  :

$$\begin{aligned} 3 \cdot \frac{\partial}{\partial z}\psi_{20} + \frac{\partial}{\partial x}\psi_{00} - \frac{\partial}{\partial x}\psi_{20} + 6 \cdot \frac{\partial}{\partial x}\psi_{22} + 6 \cdot \frac{\partial}{\partial y}\Gamma_{22} + 3 \cdot \sigma_1 \cdot \psi_{11} = \\ = 3 \cdot S_{11} . \end{aligned} \quad (4.13.c)$$

$$\begin{aligned} 3 \cdot \frac{\partial}{\partial z}\Gamma_{21} + \frac{\partial}{\partial y}\psi_{00} - \frac{\partial}{\partial y}\psi_{20} + 6 \cdot \frac{\partial}{\partial x}\Gamma_{22} - 6 \cdot \frac{\partial}{\partial y}\psi_{22} + 3 \cdot \sigma_1 \cdot \Gamma_{11} = \\ = 3 \cdot Q_{11} , \end{aligned} \quad (4.13.d)$$

$l=2, m=0$  :

$$\begin{aligned} 2 \cdot \frac{\partial}{\partial z}\psi_{10} + 3 \cdot \frac{\partial}{\partial z}\psi_{30} + 6 \cdot \frac{\partial}{\partial x}\psi_{31} + 6 \cdot \frac{\partial}{\partial y}\Gamma_{31} - \frac{\partial}{\partial x}\psi_{11} - \frac{\partial}{\partial y}\Gamma_{11} \\ + 5 \cdot \sigma_2 \cdot \psi_{20} = 5 \cdot S_{20} , \end{aligned} \quad (4.13.e)$$

$l=2, m=1$  :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \psi_{11} + 4 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \psi_{31} + \frac{\partial}{\partial x} \psi_{10} - \frac{\partial}{\partial x} \psi_{30} + 10 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{32} + 10 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{32} + \\ 5 \cdot \sigma_2 \cdot \psi_{21} = 5 \cdot S_{21} , \end{aligned} \quad (4.13.f)$$

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \Gamma_{11} + 4 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \Gamma_{31} + \frac{\partial}{\partial y} \psi_{10} - \frac{\partial}{\partial y} \psi_{30} + 10 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{32} - 10 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{32} + \\ 5 \cdot \sigma_2 \cdot \Gamma_{21} = 5 \cdot Q_{21} , \end{aligned} \quad (4.13.g)$$

$l=2, m=2$  :

$$\begin{aligned} 10 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \psi_{23} + \frac{\partial}{\partial x} \psi_{11} - \frac{\partial}{\partial x} \psi_{31} - \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{11} + \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{31} + 30 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{33} + \\ 30 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{23} + 10 \cdot \sigma_2 \cdot \psi_{22} = 10 \cdot S_{22} , \end{aligned} \quad (4.13.h)$$

$$\begin{aligned} 10 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \Gamma_{23} + \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{11} - \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{31} + \frac{\partial}{\partial y} \psi_{11} - \frac{\partial}{\partial y} \psi_{31} + 30 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{33} - \\ 30 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{33} + 10 \cdot \sigma_2 \cdot \Gamma_{22} = 10 \cdot Q_{22} , \end{aligned} \quad (4.13.i)$$

$l=3, m=0$  :

$$3 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \psi_{20} - 3 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} - 3 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} + 7 \cdot \sigma_2 \cdot \psi_{30} = 7 \cdot S_{30} , \quad (4.13.j)$$

$l=3, m=1$  :

$$2 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \psi_{21} + \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} - \frac{\partial}{\partial x} \psi_{32} - \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} + 7 \cdot \sigma_2 \cdot \psi_{31} = 7 \cdot S_{31} , \quad (4.13.k)$$

$$2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} + \frac{\partial}{\partial y} \psi_{21} - \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} + \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22} + 7 \cdot \sigma_3 \cdot \Gamma_{31} = 7 \cdot Q_{31} \quad (4.13.l)$$

$l=3, m=2$  :

$$2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} + \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} - \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} + 14 \cdot \sigma_3 \cdot \psi_{22} = 14 \cdot S_{32} \quad (4.13.m)$$

$$2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} + \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} + \frac{\partial}{\partial y} \psi_{21} + 14 \cdot \sigma_3 \cdot \Gamma_{32} = 14 \cdot Q_{32} \quad (4.13.n)$$

$l=3, m=3$  :

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} - \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} + 14 \cdot \sigma_3 \cdot \psi_{23} = 14 \cdot S_{33} \quad (4.13.o)$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} + \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22} + 14 \cdot \sigma_3 \cdot \Gamma_{33} = 14 \cdot Q_{33} \quad (4.13.p)$$

Isolando-se  $\psi_{10}$  na equação (4.13.b),  $\psi_{11}$  em (4.13.c),  $\Gamma_{11}$  em (4.13.d) e substituindo em (4.13.a), obtém-se:

$$-\frac{1}{3} \cdot \nabla \cdot \left[ \left[ \frac{1}{\sigma_1} \right] \cdot \nabla \psi_{00} \right] + \sigma_0 \cdot \psi_{00} = S_{00}^* \quad (4.14)$$

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

$$\begin{aligned}
& -\frac{4}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} \right] - \frac{9}{7} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} \right] - \frac{6}{7} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} \right] \\
& -\frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} \right] - \frac{6}{7} \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{20} \right] - \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{20} \right] \\
& + 5 \cdot \sigma_2 \cdot \psi_{20} = \dot{S}_{20} .
\end{aligned} \tag{4.15}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] - \frac{8}{7} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] - \\
& -\frac{8}{7} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] - \frac{5}{7} \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{21} \right] + \\
& 5 \cdot \sigma_2 \cdot \psi_{21} = \dot{S}_{21} .
\end{aligned} \tag{4.16}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} \right] - \frac{8}{7} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} \right] - \frac{5}{7} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} \right] \\
& -\frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} \right] - \frac{8}{7} \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} \right] + \\
& 5 \cdot \sigma_2 \cdot \Gamma_{21} = \dot{Q}_{21} .
\end{aligned} \tag{4.17}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{10}{7} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{2}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} \right] - \frac{16}{7} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} \right] \\
& -\frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{2}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22} \right] - \frac{16}{7} \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22} \right] + \\
& 10 \cdot \sigma_2 \cdot \psi_{22} = \dot{S}_{22} .
\end{aligned} \tag{4.18}$$



$$\begin{aligned}
& -\frac{10}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{2}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} \right] - \frac{16}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} \right] \\
& - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{2}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} \right] - \frac{16}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} \right] + \\
& 10 \cdot \sigma_2 \cdot \Gamma_{22} = \dot{Q}_{22} \quad . \quad (4.19)
\end{aligned}$$

Nestas equações, os termos fonte são dados por:

$$\begin{aligned}
\dot{S}_{00} &= S_{00} - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{S_{10}}{\sigma_1} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{Q_{11}}{\sigma_1} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{S_{11}}{\sigma_1} \right] - \\
& \frac{1}{3} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} \right] - \frac{1}{3} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{20} \right] + \frac{2}{3} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} \right] + \\
& \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} \right] + \\
& \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} \right] - 2 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22} \right] + 2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} \right] \\
& + 2 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} \right] + 2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} \right] \quad . \quad (4.20)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_{20}^{\circ} &= 5 \cdot S_{20} - 2 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{S_{10}}{\sigma_1} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{S_{11}}{\sigma_1} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{Q_{11}}{\sigma_1} \right] - 3 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{S_{20}}{\sigma_2} \right] \\
&- 6 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{S_{21}}{\sigma_2} \right] - 6 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{Q_{21}}{\sigma_2} \right] - \frac{1}{3} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{00} \right] - \frac{1}{3} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{00} \right] \\
&+ \frac{2}{3} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial z} \psi_{00} \right] + 2 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial z} \psi_{21} \right] - \\
&\frac{9}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] + \frac{12}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial z} \psi_{21} \right] + 2 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} \right] - \\
&\frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial z} \Gamma_{21} \right] - \frac{9}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} \right] + \frac{12}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial z} \Gamma_{21} \right] + \\
&2 \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 y} \psi_{22} \right] - \frac{6}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} \right] + \\
&\frac{6}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22} \right] - 2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} \right] - 2 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} \right] - \\
&\frac{6}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} \right] - \frac{6}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} \right] , \tag{4.21}
\end{aligned}$$





É de se notar que, mesmo nos termos fonte, apenas os seis momentos destacados nas equações (4.14)–(4.19) estão presentes. A solução deste conjunto acoplado de equações de segunda ordem pode ser obtida de forma iterativa, partindo de uma estimativa inicial para os momentos. O passo seguinte será calcular os termos fonte dados em (4.20)–(4.25) e, em seguida, os novos valores para os momentos podem ser obtidos em (4.14)–(4.19), prosseguindo com o processo até que ocorra a convergência de todos os momentos.

Genericamente, as equações dos momentos (4.14)–(4.19) podem ser tratadas por:

$$\begin{aligned}
 & -\frac{\partial}{\partial x} \left[ \sigma_1 \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \sigma_2 \frac{\partial \phi}{\partial y} \right] - \frac{\partial}{\partial z} \left[ \sigma_3 \frac{\partial \phi}{\partial z} \right] + \\
 & \sigma \cdot \phi = S \quad , \quad (4.26)
 \end{aligned}$$

onde, para a aproximação P-3, os símbolos possuem o seguinte significado:

$k=0, m=0$  :

$$\phi = \phi_{00} \quad ; \quad \sigma = \sigma_0 \quad ; \quad S = S_{00}^* \quad ;$$

$$\sigma_1 = \sigma_2 = \sigma_3 = \frac{1}{3\sigma_1} \quad ;$$

$k=2, m=0$  :

$$\phi = \phi_{20} \quad ; \quad \sigma = \sigma_2 \quad ; \quad S = S_{20}^* \quad ;$$

$$\sigma_1 = \frac{1}{3\sigma_1} + \frac{6}{7\sigma_3} \quad ; \quad \sigma_2 = \frac{1}{3\sigma_1} + \frac{6}{7\sigma_3} \quad ; \quad \sigma_3 = \frac{4}{3\sigma_1} + \frac{9}{7\sigma_3} \quad ;$$

$k=2, m=1$  :

$$\begin{aligned} \phi &= \psi_{21} ; & \sigma &= \sigma_2 ; & S &= S_{21}^* ; \\ \alpha_1 &= \frac{1}{\sigma_1} + \frac{8}{7\sigma_3} ; & \alpha_2 &= \frac{5}{7\sigma_3} ; & \alpha_3 &= \frac{1}{\sigma_1} + \frac{8}{7\sigma_3} ; \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \phi &= \Gamma_{21} ; & \sigma &= \sigma_2 ; & S &= Q_{21}^* ; \\ \alpha_1 &= \frac{5}{7\sigma_3} ; & \alpha_2 &= \frac{1}{\sigma_1} + \frac{8}{7\sigma_3} ; & \alpha_3 &= \frac{1}{\sigma_1} + \frac{8}{7\sigma_3} ; \end{aligned}$$

$k=2, m=2$

$$\begin{aligned} \phi &= \psi_{22} ; & \sigma &= \sigma_2 ; & S &= S_{22}^* ; \\ \alpha_1 &= \frac{2}{\sigma_1} + \frac{16}{7\sigma_3} ; & \alpha_2 &= \frac{2}{\sigma_1} + \frac{16}{7\sigma_3} ; & \alpha_3 &= \frac{10}{7\sigma_3} ; \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \phi &= \Gamma_{22} ; & \sigma &= \sigma_2 ; & S &= Q_{22}^* ; \\ \alpha_1 &= \frac{2}{\sigma_1} + \frac{16}{7\sigma_3} ; & \alpha_2 &= \frac{2}{\sigma_1} + \frac{16}{7\sigma_3} ; & \alpha_3 &= \frac{10}{7\sigma_3} . \end{aligned}$$

Genericamente, o termo fonte pode ser tratado por:

$$S_{1m}^j = 2(2l+1)S_{1m}^j + \frac{\partial}{\partial x_0} \left[ f_{1w}^i \cdot S_{1w}^i \right] + \frac{\partial}{\partial x_0} \left[ d_{1w}^{i0i} \cdot \frac{\partial}{\partial x_c} \psi_{1w}^i \right] . \quad (4.27)$$

sendo que foi utilizada notação compacta, de tal forma que, para cada termo em que um índice se repete, está subentendida uma somatória sobre o índice [56].

Para a aproximação P3, os termos da equação (4.27) podem ser interpretados como sendo:

$$l=0, m=0 : \rightarrow j=1 \rightarrow S_{1m}^{j0} = S_{00}^0 ; S_{1m}^j = S_{00} ;$$

$$l=0, w=0 \rightarrow f_{00}^{0i} = 0 ; d_{00}^{00i} = 0 ;$$

$$l=1, \begin{cases} w=0 \rightarrow f_{10}^{01} = -2/\sigma_1 ; \\ w=1 \rightarrow f_{11}^{11} = -2/\sigma_1 ; f_{11}^{21} = -2/\sigma_1 ; \end{cases}$$

$$l=2, \begin{cases} w=0 \rightarrow d_{20}^{111} = -2/3\sigma_1 ; d_{20}^{221} = -2/3\sigma_1 ; d_{20}^{331} = 4/3\sigma_1 ; \\ w=1 \rightarrow \begin{cases} i=1 \rightarrow d_{21}^{111} = d_{21}^{211} = 2/\sigma_1 ; \\ i=2 \rightarrow d_{21}^{222} = d_{21}^{322} = 2/\sigma_1 ; \end{cases} \\ w=2 \rightarrow \begin{cases} i=1 \rightarrow d_{22}^{111} = 4/\sigma_1 ; d_{22}^{221} = -4/\sigma_1 ; \\ i=2 \rightarrow d_{22}^{222} = d_{22}^{322} = 4/\sigma_1 ; \end{cases} \end{cases}$$

$$l=2, m=0 : \rightarrow j=1 \rightarrow S_{1m}^{j0} = S_{20}^0 ; S_{1m}^j = S_{20} ;$$

$$l=0, w=0 \rightarrow d_{00}^{111} = d_{00}^{221} = -2/3\sigma_1 ; d_{00}^{331} = 4/3\sigma_1 ;$$

$$l=1, \begin{cases} w=0 \rightarrow f_{10}^{01} = -4/\sigma_1 ; \\ w=1 \rightarrow f_{11}^{11} = f_{11}^{21} = 2/\sigma_1 ; \end{cases}$$

$$t=2, \begin{cases} w=0 \rightarrow d_{20}^{001} = 0 ; \\ w=1 \rightarrow \begin{cases} i=1 \rightarrow d_{11}^{011} = 4/\sigma_1 - 18/7\sigma_3; d_{11}^{111} = 24/7\sigma_3 - 2/\sigma_1; \\ i=2 \rightarrow d_{21}^{022} = 4/\sigma_1 - 18/7\sigma_3; d_{21}^{122} = 24/7\sigma_3 - 2/\sigma_1; \end{cases} \\ w=2 \begin{cases} i=1 \rightarrow d_{11}^{111} = -4/\sigma_1 - 12/7\sigma_3; d_{11}^{211} = 12/7\sigma_3 + 4/\sigma_1; \\ i=2 \rightarrow d_{12}^{122} = -4/\sigma_1 - 12/7\sigma_3; d_{12}^{222} = -12/7\sigma_3 - 4/\sigma_1; \end{cases} \end{cases}$$

$$t=3, \begin{cases} w=0 \rightarrow f_{30}^{31} = -6/\sigma_3 ; \\ w=1 \rightarrow f_{11}^{11} = f_{11}^{22} = -12/\sigma_3 ; \end{cases}$$

$$k=2, m=1 : \rightarrow j=1 \rightarrow S_{1m}^{j0} = S_{21}^0 ; S_{1m}^j = S_{21} ;$$

$$t=0, w=0 \rightarrow d_{00}^{101} = 2/3\sigma_1; d_{00}^{211} = 2/3\sigma_1 ;$$

$$t=1, \begin{cases} w=0 \rightarrow f_{10}^{11} = -2/\sigma_1 ; \\ w=1 \rightarrow f_{11}^{21} = -2/\sigma_1 ; \end{cases}$$

$$t=2, \begin{cases} w=0 \rightarrow d_{20}^{101} = 8/7\sigma_3 - 2/3\sigma_1; d_{20}^{211} = 4/3\sigma_1 - 6/7\sigma_3; \\ w=1 \rightarrow \begin{cases} i=1 \rightarrow d_{21}^{001} = 0 ; \\ i=2 \rightarrow d_{22}^{112} = 2/\sigma_1 - 4/7\sigma_3; d_{22}^{222} = 10/7\sigma_3; \end{cases} \\ w=2 \begin{cases} i=1 \rightarrow d_{12}^{111} = 4/\sigma_1 - 8/7\sigma_3; d_{12}^{211} = 20/7\sigma_3; \\ i=2 \rightarrow d_{22}^{122} = 4/\sigma_1 - 8/7\sigma_3; d_{22}^{222} = 20/7\sigma_3; \end{cases} \end{cases}$$

$$t=3, \begin{cases} w=0 \rightarrow f_{10}^{11} = 2/\sigma_3 ; \\ w=1 \rightarrow f_{11}^{21} = -8/\sigma_3 ; \\ w=2 \rightarrow f_{12}^{11} = f_{12}^{22} = -20/\sigma_3; \end{cases}$$

$$k=2, m=1 : \rightarrow j=2 \rightarrow S_{1m}^{j0} = Q_{21}^0 ; S_{1m}^j = Q_{21} ;$$

$$t=0, w=0 \rightarrow d_{00}^{101} = 2/3\sigma_1; d_{00}^{211} = 2/3\sigma_1 ;$$



$$t=1, \begin{cases} w=0 \rightarrow f_{10}^1 = -2/\sigma_1; \\ w=1 \rightarrow f_{11}^2 = -2/\sigma_1; \end{cases}$$

$$t=2, \begin{cases} w=0 \rightarrow d_{20}^{21} = 8/7\sigma_2 - 2/3\sigma_1; & d_{22}^{21} = 2/3\sigma_1 - 6/7\sigma_2; \\ w=1 \rightarrow \begin{cases} i=1 \rightarrow d_{21}^{21} = 2/\sigma_1 - 4/7\sigma_2; & d_{22}^{21} = 10/7\sigma_2; \\ i=2 \rightarrow d_{21}^{22} = 0; \end{cases} \\ w=2 \rightarrow \begin{cases} i=1 \rightarrow d_{22}^{21} = 8/7\sigma_2 - 4/\sigma_1; & d_{22}^{22} = -20/7\sigma_2; \\ i=2 \rightarrow d_{22}^{22} = 4/\sigma_1 - 8/7\sigma_2; & d_{22}^{22} = 20/7\sigma_2; \end{cases} \end{cases}$$

$$t=3, \begin{cases} w=0 \rightarrow f_{30}^1 = 2/\sigma_3; \\ w=1 \rightarrow f_{31}^2 = -8/\sigma_3; \\ w=2 \rightarrow f_{32}^3 = -20/\sigma_3; & f_{33}^3 = 20/\sigma_3; \end{cases}$$

$$t=2, m=2: -j=1 \rightarrow S_{1m}^{j^*} = S_{22}^* ; S_{1m}^j = S_{22} ;$$

$$t=0, w=0 \rightarrow d_{00}^{11} = 1/3\sigma_1; & d_{00}^{21} = -1/3\sigma_1;$$

$$t=1, \begin{cases} w=0 \rightarrow f_{10}^1 = 0; \\ w=1 \rightarrow f_{11}^1 = -1/\sigma_1; & f_{11}^2 = 1/\sigma_1; \end{cases}$$

$$t=2, \begin{cases} w=0 \rightarrow d_{20}^{11} = -1/7\sigma_2 - 1/3\sigma_1; & d_{22}^{21} = 1/3\sigma_1 + 1/7\sigma_2; \\ w=1 \rightarrow \begin{cases} i=1 \rightarrow d_{21}^{11} = 1/\sigma_1 - 2/7\sigma_2; & d_{22}^{21} = 5/7\sigma_2; \\ i=2 \rightarrow d_{22}^{22} = 2/7\sigma_2 - 1/\sigma_1; & d_{22}^{22} = -5/7\sigma_2; \end{cases} \\ w=2 \rightarrow \begin{cases} i=1 \rightarrow d_{22}^{21} = 0; \\ i=2 \rightarrow d_{22}^{22} = 2/\sigma_1 - 2/\sigma_2; & d_{22}^{22} = -2/\sigma_1 + 2/\sigma_2; \end{cases} \end{cases}$$

$$t=3, \begin{cases} w=0 \rightarrow f_{30}^1 = 0; \\ w=1 \rightarrow f_{31}^1 = 1/\sigma_3; & f_{33}^2 = -1/\sigma_3; \\ w=2 \rightarrow f_{32}^3 = -10/\sigma_3; \\ w=3 \rightarrow f_{33}^3 = f_{33}^3 = -30/\sigma_3; \end{cases}$$

$$k=2, m=2: \rightarrow j=2 \rightarrow S_{1m}^{j*} = Q_{22}^j; S_{1m}^j = Q_{22}^j;$$

$$k=0, w=0 \quad d_{ij}^{21} = d_{ij}^{11} = 1/3\sigma_1;$$

$$k=1, \begin{cases} w=0 \rightarrow f_{10}^i = 0; \\ w=1 \rightarrow f_{11}^i = f_{11}^j = -1/\sigma_1; \end{cases}$$

$$k=2, \begin{cases} w=0 \rightarrow d_{20}^{21} = d_{20}^{11} = -1/3\sigma_1 - 1/7\sigma_2; \\ w=1 \rightarrow \begin{cases} i=1 \rightarrow d_{21}^{21} = 1/\sigma_1 - 2/7\sigma_2; d_{21}^{11} = 5/7\sigma_2; \\ i=2 \rightarrow d_{21}^{22} = 1/\sigma_1 - 2/7\sigma_2; d_{21}^{12} = 5/7\sigma_2; \end{cases} \\ w=2 \rightarrow \begin{cases} i=1 \rightarrow d_{22}^{21} = 2/\sigma_2 - 2/\sigma_1; d_{22}^{12} = 2/\sigma_1 - 2/\sigma_2; \\ i=2 \rightarrow d_{22}^{22} = 0; \end{cases} \end{cases}$$

$$k=3, \begin{cases} w=0 \rightarrow f_{30}^i = 0; \\ w=1 \rightarrow f_{31}^i = f_{31}^j = 1/\sigma_2; \\ w=2 \rightarrow f_{32}^i = -10/\sigma_2; \\ w=3 \rightarrow f_{33}^i = 30/\sigma_2; f_{33}^j = -30/\sigma_2. \end{cases}$$

Assim que o sistema de equações (4.14)–(4.19) tenha sido solucionado, deve-se reconstruir os outros momentos da expansão do fluxo por intermédio das equações abaixo:

$$\Gamma_{22} = \frac{Q_{22}}{\sigma_2} - \frac{1}{14\sigma_2} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} - \frac{1}{14\sigma_2} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22}; \quad (4.28)$$

$$\psi_{22} = \frac{S_{22}}{\sigma_2} + \frac{1}{14\sigma_2} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} - \frac{1}{14\sigma_2} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22}; \quad (4.29)$$

$$\Gamma_{32} = \frac{Q_{32}}{\sigma_2} - \frac{1}{7\sigma_2} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} - \frac{1}{14\sigma_2} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{21} - \frac{1}{14\sigma_2} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21}; \quad (4.30)$$

$$\psi_{32} = \frac{S_{32}}{\sigma_3} - \frac{1}{7\sigma_3} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \psi_{22} - \frac{1}{14\sigma_3} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} + \frac{1}{14\sigma_3} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21}; \quad (4.31)$$

$$\Gamma_{31} = \frac{Q_{31}}{\sigma_3} - \frac{2}{7\sigma_3} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \Gamma_{21} + \frac{1}{7\sigma_3} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} - \frac{1}{7\sigma_3} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{20} - \frac{1}{7\sigma_3} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22}; \quad (4.32)$$

$$\psi_{31} = \frac{S_{31}}{\sigma_3} - \frac{2}{7\sigma_3} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \psi_{21} + \frac{1}{7\sigma_3} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} - \frac{1}{7\sigma_3} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} + \frac{1}{7\sigma_3} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22}; \quad (4.33)$$

$$\psi_{30} = \frac{S_{30}}{\sigma_3} - \frac{3}{7\sigma_3} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \psi_{20} + \frac{3}{7\sigma_3} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} + \frac{3}{7\sigma_3} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21}; \quad (4.34)$$

$$\Gamma_{11} = \frac{Q_{11}}{\sigma_1} - \frac{1}{\sigma_1} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \Gamma_{21} - \frac{2}{\sigma_1} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} - \frac{1}{3\sigma_1} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{00} + \frac{1}{3\sigma_1} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{20} + \frac{2}{\sigma_1} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22}; \quad (4.35)$$

$$\psi_{11} = \frac{S_{11}}{\sigma_1} - \frac{1}{\sigma_1} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \psi_{21} - \frac{2}{\sigma_1} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} - \frac{1}{3\sigma_1} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{00} + \frac{1}{3\sigma_1} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} - \frac{2}{\sigma_1} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22}; \quad (4.36)$$

$$\psi_{10} = \frac{S_{10}}{\sigma_1} - \frac{1}{\sigma_1} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} - \frac{1}{\sigma_1} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} - \frac{1}{3\sigma_1} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \psi_{00} - \frac{2}{3\sigma_1} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \psi_{20}. \quad (4.37)$$

O programa computacional ETEFEB para solução da equação de transporte tridimensional, apresentado no próximo capítulo, soluciona as aproximações P1 e P3. O Apêndice 5 apresenta as equações desenvolvidas para a aproximação P5.

## CAPÍTULO 5

### MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS APLICADO ÀS EQUAÇÕES "TIPO DIFUSÃO"

No capítulo anterior foi desenvolvido um conjunto acoplado de equações diferenciais de segunda ordem para os momentos  $\psi$  e  $\Gamma$  que surgem da expansão do fluxo em harmônicos esféricos. Estas equações são classificadas matematicamente como equações diferenciais elípticas [53], sendo, no entanto, aqui denominadas simplesmente "equações tipo difusão" devido à semelhança matemática com a equação de difusão. Deste modo, considere a equação "tipo difusão" genérica

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[ a_1 \frac{\partial \phi}{\partial x} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[ a_2 \frac{\partial \phi}{\partial y} \right] - \frac{\partial}{\partial z} \left[ a_3 \frac{\partial \phi}{\partial z} \right] + \sigma \phi = S \quad (5.1)$$

Para solucionar a equação acima pelo método dos elementos finitos, o domínio deve ser subdividido em NE elementos e o momento genérico  $\phi$  deve ser expandido em funções base definidas localmente nestes elementos:

$$\phi(x,y,z) \approx \bar{\phi}(x,y,z) = \sum_{i=1}^N a_i \cdot N_i(x,y,z) \quad (5.2)$$

Em cada um destes elementos, os parâmetros físicos (seções de choque) podem variar, desde que o grau de variação seja igual ou inferior ao grau do polinômio interpolador em que foi expandido o momento  $\phi$ . No entanto, por questões de simplicidade, este trabalho apenas considera a aproximação mais simples, ou seja, os parâmetros físicos permanecem

constantes em cada elemento. Substituindo a aproximação (5.2) na equação (5.1), surge um resíduo decorrente da aproximação do momento, ou seja,

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[ \sigma_1 \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial x} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \sigma_2 \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial y} \right] - \frac{\partial}{\partial z} \left[ \sigma_3 \frac{\partial \bar{\phi}}{\partial z} \right] + \sigma \bar{\phi} - S = R \quad (5.3)$$

Quanto melhor for a aproximação (5.2), tanto menor deverá ser o resíduo  $R$  dado pela equação acima. A técnica de Resíduos Ponderados propõe multiplicar a equação (5.3) por uma função ponderação e integrar no domínio do problema, fazendo com que o resultado obtido seja igual a zero. Logo, multiplicando a equação (5.3) por uma função ponderação  $W_j$  e integrando no domínio, obtem-se:

$$-\sum_{i=1}^n a_i \int_V \nabla \left[ \sigma_1 \frac{\partial N_i}{\partial x}, \sigma_2 \frac{\partial N_i}{\partial y}, \sigma_3 \frac{\partial N_i}{\partial z} \right] W_j d\Omega + \sum_{i=1}^n a_i \int_V \sigma \cdot N_i \cdot W_j d\Omega = \int_V S W_j d\Omega \quad (5.4)$$

Diversas escolhas podem ser realizadas para a função ponderação. Neste trabalho, a escolha de Galerkin é adotada por sua simplicidade e bons resultados apresentados na grande maioria dos casos em que é aplicada [53]. Com esta escolha, a própria função de interpolação é adotada como função ponderadora.

Outro detalhe a se acrescentar, refere-se ao número de funções ponderação adotadas. Na expansão do momento  $\phi$  em funções base, foram introduzidas  $M$  incógnitas no problema. Também  $M$  funções interpoladoras surgem de modo que deve-se providenciar  $M$  funções ponderadoras. Pela escolha de Galerkin, estas funções são automaticamente selecionadas. Assim, substituindo esta escolha na equação (5.4), e aplicando-se o teorema de Gauss à equação resultante, obtém-se:

$$\begin{aligned}
 -a_i \left\{ \int_V a_c \frac{\partial}{\partial x_c} N_i \cdot \frac{\partial}{\partial x_c} N_j dV + \int_V \sigma \cdot N_i \cdot N_j dV - \int_A a_c \cdot n_c \cdot N_j \frac{\partial}{\partial x_c} N_i dA \right\} = \\
 = \int_V S N_j dV, \quad j = 1, \dots, M
 \end{aligned} \tag{5.5}$$

onde foi adotada a mesma notação compacta apresentada no capítulo anterior, ou seja, há uma somatória implícita sobre cada índice que se repete em cada termo.

A equação (4.27) do capítulo anterior ressalta que o termo fonte engloba todos os momentos da expansão original do fluxo. Desta forma, substituindo (4.27) na equação acima, tem-se, para o termo fonte:

$$\begin{aligned}
 \int_V S N_j dV = 2(2l+1) \int_V S_{lm}^i N_j dV + \int_V \frac{\partial}{\partial x_a} \left[ t_{tw}^i \cdot S_{tw}^i \right] N_j dV + \\
 \int_V \frac{\partial}{\partial x_a} \left[ d_{tw}^{sei} \cdot \frac{\partial}{\partial x_c} \psi_{tw}^i \right] N_j dV,
 \end{aligned} \tag{5.6}$$

e, após alguma manipulação algébrica, inclusive com a aplicação do teorema de Gauss, obtém-se:

$$\begin{aligned} \int_V S N_j dV &= 2(2l+1) \int_V S_{1m}^r N_j dV - \int_V f_{tw}^{e_i} \cdot S_{tw}^i \cdot \frac{\partial}{\partial x_e} N_j dV - \\ &\int_V d_{tw}^{sei} \cdot \frac{\partial}{\partial x_e} \psi_{tw}^i \cdot \frac{\partial}{\partial x_e} N_j dV + \int_A f_{tw}^{e_i} \cdot S_{tw}^i \cdot N_j \cdot n_e dA + \\ &\int_A d_{tw}^{sei} \cdot N_j \cdot n_e \cdot \frac{\partial}{\partial x_e} \psi_{tw}^i dA \end{aligned} \quad (5.7)$$

O passo seguinte na aplicação do método dos elementos finitos às equações tipo difusão é subdividir o domínio em NE elementos e impor que cada função ponderadora seja diferente de zero apenas em um determinado elemento e em seus vizinhos contíguos. Com esta aproximação, a equação (5.5) finalmente resulta em:

$$\begin{aligned} - \sum_{e=1}^{NE} \sigma_e \left\{ \int_{V_e} \sigma_e \frac{\partial}{\partial x_e} N_j \cdot \frac{\partial}{\partial x_e} N_j dV_e + \int_{V_e} \sigma_e \cdot N_j \cdot N_j dV_e - \int_{A_e} \sigma_e \cdot n_e \cdot N_j \frac{\partial}{\partial x_e} N_j dA_e \right\} = \\ = 2(2l+1) \sum_{e=1}^{NE} \int_{V_e} S_{1m}^r N_j dV_e - \sum_{e=1}^{NE} \int_{V_e} f_{tw}^{e_i} \cdot S_{tw}^i \cdot \frac{\partial}{\partial x_e} N_j dV_e + \sum_{e=1}^{NE} \int_{A_e} f_{tw}^{e_i} \cdot S_{tw}^i \cdot N_j \cdot n_e dA_e \\ - \sum_{e=1}^{NE} \int_{V_e} d_{tw}^{sei} \cdot \frac{\partial}{\partial x_e} \psi_{tw}^i \cdot \frac{\partial}{\partial x_e} N_j dV_e + \sum_{e=1}^{NE} \int_{A_e} d_{tw}^{sei} \cdot N_j \cdot n_e \cdot \frac{\partial}{\partial x_e} \psi_{tw}^i dA_e \end{aligned} \quad (5.8)$$

Na equação acima, as integrais de superfície apenas serão necessárias nos elementos que pertencem ao contorno.



Os elementos em que o domínio é dividido, no caso específico deste trabalho, são tetraedricos. Estes elementos recebem uma numeração local (1-2-3-4) de tal forma que, quando observados a partir do nó de número 4, a sequência de nós, 1-2-3, deve se apresentar no sentido anti-horário (orientação positiva), como pode ser visto na figura 5.1 abaixo.

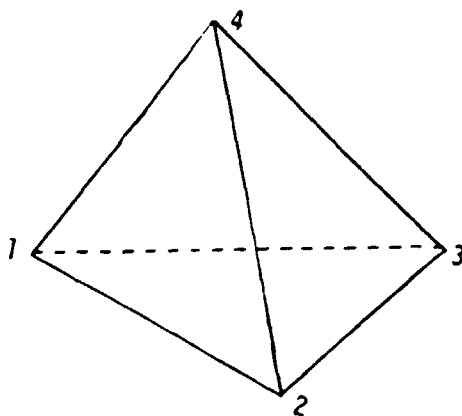


FIGURA 5.1 - DISPOSIÇÃO DOS NÓS NO TETRAEDRO

Com o elemento definido desta forma, as funções interpolantes deverão ser constantes ou lineares, a fim de garantir a compatibilidade da solução e, portanto, a convergência da mesma. Neste caso, como o funcional da equação "tipo difusão" possui derivadas de segunda ordem, funções interpolantes de primeira ordem garantem também a completude da solução, portanto a convergência monotônica da solução numérica [29].  
Adotando funções interpolantes lineares:

$$\begin{aligned}
 N_1 &= (\epsilon_1 + \beta_1 \cdot x + \gamma_1 \cdot y + \delta_1 \cdot s) , \\
 N_2 &= (\epsilon_2 + \beta_2 \cdot x + \gamma_2 \cdot y + \delta_2 \cdot s) , \\
 N_3 &= (\epsilon_3 + \beta_3 \cdot x + \gamma_3 \cdot y + \delta_3 \cdot s) , \\
 N_4 &= (\epsilon_4 + \beta_4 \cdot x + \gamma_4 \cdot y + \delta_4 \cdot s) ,
 \end{aligned}
 \tag{5.9}$$

onde o sub-índice (1, 2, 3, 4) denota a qual dos nós cada função interpolante está associada. Para se determinar o valor dos coeficientes ( $\epsilon$ ,  $\beta$ ,  $\gamma$ ,  $\delta$ ), estipula-se que cada função interpolante deva ser igual a um (1) no nó associado a esta função e zero (0) nos demais, ou seja,  $N_i(x_j, y_j, s_j) = \delta_{ij}$ . Desta forma, pode-se escrever

$$\begin{vmatrix} 1 & x_1 & y_1 & s_1 \\ 1 & x_2 & y_2 & s_2 \\ 1 & x_3 & y_3 & s_3 \\ 1 & x_4 & y_4 & s_4 \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \epsilon_1 \\ \beta_1 \\ \gamma_1 \\ \delta_1 \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{vmatrix}$$

para o nó  $\underline{1}$  e equações matriciais semelhantes para os demais nós do elemento tetraédrico. Resolvendo o sistema de equações acima de forma genérica, obtém-se:

$$\epsilon_i = [x_j(y_k s_l - y_l s_k) + x_k(y_l s_j - y_j s_l) + x_l(y_j s_k - y_k s_j)] / \Delta^0 ,$$

$$\beta_i = [y_j(s_l - s_k) + y_k(s_j - s_l) + y_l(s_k - s_j)] / \Delta^0 ,$$

$$\gamma_i = [x_j(s_k - s_l) + x_k(s_l - s_j) + x_l(s_j - s_k)] / \Delta^0 ,$$

$$\delta_i = [x_j(y_k - y_l) + x_k(y_l - y_j) + x_l(y_j - y_k)] / \Delta^0 ,$$

onde  $\Delta^* = [(x_j - x_i)(y_k s_l - y_l s_k) + (x_l - x_i)(y_j s_k - y_k s_j) + (x_k - x_i)(y_l s_j - y_j s_l) + (x_l - x_j)(y_k s_l - y_l s_k) + (x_k - x_j)(y_l s_i - y_l s_i) + (x_l - x_k)(y_j s_i - y_j s_i)]$  ou  $|\Delta^*|$  é igual a seis vezes o volume do tetraedro definido pelos nós 1-2-3-4.

Com todas estas aproximações, o lado esquerdo da equação (5.8) resulta em

$$LE = \alpha_i \left\{ \frac{(\alpha_1 \beta_i \beta_j + \alpha_2 \gamma_i \gamma_j + \alpha_3 \delta_i \delta_j) \Delta^*}{6} + \frac{(1 + \delta_{ij}) \sigma^* \Delta^*}{120} - \alpha_c^* \cdot n_c \int_{A^*} N_i^* \frac{\partial}{\partial x_c} N_i^* dA^* \right\} \quad (5.10)$$

Este último termo depende das condições de contorno do problema, que serão assumidas [38, 39, 40, 41, 42, 43]:

i) vácuo ou superfície livre:

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \psi_{00} = -3\lambda \cdot \sigma_0 \cdot \psi_{00} \quad , \quad \text{para qualquer } \lambda \quad ,$$

$$\psi_{lm} = 0 \quad , \quad l, m \neq 0 \quad ;$$

ii) fluxo contínuo nas interfaces: já garantido pela escolha das funções base locais.

Nas referências [38, 39, 40, 41, 42, 43] é apresentado um terceiro tipo de condição de contorno: reflexão. Entretanto, esta condição de contorno não é de simples interpretação, tendo surgido dúvidas quanto à sua aplicabilidade. Por este motivo, no

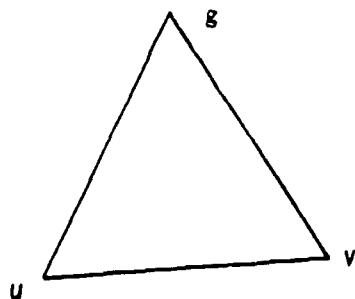
escopo principal deste trabalho apenas são abordadas as duas condições indicadas acima, apresentado-se o tratamento de contornos refletidos no apêndice 6.

## 5.1 TRATAMENTO DAS CONDIÇÕES DE CONTORNO

No primeiro caso, ou seja, superfície livre, tem-se, para o momento  $\psi_0$ ,  $\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = \frac{1}{3\sigma_1}$  :

$$\begin{aligned}
 I &= \alpha_c^e \cdot n_c \int_{A^e} N_j \frac{\partial}{\partial x_c} N_i^e dA^e = - \int_{A^e} \frac{1}{3\sigma_1} N_j (\nabla N_i) \cdot n dA^e = \\
 &= \lambda \left[ \frac{\sigma_1}{\sigma_1} \right] \int_{A^e} N_i \cdot N_j dA^e . \quad (5.11)
 \end{aligned}$$

Supondo que a superfície plana definida pelos nós  $u, v, g$  (que devem apresentar-se no sentido anti-horário nesta ordem) pertença ao contorno, pode-se escrever:



$$N_u = 1 - \xi_1 - \xi_2$$

$$N_v = \xi_1$$

$$N_g = \xi_2$$

com  $0 \leq \xi_1, \xi_2 \leq 1$  e  $\xi_1 + \xi_2 \leq 1$ . Desta forma,

$$\int_{A^0} N_i(x,y,z) \cdot N_j(x,y,z) dA^0 = \int_0^1 \int_0^{1-\xi_1} J \cdot N_i(\xi_1, \xi_2) \cdot N_j(\xi_1, \xi_2) d\xi_1 d\xi_2 = \frac{(1+\delta_{ij})}{24} \bullet, \quad (5.12)$$

onde  $J = \bullet$  é o Jacobiano da transformação, que por sua vez pode ser dado pela razão entre a área da superfície de contorno e a "área" após a mudança devido à parametrização, ou seja:

$$\begin{aligned} \bullet &= \frac{\int dA}{\int_0^1 \int_0^{1-\xi_1} d\xi_1 d\xi_2} = \\ &= [(x_v - x_u)(y_g - y_u + z_u - z_g) + (z_v - z_u)(x_g - x_u + y_u - y_g) \\ &\quad + (y_v - y_u)(z_g - z_u + x_u - x_g)] . \end{aligned} \quad (5.13)$$

Assim, para o momento  $\psi_{00}$ , a equação (5.10) resulta em

$$\begin{aligned} LE = s_i \left\{ \frac{(\beta_i \beta_j + \gamma_i \gamma_j + \delta_i \delta_j) \Delta^0}{6 \sigma \tau} + \frac{(1+\delta_{ij}) \sigma^0 \Delta^0}{120} + \right. \\ \left. \lambda \left[ \frac{\sigma^0}{\sigma \tau} \right] \frac{(1+\delta_{ij}) \Delta^0}{24} \right\} . \end{aligned} \quad (5.14)$$

Para os demais momentos da expansão do fluxo,  $\psi_n = 0$  no contorno (condição de contorno de Dirichlet). Esta condição é implementada por meio de uma alteração na matriz dos coeficientes  $\underline{K}$  e no termo fonte  $\underline{S}$ , após a montagem destes levando em conta todos os elementos (vide Capítulo 3). Esta alteração pode ser realizada da seguinte forma:

1. Todos os componentes do termo fonte, internos ou com condição de contorno outra que não Dirichlet, devem ser alterados por:

$$S_j = S_j - \sum_{i=1}^k k_{ij} \cdot a_i , \quad (5.15)$$

com  $k_{ij}$  sendo o componente  $(i,j)$  da matriz original;

2. Para todos os nós especificados (Dirichlet), substitui-se no termo fonte o valor zero (0);

3. A coluna  $i$ ésima e a linha  $i$ ésima da matriz são zerados, e o elemento  $k_{ii}$  é substituído por um (1), onde  $i$  indica um nó com contorno tipo Dirichlet.

## 5.2 TRATAMENTO DO TERMO FONTE

Como passo seguinte, deve-se trabalhar com o lado direito da equação (5.8), ou seja, com o termo fonte:

$$\begin{aligned}
 \int_{V^0} S_{10}^{0r} N_k^0 dV^0 &= 2(2l+1) \int_{V^0} S_{10}^r N_k dV^0 - \int_{V^0} f_{tw}^{0i} \cdot S_{tw}^i \cdot \frac{\partial}{\partial x_0} N_k dV^0 \\
 &- \int_{V^0} d_{tw}^{0e1} \cdot \frac{\partial}{\partial x_c} \psi_{tw}^1 \cdot \frac{\partial}{\partial x_0} N_k dV^0 + \int_{A^0} f_{tw}^{0i} \cdot S_{tw}^i \cdot N_k \cdot n_e dA^0 \\
 &+ \int_{A^0} d_{tw}^{0e1} \cdot N_k \cdot n_e \cdot \frac{\partial}{\partial x_c} \psi_{tw}^1 dA^0 \quad (5.16)
 \end{aligned}$$

Deade que  $N_{\xi} = (\epsilon_{\xi} + \beta_{\xi} \cdot x + \gamma_{\xi} \cdot y + \delta_{\xi} \cdot z)$ ,  $f_{tw}^{000} = cte^0$ ,  $S_{tw}^0 = cte^0$ ,  $d_{tw}^{000} = cte^0$ ,  $\psi_{tw}^0 = \sum_i a_i^{00} N_i$ , chega-se a

$$\begin{aligned}
 LD &= 2(2l+1) S_{10}^{0r} \int_{V^0} N_k^0 dV^0 - f_{tw}^{000} \cdot S_{tw}^{r0} \int_{V^0} \frac{\partial}{\partial x_0} N_k^0 dV^0 - \\
 &a_{tw}^{000} d_{tw}^{000} \int_{V^0} \frac{\partial}{\partial x_c} N_i \frac{\partial}{\partial x_0} N_k^0 dV^0 + f_{tw}^{000} \cdot S_{tw}^{r0} \cdot n_e \int_{A^0} N_k^0 dA^0 \\
 &+ a_{tw}^{000} d_{tw}^{000} n_e \int_{A^0} N_k^0 \cdot \frac{\partial}{\partial x_c} N_i^0 dA^0 =
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{2(2l+1) S_{i_0}^{\circ\circ} \Delta^\circ}{24} - \frac{f_{i_0}^{\circ\circ\circ} S_{i_0}^{\circ\circ} \Delta^\circ \beta_{e_j}}{6} \\
&- \frac{a_{i_0}^i d_{i_0}^{\circ\circ\circ} \Delta^\circ \beta_{e_j} \beta_{c_i}}{6} + \frac{f_{i_0}^{\circ\circ\circ} n_e \bullet \bullet S_{i_0}^{\circ\circ}(\Gamma)}{6} \\
&+ a_{i_0}^i d_{i_0}^{\circ\circ\circ} n_e \int_{A^\circ} N_j \frac{\partial}{\partial x_c} N_i dA^\circ, \quad (5.17)
\end{aligned}$$

onde  $S_{i_0}^{\circ\circ}(\Gamma)$  é o termo fonte externa calculado no contorno do domínio, e ainda  $\beta_{i_1} = \beta_j^\circ$ ,  $\beta_{i_2} = \gamma_j^\circ$ ,  $\beta_{i_3} = \delta_j^\circ$ . O último termo acima também deve ser avaliado no contorno. Para tanto, deve-se proceder de forma análoga à desenvolvida anteriormente para se chegar às equações (5.12), (5.14):

$$\int_{A^\circ} N_j \frac{\partial}{\partial x_c} N_i dA^\circ = \int_0^1 \int_0^{1-\xi_1} J N_j(\xi_1, \xi_2) \frac{\partial}{\partial x_c} N_i(\xi_1, \xi_2) d\xi_1 d\xi_2, \quad (5.18)$$

onde  $J = \bullet$  é o Jacobiano da transformação. A relação entre as coordenadas pode ser dada por

$$\begin{aligned}
x &= x_u + (x_v - x_u)\xi_1 + (x_g - x_u)\xi_2; \\
y &= y_u + (y_v - y_u)\xi_1 + (y_g - y_u)\xi_2; \\
s &= s_u + (s_v - s_u)\xi_1 + (s_g - s_u)\xi_2;
\end{aligned} \quad (5.19)$$

logo,



$$\xi_1 = \frac{y(x_g - x_u) + y_u(x - x_g) + y_g(x_u - x)}{y_v(x_g - x_u) + y_u(x_v - x_g) + y_g(x_u - x_v)} ;$$

$$\xi_2 = \frac{y(x_v - x_u) + y_u(x - x_v) + y_v(x_u - x)}{y_g(x_v - x_u) + y_u(x_g - x_v) + y_v(x_u - x_g)} ; \quad (5.20)$$

$$x = \frac{(x_g y_v - x_v y_g)(z - z_u) + (x_v y_u - x_u y_v)(z - z_g) + (x_u y_g - x_g y_u)(z - z_v)}{(y_u - y_g)(z_v - z_u) + (y_u - y_v)(z_u - z_g)} + \frac{y[x_g(z_v - z_v) + x_u(z_v - z_g) + x_v(z_g - z_u)]}{(y_u - y_g)(z_v - z_u) + (y_u - y_v)(z_u - z_g)}$$

Desta forma,  $\xi_1 = \xi_1(x(y, z), y)$ ;  $\xi_2 = \xi_2(x(y, z), y)$  e, portanto,

$$\frac{\partial N}{\partial x} = \frac{\partial N}{\partial \xi_1} \frac{\partial \xi_1}{\partial x} + \frac{\partial N}{\partial \xi_2} \frac{\partial \xi_2}{\partial x} ;$$

$$\frac{\partial N}{\partial y} = \frac{\partial N}{\partial \xi_1} \frac{\partial \xi_1}{\partial y} + \frac{\partial N}{\partial \xi_2} \frac{\partial \xi_2}{\partial y} ; \quad (5.21)$$

$$\frac{\partial N}{\partial z} = \frac{\partial N}{\partial \xi_1} \frac{\partial \xi_1}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial z} + \frac{\partial N}{\partial \xi_2} \frac{\partial \xi_2}{\partial x} \frac{\partial x}{\partial z}$$

A derivada presente em (5.17) é dada por

$$\frac{\partial}{\partial x_c} \psi_{iw}^0 = a_{iw}^i \frac{\partial}{\partial x_c} N_i = a_{iw}^u \frac{\partial}{\partial x_c} N_u + a_{iw}^v \frac{\partial}{\partial x_c} N_v + a_{iw}^g \frac{\partial}{\partial x_c} N_g \Rightarrow$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi_{iw}^0 = \frac{(y_u - y_g)(a_{iw}^v - a_{iw}^g)}{y_v(x_g - x_u) + y_u(x_v - x_g) + y_g(x_u - x_v)} ;$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial y} \psi_{iw}^0 = \frac{(x_v - x_g) a_{iv}^u + (x_g - x_u) a_{iv}^v + (x_u - x_v) a_{iv}^g}{y_v(x_g - x_u) + y_u(x_v - x_g) + y_w(x_u - x_v)} ; \quad (5.22)$$

$$\Rightarrow \frac{\partial}{\partial z} \psi_{iw}^0 = \frac{(y_u - y_g)(a_{iv}^v - a_{iv}^g)}{y_v(x_g - x_u) + y_u(x_v - x_g) + y_g(x_u - x_v)}$$

$$= \frac{x_g(y_v - y_u) + x_v(y_u - y_g) + x_u(y_g - y_v)}{(y_u - y_g)(z_v - z_u) + (y_u - y_v)(z_u - z_g)}$$

Estas aproximações são válidas no caso da face em questão não ser paralela a nenhum dos planos ortogonais. Analisando cada um dos casos especiais em separado:

1- face paralela a Oyz ( $n_x = n_z = 0$ )

$$\frac{\partial}{\partial x} N_i = 0, \forall i \Rightarrow \frac{\partial}{\partial x} \psi_{iw}^0 = 0 ;$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \psi_{iw}^0 = \frac{(z_g - z_v) a_{iv}^u + (z_u - z_g) a_{iv}^v + (z_v - z_u) a_{iv}^g}{(y_g - y_u)(z_v - z_u) - (y_v - y_u)(z_g - z_u)} ;$$

$$\frac{\partial}{\partial z} \psi_{iw}^0 = \frac{(y_v - y_g) a_{iv}^u + (y_g - y_u) a_{iv}^v + (y_u - y_v) a_{iv}^g}{(y_g - y_u)(z_v - z_u) - (y_v - y_u)(z_g - z_u)} ;$$

2- face paralela a Oxz ( $n_y = n_z = 0$ )

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi_{iw}^0 = \frac{(z_g - z_v) a_{iv}^u + (z_u - z_g) a_{iv}^v + (z_v - z_u) a_{iv}^g}{(x_g - x_u)(z_v - z_u) - (x_v - x_u)(z_g - z_u)} ;$$

$$\frac{\partial}{\partial y} N_i = 0, \forall i \Rightarrow \frac{\partial}{\partial y} \psi_{iw}^0 = 0 ;$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi_{tw}^e = \frac{(x_v - x_u) \Delta_{tw}^u + (x_u - x_w) \Delta_{tw}^v + (x_w - x_v) \Delta_{tw}^s}{(x_u - x_v)(y_v - y_u) - (x_v - x_w)(y_u - y_w)}$$

3- face paralela a Oxy ( $n_x = n_y = 0$ )

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi_{tw}^e = \frac{(y_u - y_v) \Delta_{tw}^u + (y_v - y_w) \Delta_{tw}^v + (y_w - y_u) \Delta_{tw}^s}{(x_u - x_v)(y_v - y_u) - (x_v - x_w)(y_u - y_w)}$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \psi_{tw}^e = \frac{(x_u - x_v) \Delta_{tw}^u + (x_w - x_u) \Delta_{tw}^v + (x_v - x_w) \Delta_{tw}^s}{(x_u - x_v)(y_v - y_u) - (x_v - x_w)(y_u - y_w)}$$

$$\frac{\partial}{\partial x} N_i = 0, \forall i \Rightarrow \frac{\partial}{\partial x} \psi_{tw}^e = 0$$

Este termo, relacionado com a derivada da função interpolante, é, para qualquer caso, uma constante ( $\Lambda_{tw}^s$ ), que pode ser retirada da integral última da equação (5.18), restando neste termo apenas a integral na superfície da função interpolante, que já foi avaliada anteriormente, resultando em  $\int_{A^e} N_i^* dA^e = \frac{\sigma_i}{6}$ . Desta forma, a equação

(5.8) para um único elemento resulta em:

$$a_i \left\{ \frac{(\alpha_1 \beta_i \beta_j + \alpha_2 \gamma_i \gamma_j + \alpha_3 \delta_i \delta_j) \Delta}{6} + \frac{(1 + \delta_{ij}) \sigma_i \Delta}{120} + \lambda \left[ \frac{\sigma_0}{\sigma_i} \right] \frac{(1 + \delta_{ij}) \bullet}{24} \right\} =$$

$$\begin{aligned}
&= \frac{[2(2l+1)/(1+\delta_{l,0})] S_{l,0} \Delta}{24} - \frac{f_{l,0} \Delta S_{l,0} \beta_{e,j}}{6} - \\
&\frac{n_{l,0} d_{l,0} \Delta \beta_{e,j} \beta_{c,i}}{6} + \frac{f_{l,0} n_{e,0} \bullet S_{l,0}(\Gamma)}{6} \\
&+ \frac{\Lambda_{l,0} d_{l,0} n_{e,0} \bullet}{6} \quad (5.23)
\end{aligned}$$

### 5.3 PROGRAMA ETEFEH

Do desenvolvimento analítico deste capítulo e do anterior, resultou o programa ETEFEH (Equação de Transporte, Elementos Finitos, Esféricos Harmônicos) para solução da equação de transporte em três dimensões e um grupo de energia. O esquema geral do programa é apresentado a seguir, bem como uma descrição geral das principais rotinas do mesmo.

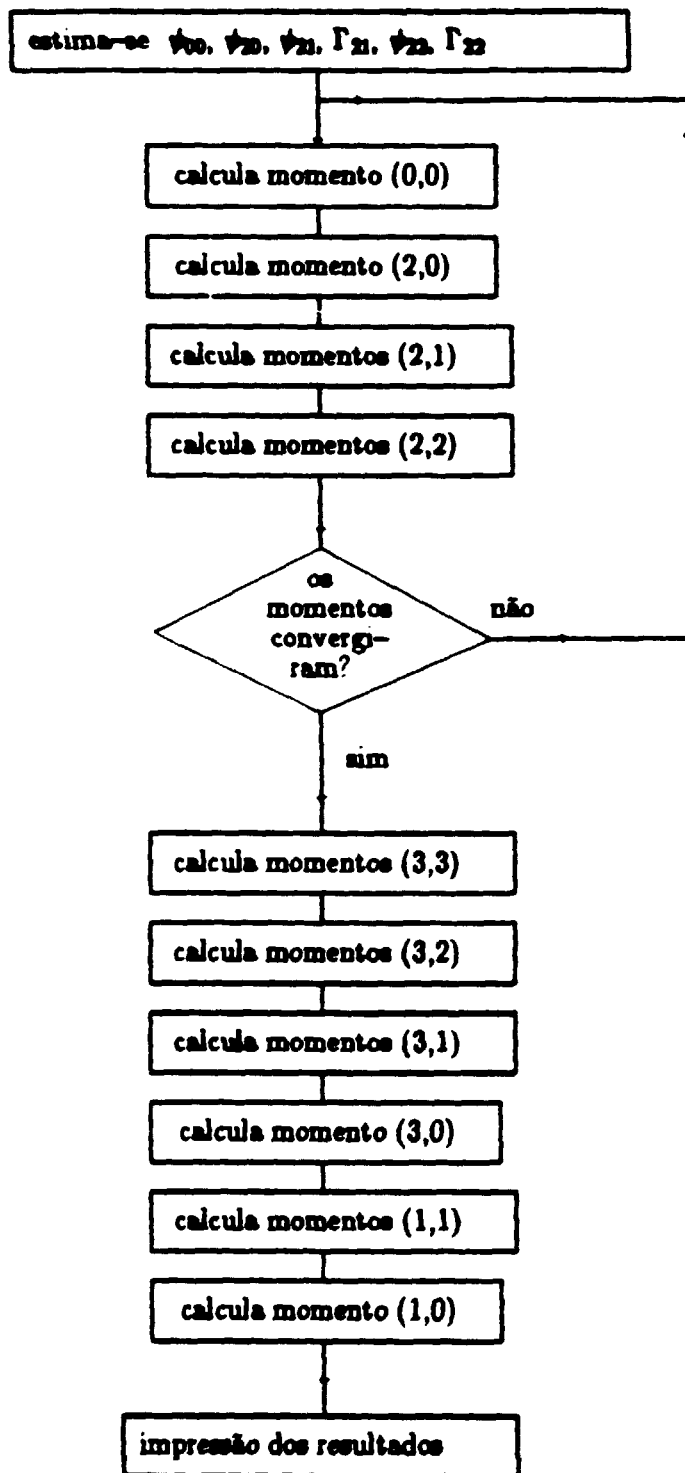


FIGURA 5.2 - DESCRIÇÃO DO PROGRAMA

Na figura 5.2 anterior, é descrito o funcionamento do programa ETEFEH. Este programa é composto de diversas subrotinas, estando as principais destacadas a seguir:

**TABELA 5.1 DESCRIÇÃO DAS ROTINAS DO PROGRAMA ETEFEH**

| subrotina     | função  |
|---------------|---|
| <b>INICIA</b> | leitura dos dados   |
| <b>MMM</b>    | gerencia montagem da matriz dos coeficientes                |
| <b>MATEL</b>  | calcula a matriz <b>K</b> para cada elemento                |
| <b>FACTOR</b> | inverte a matriz dos momentos                               |
| <b>NTP</b>    | gerencia a montagem do termo fonte                          |
| <b>CALCON</b> | fornece as constantes de acordo com o momento               |
| <b>PONEL</b>  | calcula o termo fonte para cada elemento                    |
| <b>CNM</b>    | recalcula o momento a partir de <b>FACTOR</b> e <b>N1'F</b> |
| <b>RECMOM</b> | reconstroi os momentos da expansão original                 |
| <b>SAIDA</b>  | apresenta os resultados finais                              |

## CAPÍTULO 6

### RESULTADOS NUMÉRICOS

O programa ETEFEH foi submetido a diversos testes, devendo-se ressaltar a dificuldade em se obter um problema padrão na literatura ou um código tridimensional de solução da equação de transporte. Desta forma, é apresentado um problema solucionado pelo programa utilizando os recursos e conhecimentos disponíveis no presente momento. Para outros problemas, consultar o apêndice 6 do presente trabalho.

#### PROBLEMA TESTE

Solucionar a equação de transporte em geometria tridimensional em um cubo subdividido em duas regiões homogêneas, sendo que na região interior o mesmo apresenta fonte constante  $S = 1,0E05 \text{ cm}^{-2}\text{s}^{-1}$ . As constantes físicas são idênticas nas duas regiões, sendo dadas por  $\Sigma_t = 1 \text{ cm}^{-1}$ ;  $\Sigma_{\text{cap}} = 0,9 \text{ cm}^{-1}$ ;  $\lambda = 0,5$ .

A figura 6.1 representa a modelagem (7x7x7 elementos hexaédricos que serão posteriormente subdivididos em 2058 elemento tetraédricos) do problema que está sendo analisado. As dimensões externas do cubo são de 0,7 cm, enquanto que um cubo interno apresenta-se centralizado com 0,3 cm de lado. Considera-se que a convergência dos momentos tenha sido atingida quando a máxima variação relativa entre duas iterações em qualquer nó não seja superior a 0,001. As figuras 6.2 e 6.3 a seguir apresentam, respectivamente, a evolução da máxima variação relativa para os momentos (00) e (20) com o passar das iterações. Pode-se verificar que o momento (00) apresenta convergência já na quinta iteração, enquanto que o momento (20) vem a convergir apenas na sétima iteração.

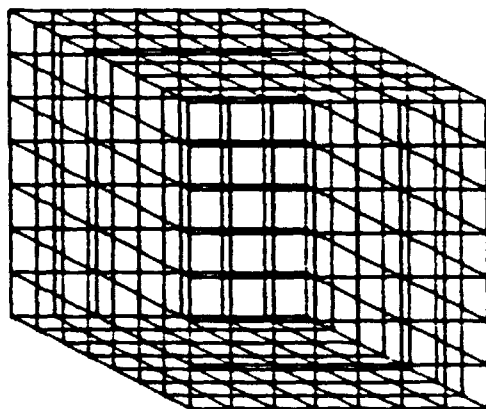


FIGURA 6.1 – MODELAGEM DO PROBLEMA TESTE

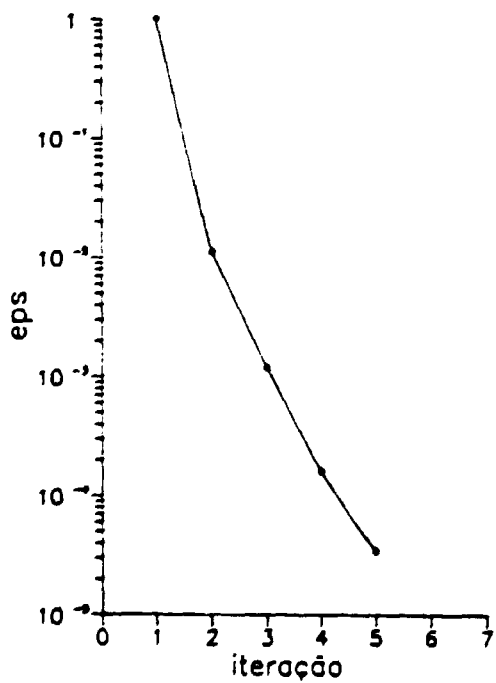
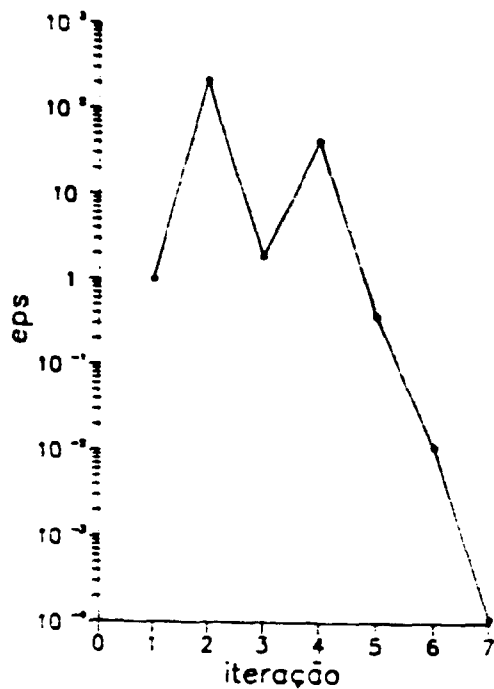


FIGURA 6.2 – CONVERGÊNCIA DO MOMENTO  $\Psi_{00}$

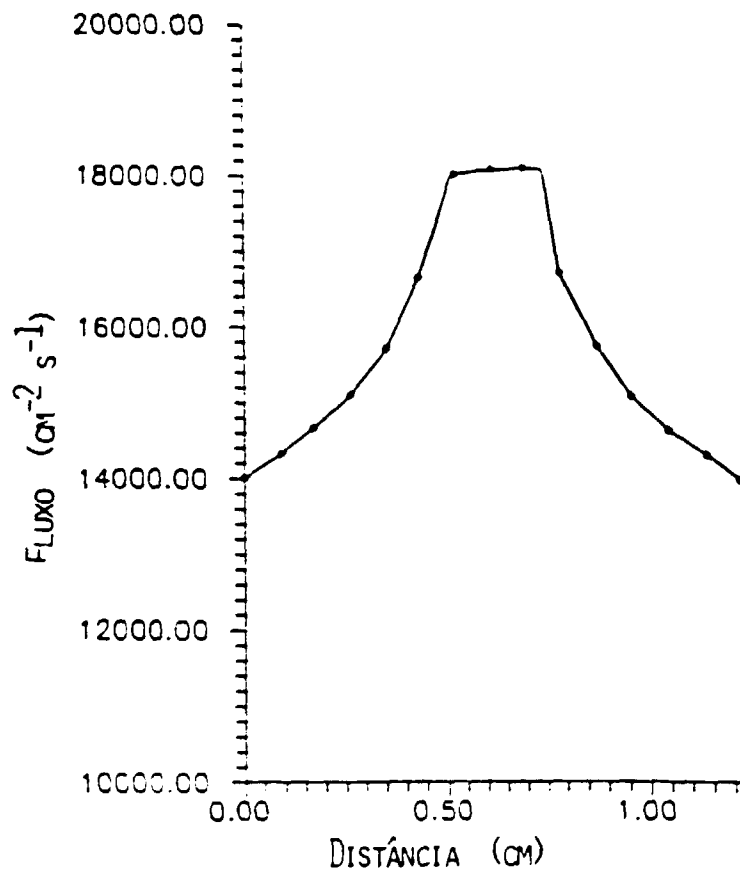




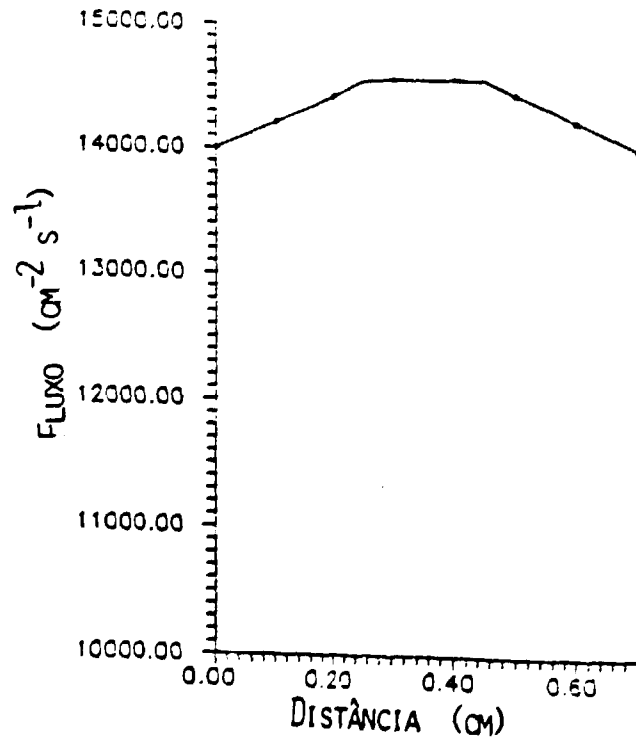
**FIGURA 6.3 – CONVERGÊNCIA DO MOMENTO  $\psi_{20}$**

Os demais momentos convergem também na sétima iteração, sendo que os momentos representados acima são os momentos que apresentam melhor e pior convergência respectivamente. Não foram indicados os pontos em que ocorre esta convergência pois o programa seleciona, a cada iteração, o ponto em que isto ocorre, sendo que este poderá não ser o mesmo a cada nova iteração.

O fluxo total calculado para este problema é dado na figura 6.4 para um corte pela diagonal principal do cubo, sendo que na figura 6.5 é apresentado um corte pela reta de intersecção dos planos  $Oxy$  e  $Oxz$ . O tempo de execução aproximado deste caso exemplo é de 30 minutos no computador CDC—Cyber 180/830, contra um tempo aproximado de 90 segundos para solucionar a equação de difusão, dada a mesma geometria e o mesmo domínio.



**FIGURA 6.4 - FLUXO PARA O PROBLEMA TESTE - CORTE 1**



**FIGURA 6.5 - FLUXO PARA O PROBLEMA TESTE - CORTE 2**

## CAPÍTULO 7

### CONCLUSÃO

Este trabalho teve por objetivo estudar um método para solução da equação de transporte linear em três dimensões e em um grupo de energia. A dependência angular do fluxo foi tratada por uma expansão em harmônicos esféricos, enquanto que a dependência espacial foi abordada com o método dos elementos finitos.

O tratamento das condições de contorno apresenta-se incompleto neste trabalho pois não foram utilizadas todas as condições de contorno sugeridas por J.K. Fletcher em seus trabalhos [38, 39, 40, 41, 42, 43]. Isto se deve à insegurança quanto à interpretação da afirmativa de Fletcher em relação à condição de contorno de reflexão e também ao fato de não ter sido possível um desenvolvimento coerente de outra forma para a mesma. Com isto, os resultados apresentados no corpo principal do trabalho carecem de um maior aprofundamento e aproveitamento das potencialidades do programa ETEFEH. O Apêndice 6 é dedicado especialmente ao desenvolvimento da condição de contorno de reflexão e apresenta problemas explorando uma maior potencialidade do programa, considerando as ressalvas acima.

Por outro lado, foi verificada a viabilidade do método proposto por J.K. Fletcher [38, 39, 40, 41, 42, 43] para solução da equação de transporte em geometria tridimensional  $x-y-z$ . O ponto crucial deste método é o desenvolvimento (ou adaptação) de um algoritmo extremamente rápido de solução da equação de difusão, tendo em vista que a mesma (ou uma variação desta) deverá ser solucionada muitas vezes até que seja obtida a solução final convergida do problema. As diferenças encontradas no valor esperado do fluxo (figura 6.4) mostram que o problema não se encontra totalmente

concluído, sendo necessários ainda novos trabalhos nesta área. Deve-se salientar que há relativamente pouca informação a respeito de códigos comerciais não estocásticos para solução da equação de transporte tridimensional atualmente disponíveis, sendo este um problema não completamente resolvido.

Este trabalho representou diversas etapas, em geral complexas e nem sempre correlatas de desenvolvimento, sendo que novos trabalhos deverão ser desenvolvidos para viabilizar o desenvolvimento de um programa de uso comercial. Uma versão bidimensional do programa deveria ter sido desenvolvida previamente ao desenvolvimento do programa principal, não apenas com a equação de difusão, como foi realizado, mas também com testes do algoritmo de iteração dos momentos. Tal desenvolvimento não foi realizado por questão de tempo e também de inesperienza previa com programas de tão grande complexidade.

Como sugestões para trabalhos futuros, tem-se:

- determinação e aplicação mais rigorosa das condições de contorno, tanto para o caso de reflexão, quanto para o caso de superfície livre;
- estudos relativos à aplicação de outros tipos de elementos interpoladores, incluindo tanto elementos hexaédricos (função bilinear, biquadrática, etc), quanto elementos com dependência quadrática nos parâmetros (elemento tetraédrico com 10 nós), quanto elementos prismáticos ou mesmo elementos isoparamétricos curvos [53];
- desenvolvimento e implementação de expansões em ordens superiores do fluxo angular às implementadas (P1-P3) e desenvolvidas (P1-P3-P5) neste trabalho;
- desenvolvimento e implementação de algoritmo para solução da equação de transporte multigrupo;

- utilização de propriedades (constantes físicas) variáveis no interior do elemento;
- desenvolvimento de uma versão tridimensional do programa EDEF, o que obrigará um estudo mais profundo dos compiladores PASCAL (ou mesmo o estudo de outras linguagens computacionais) disponíveis para microcomputadores, devido à limitação de memória imposta pelo compilador TURBO-PASCAL (Borland - versão 5.0) utilizado nesta versão do programa EDEF (64 Kbytes de memória por bloco do programa);
- desenvolvimento de um pós-processador para análise dos resultados do programa de modo simples na tela do microcomputador, por exemplo.

## REFERÊNCIAS

- [1] BOLTZMANN, L. Weitere studien über das wärmeleichgewicht unter gas molekulen: Sitzungs Berichte. *Akad. der Wissenschaften*, 66:275-370, 1872.
- [2] BELL, G.I. & GLASSTONE, S. *Nuclear reactor theory*. New York, Van Nostrand Reinhold, 1970.
- [3] MILNE, E.A. Radiative equilibrium in the outer layer of a star. *Monthly Not Roy. Ast. Soc.*, 81:361, 1921.
- [4] AMBARZUMIAN, V.A. Diffuse reflection of light by a foggy medium. *Compt. Rend Acad. Sci. URSS*, 38:229-232, 1943.
- [5] CHANDRASEKHAR, S. On the radiative equilibrium of a stellar atmosphere: X. *Appl.J.*, 103:351-370, 1946.
- [6] CHANDRASEKHAR, S. On the radiative equilibrium of a stellar atmosphere: XIV. *Appl.J.*, 105:164-192, 1947.
- [7] CHANDRASEKHAR, S. *Radiative Transfer*. London, Oxford University, 1950.
- [8] PONTEDEIRO, E.M.B.D. *Solução da equação de transporte linear, monoenergética em multi-regões com espalhamento anisotrópico através do método FN*. São Paulo, 1982. (Dissertação de mestrado, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares).

- [9] HUANG, K. *Statistical mechanics*. New York, John Wiley, 1963.
- [10] DAVISON, B. *Neutron transport theory*. London, Oxford Univ. Press, 1957.
- [11] DUDERSTADT, J.J. & MARTIN, W.R. *Transport theory*. New York, John Wiley and Sons, 1979.
- [12] CASE, K.M. Elementary solution of the transport equation and their applications. *Ann. Phys.*, 9:1-23, 1960.
- [13] CASE, K.M. & ZWEIFEL, P.F. *Linear transport theory*. Reading, Mass., Addison-Wesley Publishing Co., 1967.
- [14] SANCHEZ, R. & McCORMICK, N.J. A review of neutron transport approximations. *Nucl. Sci. Eng.*, 80:481-535, 1982.
- [15] McCORMICK, W.J. & KÜSCER, I. Singular eigenfunction expansions in neutron transport theory. *Adv. Nucl. Sci. Tech.*, 7:181-282, 1973.
- [16] BELLMAN, R.; KALABA, R.; WING, G.M. Invariant imbedding and mathematical physics - I - Particle process. *J. Math. Phys.*, 1:280-308, 1960.
- [17] ARONSON, R. & YARMUSH, D.L. Transfer-matrix method for gamma-ray and neutron penetration. *J. Math. Phys.*, 7:221-237, 1966.
- [18] WICK, G.C. Über ebene diffusionsproblem. *Z. Phys.*, 52:1-11, 1943.

- [19] LEE, C.E. The discrete  $S_n$  approximation to transport theory. Los Alamos, NM, Los Alamos National Laboratory, 1962. (LA-2595).
- [20] CARLSON, B.G. & LATHROP, K.D. Transport theory: the method of discrete ordinates. In: GREENSPAN, H.; KELBER, C.N.; OKRENT, D., eds. *Computing methods in Reactor Physics*, New York, Gordon and Breach, 1968.
- [21] GELBARD, E.M. Spherical harmonics methods:  $P_L$  and Double  $P_L$  approximations. In: GREENSPAN, H.; KELBER, C.N.; OKRENT, D., eds. *Computing methods in Reactor Physics*, New York, Gordon and Breach, 1968.
- [22] SPANIER, J. & GELBARD, E.M. *Monte Carlo principles and neutron transport problems*. Massachusetts, Addison-Wesley Publishing Co., 1969.
- [23] VIEIRA, W.J.; MENDONÇA, A.G.; MAIORINO, J.R. Estudo e aplicação do código Morse em blindagem. In: COMISSÃO NACIONAL DE ENERGIA NUCLEAR. *Física de Reactores: anais do IV Encontro Nacional de ... realizado em Itaipava, 3-5 novembro de 1983*. Rio de Janeiro, 1983.
- [24] SCHAEFFER, N.M. *Reactor shielding for nuclear engineers*. Oak Ridge, USAEC, 1976.
- [25] MONTAGNINI, B. & PIERPAOLO, V. Il metodo delle sorgenti superficiali. In: SOCIATA LOMBARDA DE FISICA. *Física del Reactore: convegno indetto dalla ... held in Pavia, Italia, 28 novembre - 1 dicembre, 1969*.



- [26] SIEWERT, C.E. & BENOIST, P. The  $F_n$  method in neutron transport theory. Part I: Theory and applications. *Nucl.Sci.Eng.* 69:156-160, 1979.
- [27] GRANDJEAN, P. & SIEWERT, C.E. The  $F_n$  method in neutron-transport theory applications and numerical results. *Nucl.Sci.Eng.* 69:161-168, 1979.
- [28] ACKROYD, R.T.; FLETCHER, J.K.; GODDARD, A.J.H.; WILLIAMS, M.M.R.; ISSA, J.; WOOD, J. Some recent developments in finite element method for neutron transport. *Adv.Nucl.Sci.Technol.*, 19:381-483, 1987.
- [29] HUEBNER, K.H. & THORNTON, E.A. *The finite element method for engineers*. New York, John Willey, 1982.
- [30] MORDANT, M. Linear discontinuous finite element for phase-space multidimensional transport calculations. *Nucl.Sci.Eng.*, 92 (2), 1986.
- [31] MARTIN, W.R. & DUDERSTADT, J.J. Finite element solution of the neutron transport equation with applications to strong heterogeneities. *Nucl.Sci.Eng.*, 62 (2):371-390, 1977.
- [32] ZIVER, A.K. & GODDARD, A.J.H. A finite element method for multigroup diffusion-transport problems in 2 dimensions. *Ann.Nucl.Energy*, 8:689-698, 1981.
- [33] OLIVEIRA, C.R.E. An arbitrary geometry finite element method for multigroup neutron transport with anisotropic scattering. *Prog.Nucl.Energy*, 18(1): 227-236, 1986.

- [34] WOOD, J. & WILLIAMS, M.M.R. Recent progress in the applications of the finite element method to the neutron transport equation. *Prog.Nucl Energy*, 14:21-40, 1984.
- [35] REED, W.H., & HILL, T.R. Triangular mesh methods for the neutron transport equation. In: AMERICAN NUCLEAR SOCIETY. *Mathematical models and computational techniques for analysis of nuclear systems: proceedings of the ANS meeting on ... held in Ann Arbor, 1979.* (CONF-730414).
- [36] SEED, T.J.; MILLER, W.F.; BINKLEY, F.W. *TRIDENT: a two-dimensional multigroup triangular mesh discrete ordinates, explicit neutron code.* Los Alamos, NM, Los Alamos Scientific Lab., 1977. (LA-6735-MS).
- [37] HILL, T.R. *ONETRAN: a discrete ordinate finite element code for the solution of the one-dimensional multigroup transport equation.* Los Alamos, NM, Los Alamos Scientific Lab., 1975. (LA-5990-MS).
- [38] FLETCHER, J.K. A solution of the multi-group transport equation using a weighted residual technique. *Ann.Nucl Energy*, 8:647-656, 1981.
- [39] FLETCHER, J.K. The solution of the multigroup neutron transport equation using spherical harmonics. *Nucl.Sci.Eng.*, 84:33-46, 1983.
- [40] FLETCHER, J.K. A solution of the neutron transport equation using spherical harmonics. *J. Phys.*, 16 (12):2827-2835, 1983.

- [41] FLETCHER, J.K. The solution of the time-independent multi-group neutron transport equation using spherical harmonics. *Ann. Nucl. En.*, 4:401-405, 1977.
- [42] FLETCHER, J.K. The solution of the multigroup neutron transport equation using spherical harmonics. UKAEA Risley Nuclear Power Development Establishment, 1974. (TRG-REPORT 2547).
- [43] FLETCHER, J.K. Further work on the solution of the static multigroup neutron transport equation using spherical harmonics. UKAEA Risley Nuclear Power Development Establishment, 1976. (TRG-REPORT 2849).
- [44] VLADIMIROV, V.S. *Mathematical problems in the one-velocity theory of particle transport*. Chalk River, ON, Atomic Energy of Canada Ltd., 1963.
- [45] ACKROYD, R.T. *The finite element method for neutron transport*. UKAEA Risley Nuclear Power Development Establishment, 1975. (TRG-REPORT 2705).
- [46] GALLIARA, J. & WILLIAMS, M.M.R. A finite element method for neutron transport - II - some practical considerations. *Ann. Nucl. Energy*, 6:205-224, 1979.
- [47] ACKROYD, R.T. & GREENFELL, D.T. A finite element method for neutron transport - III - two-dimensional one-group problems. *Ann. Nucl. Energy*, 6:563-578, 1979.

- [48] ACKROYD, R.T.; GODDARD, A.J.H.; ZIVER, A.K. A finite element method of neutron transport - IV - a comparison of some finite element solutions of two-groups benchmark problems with conventional solutions. *Ann Nucl Energy*, **1**: 335-349, 1980.
- [49] ISSA, J.G.; RIYAIT, W.S.; GODDARD, A.J.H.; STOTT, G. Multigroup applications of the anisotropic finite element code FELTRAN to one, two and three-dimensions and R-Z problems. *Prog Nucl Energy*, **18**: 251-264, 1986.
- [50] SPLAWSKI, B.A. *Finite element method for neutron transport calculations*. Londres, 1981. (PhD Thesis, London University).
- [51] QUAH, C.S. A comparison of finite element and discrete ordinates methods for one-dimensional multigroup problems. *Ann Nucl Energy*, **8**: 709-716, 1981.
- [52] WOOD, J. A multigroup finite element solution of the neutron transport equation - II - R-Z geometry. *Ann Nucl Energy*, **12**: 217-232, 1985.
- [53] ZIENKIEWICZ, O.C. & MORGAN, K. *Finite elements and approximations*. New York, John Wiley, 1982.
- [54] BECKER, E.B.; CAREY, G.F.; ODEN, J.T. *Finite elements - an introduction*. vol. 1. New York, Prentice Hall, Inc., 1981.
- [55] ARFKEN, G., *Mathematical methods for Physicists*. New York, Academic Press, 1968.

- [56] LAWDEN, D.F. *Tensor calculations and relativity*. London, Methuen & Co Ltd and Science Paperbacks, 1971.
- [57] FERNANDES, A. & MAIORINO, J.R. EDEF - um programa para solução da equação de difusão para microcomputadores. In: ASSOC. BRAS. ENERGIA NUCLEAR, *Energia nuclear: anais do 3º Congresso Geral de*, Rio de Janeiro, 1990.
- [58] TORRES, L.M.R. *Distribuição de temperatura devida à geração de calor em blindagem de reatores nucleares*. Rio de Janeiro, 1985. (Dissertação de mestrado, Instituto Militar de Engenharia).
- [59] *Numerical determination of the space, angle or energy distribution of particles in an assembly*. Illinois, 1972. (ANL - 7416).
- [60] ONO, S. *Aplicação do método dos elementos finitos na solução da equação de difusão em estado estacionário*. São Paulo, 1982. (Dissertação de mestrado, Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares).
- [61] SWANSON ANALYSIS SYSTEM INC., *ANSYS Command reference guide - rev. 4.2*, New York, 1985.
- [62] OLIVEIRA, C.R.E. An arbitrary geometry finite element method for multigroup neutron transport with anisotropic scattering. *Prog. Nucl. Energy*, **18**:227-236, 1986.

- [63] FOLEY, J.D. & VAN DAM *Fundamentals of interactive computer graphics*.  
New York, McGraw Hill, 1977.
- [64] NEWMAN, W.M. & SPROULL, R.F., *Principles of interactive computer graphics*.  
2.ed., London, McGraw Hill, 1979.
- [65] PROTOCOLO COMPUTADORES LTDA, *HIRMA - manual do usuário*, São  
Paulo 1986.
- [66] *Control Data CONNECT for the IBM Personal Computer, Version 1.2, User's  
guide*. 1987.
- [67] COLLINS, R.J. Bandwith reduction by automatic renumbering. *Int.J.Numer.  
Methods in Eng.*, 6:345-356, 1973.
- [68] DUROCHER, L.L. & GASPER, A. A versatil two-dimensional mesh generator  
with automatic bandwith reduction. *Comput. Struct.*, 10:561-575, 1979.
- [69] RANK, E. & BABUSKA, I. An expert system for the optimal mesh design in the  
hp-version of the finite element method. *Int.J.Numer. Methods in Eng.*,  
24:2087-2106, 1987.
- [70] ABHARY, K. An automatic mesh generation scheme for finite element models of  
box-like structures. *Comput. Struct.*, 31:637-641, 1989.

- [71] SHEPHARD, M.S.; GRICE, K.R.; LO, J.A.; SHROEDER, W.J. Trends in automatic three-dimensional mesh generation. *Comput. Struct.*, **30**:421-429, 1988.
- [72] LO, S.H. Finite element mesh generation over curved surfaces. *Comput. Struct.*, **29**:731-742, 1988.
- [73] BERRY, K.J. Parametric 3D finite element generation. *Comput. Struct.*, **33**:969-976, 1989.
- [74] FEOFILOFF, P. & LUCHESI, C.L., *Algoritmos para igualdades minimas em grafos*. Campinas, UNICAMP, 1988.

## APÊNDICE 1

### EDEF – UM PROGRAMA PARA SOLUCIONAR A EQUAÇÃO DE DIFUSÃO EM GEOMETRIA X-Y PARA MICROCOMPUTADOR

O programa EDEF (Equação de Difusão, Elementos Finitos) [57] soluciona a equação de difusão em geometria bidimensional (x-y) em dois grupos de energia em microcomputadores compatíveis com IBM-PC, tendo representado um contato inicial do autor com o método dos elementos finitos.

Seja a equação de difusão em multigrupo, considerando-se apenas espalhamento para energia decrescente ("downscattering"), fonte rápida devido à fissão em vários grupos e sem fonte externa:

$$-\nabla D_g \nabla \phi_g + \Sigma_{r_g} \phi_g = \sum_{g'=1}^g \Sigma_{s_g'g} \phi_{g'} + \frac{\chi_g}{k} \sum_{g'=1}^G \nu_{g'} \Sigma_{f_g'} \phi_{g'} \quad (A1.1)$$

onde  $\phi_g$  é o fluxo do grupo  $g$ ;  $D_g$  é o coeficiente de difusão do grupo  $g$ ;  $\Sigma_{r_g}$  é a secção de choque total do grupo  $g$ ;  $\Sigma_{s_g'g}$  é a secção de choque de espalhamento do grupo  $g'$  para o grupo  $g$ ;  $\Sigma_{f_g'}$  é a secção de choque de fissão do grupo  $g'$ ;  $\chi_g$  é a fração de nêutrons de fissão que surge no grupo  $g$ ;  $k$  é o fator de multiplicação;  $\nu_{g'}$  é o número médio de nêutrons liberados por fissão ocorrida no grupo  $g'$ .

Considerando apenas dois grupos de energia (rápido e térmico), com fissão nos dois grupos, originando nêutrons no grupo rápido, tem-se:

$$-\nabla D_1 \nabla \phi_1 + \Sigma_{r1} \phi_1 = \Sigma_{s11} \phi_1 + \frac{1}{k} (\nu_1 \Sigma_{f1} \phi_1 + \nu_2 \Sigma_{f2} \phi_2) \quad (A1.2)$$



$$-\nabla D_2 \nabla \phi_2 + \Sigma_{r2} \phi_2 = \Sigma_{s12} \phi_1 + \Sigma_{s22} \phi_2 \quad (A1.3)$$

As equações acima podem ser representadas de forma mais compacta e simples por

$$-\nabla D_i \nabla \phi_i + \Sigma_{r_i} \phi_i = S_i \quad (A1.4)$$

sendo que, para o grupo rápido,

$$\Sigma_{r1} = \Sigma_{r1} - \Sigma_{s11} \quad (A1.5a)$$

$$S_1 = \frac{1}{k} (\nu_1 \Sigma_{f1} \phi_1 + \nu_2 \Sigma_{f2} \phi_2) \quad (A1.5b)$$

e, para o grupo térmico,

$$\Sigma_{r2} = \Sigma_{r2} - \Sigma_{s22} \quad (A1.6a)$$

$$S_2 = \Sigma_{s12} \phi_1 \quad (A1.6b)$$

Soluciona-se o problema por meio de uma sequência iterativa, a partir de uma estimativa inicial para o fluxo dos dois grupos de energia e para o fator de multiplicação. O fator de multiplicação é reavaliado a cada nova iteração através de

$$k^{i+1} = \frac{\int d^3r S^{i+1}(r)}{k^i \int d^3r S^i(r)} \quad (A1.7)$$

onde  $S^j = S_1^j =$  fonte de fissão da iteração  $j$ .

As condições de contorno para este problema são de três tipos:

i) vácuo:

$$\hat{n} \cdot \nabla \phi = \left. \frac{\partial \phi}{\partial n} \right|_S = -\frac{1}{d} \phi \Big|_S ; S \rightarrow (x,y) \in \partial D ; \quad (A1.8)$$

onde  $d$  é a distância extrapolada.

ii) reflexão total:

$$\left. \frac{\partial \phi}{\partial n} \right|_S = 0 ; S \rightarrow (x,y) \in \partial D ; \quad (A1.9)$$

iii) fluxo definido no contorno:

$$\phi \Big|_S = \phi_0 \Big|_S ; S \rightarrow (x,y) \in \partial D \quad (A1.10)$$

A solução da equação (A1.4) sujeita às condições de contorno acima, será obtida por meio do método de elementos finitos, com a técnica de resíduos ponderados e a aproximação de Galerkin. Desta forma, subdividindo o domínio em NE elementos, admitindo os parâmetros físicos constantes no interior de cada elemento e ainda trabalhando algebricamente com as equações, pode-se escrever a equação (A1.4) acima sob a forma matricial para cada elemento como dado abaixo:

$$\underline{K} \cdot \underline{\phi} = \underline{S} ; \quad (A1.11)$$

onde, para um domínio bidimensional (x-y) e elementos triangulares:

$$k_{ij}^e = \frac{D^e[(y_j - y_k)(y_k - y_i) + (x_k - x_j)(x_i - x_k)]}{2\Delta^e} + \frac{(1 + \delta_{ij})\Sigma_r^e \Delta^e}{24} + \frac{\xi \cdot (1 + \delta_{ij})D^e d_{ij}}{6} \quad (A1.12)$$

$$s_i^e = \frac{S^e \Delta^e}{6} \quad (A1.13)$$

e ainda

$\Delta^e$  = área do elemento  $e$  ;

$d_{ij}$  = distância entre os nós  $i$  e  $j$  ;

$\xi = \begin{cases} 0 & , \text{ reflexão e fluxo definido} \\ 1/d & , \text{ vácuo} \end{cases}$  ;

$D^e$  = coeficiente de difusão do elemento  $e$  ;

$\Sigma_r^e$  = seção de choque de remoção do elemento  $e$  ;

$S^e$  = valor da fonte no elemento  $e$  .

Por meio da topologia do sistema, monta-se a matriz dos coeficientes (ou matriz global) a partir da matriz dos elementos. Para finalizar o problema, utiliza-se uma rotina de solução de sistemas de equações lineares algébricas do tipo **Eliminação Gaussiana**.

Para simular uma terceira dimensão (fuga axial), foi introduzida neste programa a opção de "buckling" (B). Desta forma, o fluxo de nêutrons tridimensional é aproximado por

$$\phi(x,y,z) = \phi(x,y) \cdot \cos Bz \quad (A1.14)$$

Esta aproximação implica em alterações para as equações (A1.5) e (A1.6), resultando respectivamente em:

$$\Sigma_{r1} = \Sigma_{r1} - \Sigma_{r11} + D_1 \cdot B^2 \quad ,$$

$$\Sigma_{r2} = \Sigma_{r2} - \Sigma_{r22} + D_2 \cdot B^2 \quad .$$

O fluxo é ainda normalizado pelo valor da Potência (P) do reator (dado de entrada), de tal forma que

$$P = \int_V \gamma \cdot \Sigma_f \cdot \phi \, dV \quad , \quad (A1.15)$$

onde  $\gamma$  é a energia liberada por fissão (também um dado de entrada).

O programa EDEF permite a utilização de até 190 "mesh points" e 250 elementos, sendo que o limite para o número de regiões está fixado em 10. Estas limitações são decorrentes da limitação imposta pelo compilador Turbo-Pascal 5.0 em 64 Kbytes por bloco do programa.

A principal facilidade apresentada pelo programa EDEF refere-se ao tratamento gráfico que foi dado ao mesmo. Com o objetivo de simplificar a entrada de dados, foram elaboradas telas auto-explicativas que permitem ao usuário utilizar o programa de modo simples e preciso. Este conjunto de telas configura o pré-processador do programa EDEF.

Com o objetivo de exemplificar a entrada de dados, apresenta-se a seguir a sequência de telas para a geração de um arquivo. As letras que surgem em maiúsculas representam o "menu" da tela, enquanto que as letras em minúsculas representam a opção escolhida. São apresentados dois exemplos de entrada/saída de dados.

Neste primeiro exemplo, o objetivo é gerar os dados para um novo arquivo, que será denominado "pQ" enquanto que o arquivo com a estimativa inicial de fluxos será denominado "fluxo" (este arquivo será inicializado com o valor "0" para o fluxo e "1" para o fator de multiplicação infinito).

Na primeira tela, faz-se a opção por entrada via terminal bem como o nome com que o arquivo será armazenado. Na segunda tela, é fornecido o número de elementos, o número de nós, o valor da distância extrapolada e ainda o número de regiões e o "buckling". Na terceira tela, as coordenadas dos nós, enquanto que na quarta tela tem-se a caracterização das regiões do problema. Na quinta tela deve ser fornecida a topologia do problema, ou seja, a forma pela qual os nós encontram-se interligados. Finalmente, na sexta tela, os contornos são detalhados, encerrando assim a entrada de dados para o problema em questão. As telas seguintes são comuns tanto para o caso de entrada de dados via terminal quanto via arquivo, sendo detalhadas no segundo exemplo.

**EQUACAO DE DIFUSAO**

**OPCAO DE ENTRADA**

**DESEJA ENTRAR COM OS DADOS VIA (t)ERMINAL OU VIA (d)RQUIVO? t**

**DESEJA QUE OS DADOS SEJAM GUARDADOS EM DISCO? ("S" OU "N") s  
ENTRE COM O NOME DO ARQUIVO PD**

**ESTE PROGRAMA FOI REALIZADO POR ALMIR FERNANDES**

**FIGURA A1.1 - TELA 1**

**EQUACAO DE DIFUSAO**

entre com o numero de elementos 3

entre com o numero de nos 5

entre com o valor da distancia extrapolada 0

entre com o numero de regioes 2

**ESTE PROGRAMA FOI REALIZADO POR ALMIR FERNANDES**

**FIGURA A1.2 - TELA 2**

EQUACAO DE DIFUSAO

COORDENADAS DOS NOS

| NO | X[I]  | Y[I]  |
|----|-------|-------|
| 1  | 0.000 | 0.000 |
| 2  | 1.000 | 0.500 |
| 3  | 0.000 | 1.000 |
| 4  | 1.000 | 1.500 |
| 5  | 0.000 | 2     |

ESTE PROGRAMA FOI REALIZADO POR ALMIR FERNANDES

FIGURA A1.3 - TELA 3



EQUACAO DE DIFUSAO

CARACTERIZACAO DOS ELEMENTOS

| REGIAO | SIGMAT | NISIGMAF | COEF. DIFUSAO | ESP11  | ESP12  | GAMASIGMAF |
|--------|--------|----------|---------------|--------|--------|------------|
| 1      | 0.0220 | 0.0000   | 1.5000        | 0.0000 | 0.0200 | 0.0000     |
|        | 0.2000 | 0.2180   | 0.4000        | 0.0000 |        | 1.0000     |
| 2      | 0.1010 | 0.0000   | 1.2000        | 0.0000 | 0.1000 | 0.0000     |
|        | 0.0200 | 0.0000   | 0.1500        | 0.0000 |        | 0          |

ESTE PROGRAMA FOI REALIZADO POR ALMIR FERNANDES

FIGURA A1.4 - TELA 4

EQUACAO DE DIFUSAO

ENTRADA DA TOPOLOGIA

| ELEMENTO \                           | NO |   |   | PERTENCE AO |                    |        |
|--------------------------------------|----|---|---|-------------|--------------------|--------|
|                                      | 1  | 2 | 3 | LOCAL \     | CONTORNOS? (S/N) \ | REGIAO |
| N<br>O<br>G<br>L<br>O<br>B<br>A<br>L | 1  | 1 | 2 | 3           | S                  | 1      |
|                                      | 2  | 2 | 3 | 4           | S                  | 2      |
|                                      | 3  | 3 | 4 | 5           | S                  | 1      |

ESTE PROGRAMA FOI REALIZADO POR ALMIR FERNANDES

FIGURA A1.5 - TELA 5

EQUACAO DE DIFUSAO  
CARACTERIZACAO DO CONTORNO

TIPO DE CONTORNO  
<N> - NAO PERTENCE <R> - REFLETIDO <V> - VACUO <D> - DEFINIDO

|   |   |   |   |   |
|---|---|---|---|---|
| 1 | - | 2 | ) | v |
| 1 | - | 3 | ) | r |
| 2 | - | 3 | ) | n |
| 1 | - | 3 | ) | n |
| 2 | - | 4 | ) | v |
| 3 | - | 4 | ) | n |
| 3 | - | 4 | ) | n |
| 3 | - | 5 | ) | r |
| 4 | - | 5 | ) |   |

FIGURA A1.6 - TELA 6

No segundo exemplo, utiliza-se um arquivo já previamente criado (aqui denominado P4, tendo por arquivo de fluxos, o arquivo flux04) e recalcula-se o valor do fator de multiplicação e o fluxo.

Na primeira tela é feita a opção por dados via arquivo e define-se o arquivo de dados, bem como seu respectivo arquivo de fluxos (caso o arquivo de fluxos ainda não tenha sido gerado, pode-se optar por "-" neste campo, de tal forma que um arquivo novo será gerado, recebendo o nome de "fluxo.dat" e contendo como estimativa inicial o valor "0.0" para o fluxo -rápido e térmico- e "1.0" para o fator de multiplicação infinito). Assim que os dados da primeira tela forem fornecidos, o programa efetuará a leitura dos dados nos arquivos. A tela seguinte, que surge tanto neste exemplo como no exemplo anterior (sétima tela naquele caso), questiona ao usuário se este deseja ou não verificar o domínio do problema que está sendo calculado. Em caso afirmativo, uma figura é apresentada na tela do microcomputador com o domínio do problema. Caso se queira, há a opção para impressão da mesma. Deve-se salientar que a qualidade da figura apresentada na tela (EGA ou VGA) é superior à apresentada na impressora, e também que, para que se possa providenciar uma impressão da figura, o modo gráfico da impressora deve ser acionado (em geral, isto é feito executando-se o programa 'GRAPHIX' que é fornecido com o sistema operacional do microcomputador antes da execução do programa EDEF). Após a impressão da figura, o programa aguarda que qualquer tecla seja pressionada para prosseguir. Quando isto ocorre, a tela seguinte é apresentada, indicando que os cálculos estão sendo realizados. À medida que os resultados vão sendo obtidos, o valor do fator de multiplicação é apresentado na tela. Quando ocorre a convergência no fator de multiplicação ( $\Delta k/k < 10^{-4}$ ), o cálculo é encerrado e apresentam-se os resultados tabelados do fator de multiplicação, do fator de pico e do fluxo médio por região para os dois grupos. Os

fluxos (rápido e térmico) são ainda apresentados graficamente. Os valores do fator de multiplicação, fluxo para os dois grupos e a densidade de potência são armazenados no arquivo de fluxos (neste caso, 'FLUXO4.DAT').

#### EQUACAO DE DIFUSAO

##### OPCAO DE ENTRADA

DESEJA ENTRAR COM OS DADOS VIA (T)ERMINAL OU VIA (A)RQUIVO? 0

ENTRE COM O NOME DO ARQUIVO p4

ARQUIVO DOS FLUXOS flux04

DESEJA QUE OS DADOS SEJAM GUARDADOS EM DISCO? ("S" OU "N")

ESTE PROGRAMA FOI REALIZADO POR ALMIR FERNANDES

FIGURA A1.7 - TELA 1

**EQUACAO DE DIFUSAO**

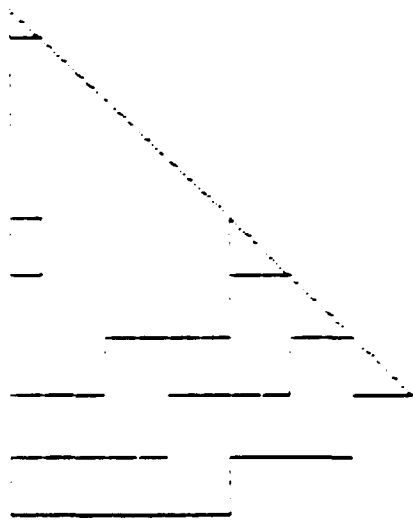
DESEJA VERIFICAR O DOMINIO? (S/N) S

DESEJA IMPRIMIR O DESENHO? (S/N) S

ENTRE COM A ESCALA: (valor maximo: 0.94) 0.9

ESTE PROGRAMA FOI REALIZADO POR ALMIR FERNANDES

**FIGURA A1.8 - TELA 2/7**



|        |   |       |
|--------|---|-------|
| região | 1 | comb1 |
| região | 2 | comb2 |
| região | 3 | comb3 |
| região | 4 | agua  |

**FIGURA A1.9 - TELA 3/8**

**EQUACAO DE DIFUSAO**

**CALCULANDO**

**ESTE PROGRAMA FOI REALIZADO POR ALMIR FERNANDES**

**FIGURA A1.10 - TELA 4/9**



EQUACAO DE DIFUSAO

k(atual)= 1.03465112      k(anterior)= 1.03462620

  calculo encerrado ,

tecle <enter> para encerrar o programa

ESTE PROGRAMA FOI REALIZADO POR ALMIR FERNANDES

FIGURA A1.11 - TELA 5/10

EXEMPLO DE DEFEITO

EXEMPLO DE DEFEITO PARA ESTE CASO ABERTO:

TIPO DE MULTA/DEFEITO : 1.000,00

TIPO DE FOLIO : 1.000,00

ESTE PROGRAMA FOI REALIZADO POR ALMIR FERNANDES

**FIGURA A1.12 - TELA 6/11**

EQUAÇÃO DE DIFUSÃO

RESULTADOS OBTIDOS PARA ESTE CASO AMOSTRA:

VALOR MÉDIO POR REGISTRO

| REGISTRO | GRUPO1  | GRUPO2  | MATERIAL |
|----------|---------|---------|----------|
| 1        | 0.8924  | 1.1154  | comb1    |
| 2        | 11.8869 | 21.7270 | comb2    |
| 3        | 0.8204  | 0.1148  | comb3    |
| 4        | 0.8107  | 1.5287  | agua     |

ESTE PROGRAMA FOI REALIZADO POR ALMIR FERREIRES

**FIGURA A1.13 - TELA 7/12**

FLUXO DO GRUPO 1  
FLUXO DO GRUPO 2

REGIAO 1 comb1  
REGIAO 2 comb2  
REGIAO 3 comb3  
REGIAO 4 agua

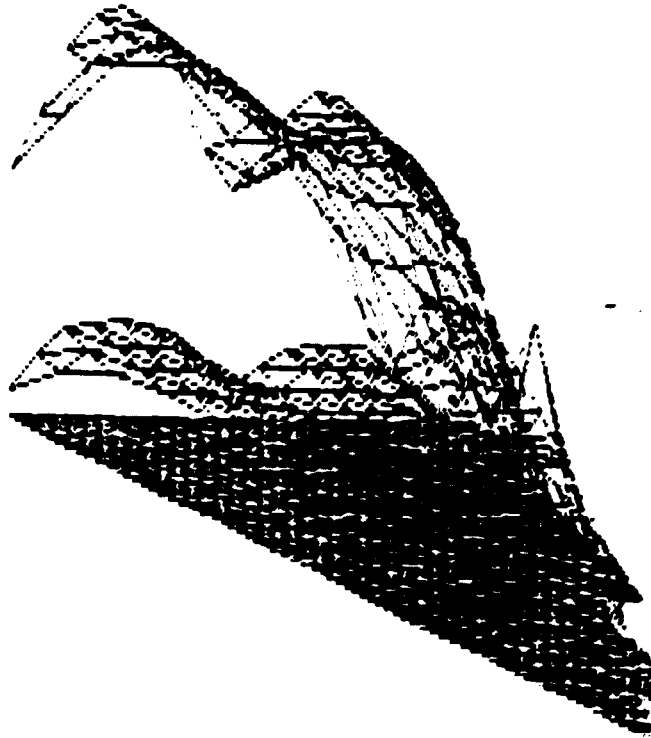


FIGURA A1.14 - TELA 8/13

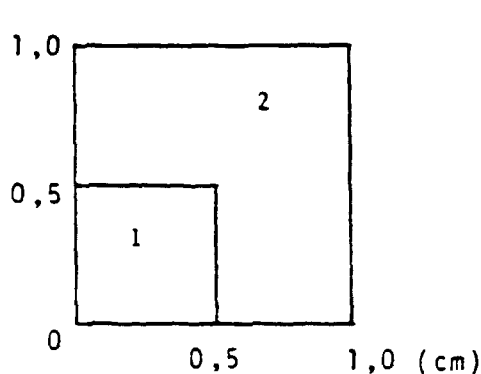
APLICACION ENCERRADA  
TECLE ENTER PARA ENCERRAR O PROGRAMA

**FIGURA A1.15 - TELA 9/14**

**Apresenta-se a seguir alguns problemas para os quais o programa foi testado.**

**PROBLEMA UM: Reator com duas regiões (combustível e refletor) e um grupo de energia.**

**Descrição:** O domínio deste problema é um quadrado com 1 cm de lado, tendo duas faces refletidas e duas faces com fluxo definido e igual a zero. Duas regiões com as mesmas constantes de grupo e um grupo de energia caracterizam o problema.



$$\begin{aligned} \Sigma_a &= 1 \text{ cm}^{-1} \\ D &= 1/3 \text{ cm} \\ d &= 2/3 \text{ cm} \\ S1 &= 1 \text{ n\u00e9utron/cm}^2/\text{s} \\ S2 &= 0 \end{aligned}$$

**FIGURA A1.16 - DOM\u00cdNIO DO PROBLEMA 1**

Este problema foi tamb\u00e9m solucionado pelo c\u00f3digo CITATION e, para efeito de compara\u00e7\u00e3o de resultados, os gr\u00e1ficos com os valores de fluxo por diversos cortes s\u00e3o apresentados na seq\u00eancia. Para uma mais adequada compara\u00e7\u00e3o, em ambos os casos o fluxo apresenta-se normalizado pelo m\u00e1ximo valor obtido.

Deve-se salientar que os dois programas fornecem valores de fluxo em pontos distintos (EDEF - nos n\u00f3s; CITATION no centro da malha), o que dificulta a compara\u00e7\u00e3o dos resultados. Para efeito de an\u00e1lise, o problema foi modelado com 96 elementos triangulares (64 n\u00f3s) no programa EDEF e 64 "mesh points" no programa CITATION. Outro ponto a ser destacado refere-se ao fato de que compara\u00e7\u00f5es temporais entre os dois programas n\u00e3o foram realizadas pelo fato de o c\u00f3digo CITATION ter sido executado em um computador CDC-Cyber.

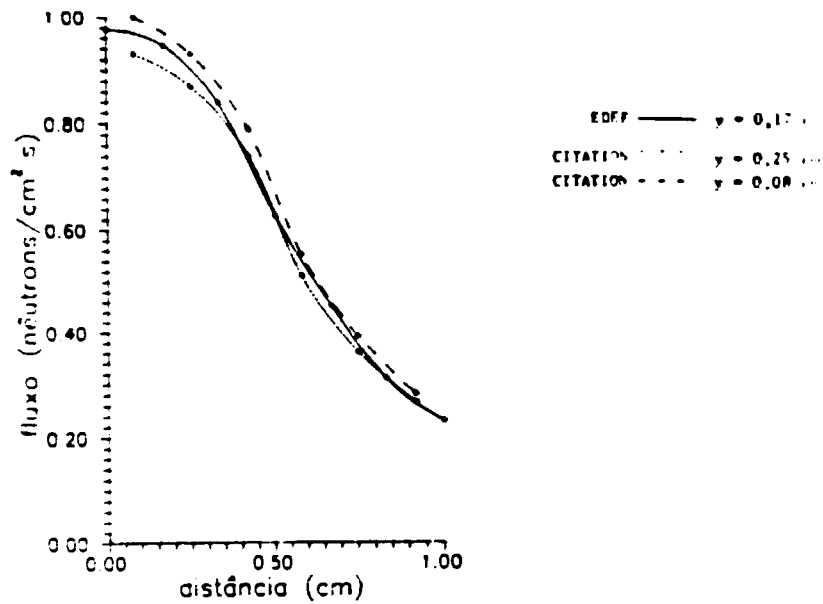


FIGURA A1.17.a - FLUXO DO PROBLEMA 1 - CORTE 1

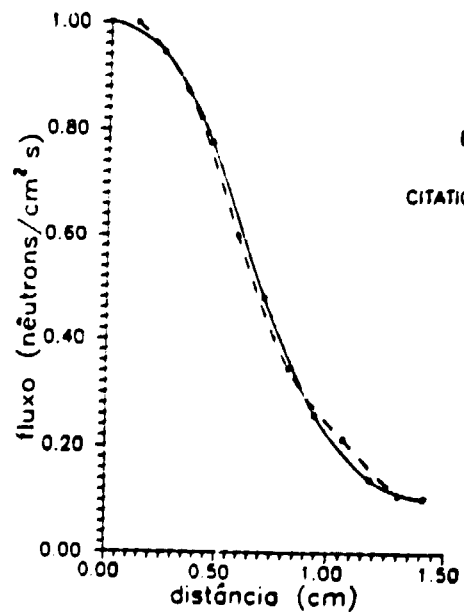
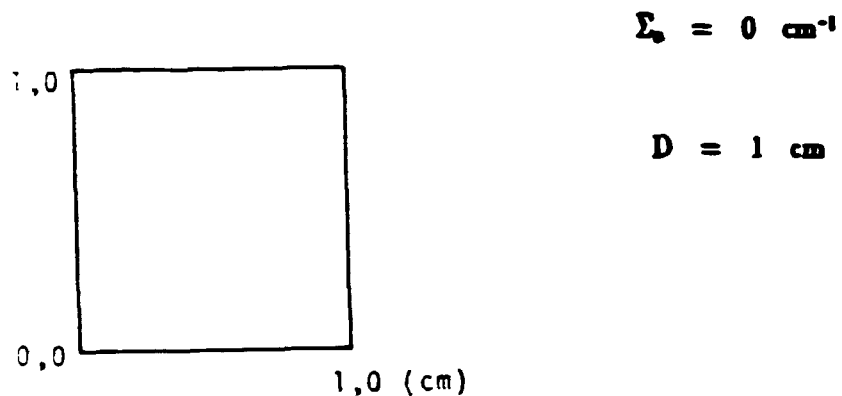


FIGURA A1.17.b - FLUXO DO PROBLEMA 1 - CORTE 2

**PROBLEMA DOIS: Condução de calor.**

**Descrição:** Este problema consiste de uma região, um grupo de energia, duas faces refletidas e duas faces com valor de fluxo definido. O domínio e os parâmetros físicos são dados abaixo.



**FIGURA A1.18 - DOMÍNIO DO PROBLEMA 2**

Este problema foi obtido na referência [58], onde é apresentado o resultado analítico e uma solução obtida por diferenças finitas. Nota-se que, como  $\Sigma_a = 0$ , a equação de difusão se reduz à equação de condução de calor em estado estacionário. Este problema simplificou a comparação de resultados uma vez que os mesmos podem ser calculados pelo programa EDEF nos mesmos pontos que foram fornecidos pela referência [58]. Assim, nota-se que, a menos da origem (0,0), os resultados obtidos pela técnica de elementos finitos encontram-se mais próximos do resultado analítico do que os resultados obtidos pela técnica de diferenças finitas. Abaixo apresenta-se uma tabela com os resultados obtidos pelas duas técnicas numéricas em comparação com a solução analítica:



TABELA A1.1 - RESULTADOS DO PROBLEMA 2

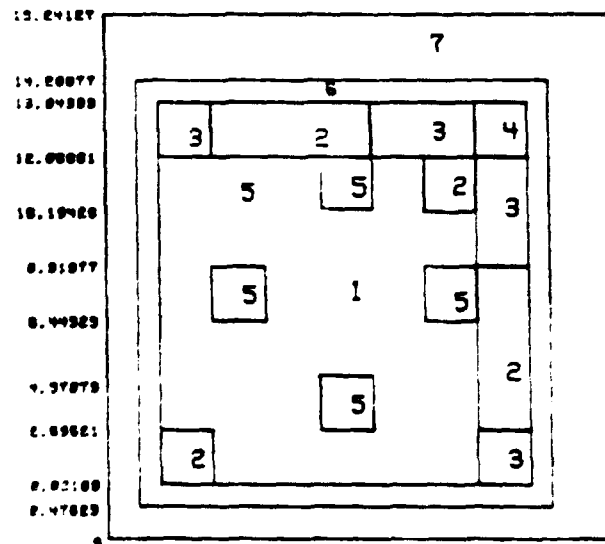
| Posição      | diferenças finitas | analítico | elementos finitos | $\Delta_{er}(\%)$ | $\Delta_{er}(\%)$ |
|--------------|--------------------|-----------|-------------------|-------------------|-------------------|
| (0,0 ; 0,0 ) | 0,2906             | 0,2947    | 0,3013            | 1,39              | 2,24              |
| (0,0 ; 0,25) | 0,2750             | 0,2784    | 0,2805            | 1,22              | 0,75              |
| (0,0 ; 0,5 ) | 0,2262             | 0,2293    | 0,2292            | 1,35              | 0,04              |
| (0,0 ; 0,75) | 0,1379             | 0,1397    | 0,1392            | 1,29              | 0,36              |
| (0,0 ; 1,0 ) | 0,0000             | 0,0000    | 0,0000            | 0,00              | 0,00              |
| (0,25, 0,0 ) | 0,2750             | 0,2789    | 0,2805            | 1,40              | 0,11              |
| (0,25, 0,25) | 0,2605             | 0,2642    | 0,2645            | 1,40              | 0,11              |
| (0,25, 0,5 ) | 0,2148             | 0,2178    | 0,2172            | 1,30              | 0,20              |
| (0,25, 0,75) | 0,1315             | 0,1333    | 0,1327            | 1,35              | 0,45              |
| (0,25, 1,0 ) | 0,0000             | 0,0000    | 0,0000            | 0,00              | 0,00              |
| (0,5 ; 0,0 ) | 0,2262             | 0,2293    | 0,2292            | 1,35              | 0,04              |
| (0,5 ; 0,25) | 0,2148             | 0,2178    | 0,2172            | 1,30              | 0,20              |
| (0,5 ; 0,5 ) | 0,1785             | 0,1811    | 0,1801            | 1,44              | 0,55              |
| (0,5 ; 0,75) | 0,1109             | 0,1127    | 0,1117            | 1,60              | 0,89              |
| (0,5 ; 1,0 ) | 0,0000             | 0,0000    | 0,0000            | 0,00              | 0,00              |
| (0,75, 0,0 ) | 0,1379             | 0,1397    | 0,1392            | 1,29              | 0,36              |
| (0,75, 0,25) | 0,1315             | 0,1333    | 0,1327            | 1,35              | 0,45              |
| (0,75, 0,5 ) | 0,1109             | 0,1127    | 0,1117            | 1,60              | 0,89              |
| (0,75, 0,75) | 0,0711             | 0,0728    | 0,0715            | 2,34              | 1,79              |
| (0,75, 1,0 ) | 0,0000             | 0,0000    | 0,0000            | 0,00              | 0,00              |
| (1,0 ; 0,0 ) | 0,0000             | 0,0000    | 0,0000            | 0,00              | 0,00              |
| (1,0 ; 0,25) | 0,0000             | 0,0000    | 0,0000            | 0,00              | 0,00              |
| (1,0 ; 0,5 ) | 0,0000             | 0,0000    | 0,0000            | 0,00              | 0,00              |
| (1,0 ; 0,75) | 0,0000             | 0,0000    | 0,0000            | 0,00              | 0,00              |
| (1,0 ; 1,0 ) | 0,0000             | 0,0000    | 0,0000            | 0,00              | 0,00              |

Vale ressaltar que este problema foi modelado com 32 elementos triangulares (25 nós) para o programa EDEF enquanto que a referência [58] não cita a modelagem utilizada.

**PROBLEMA TRÊS: "Benchmark Problem ID.13-A2" [59].**

**Descrição:** Este problema consiste em calcular a distribuição de fluxo e o fator de multiplicação para um problema em dois grupos de energia e sete regiões. Na figura A1.19 abaixo ilustra-se o domínio deste problema, enquanto que na tabela A1.2 apresentam-se os valores dos parâmetros físicos homogeneizados por sonda.

Os resultados obtidos pelo programa EDEF foram comparados com os fornecidos pela referência [60], considerado padrão. Na tabela A1.3 apresenta-se uma comparação de valores de fator de multiplicação.



**FIGURA A1.19. DOMÍNIO DO PROBLEMA 3.**

TABELA A1.2 - DADOS DO PROBLEMA 3

| região | grupo de energia | D (cm)  | $\Sigma_r(\text{cm}^{-1})$ | $\nu\Sigma_r(\text{cm}^{-1})$ | $\Sigma_{p-2}(\text{cm}^{-1})$ |
|--------|------------------|---------|----------------------------|-------------------------------|--------------------------------|
| 1      | 1                | 1,31700 | 0,019673                   | 0,005925                      | 0,010690                       |
|        | 2                | 0,58153 | 0,058920                   | 0,098170                      | -                              |
| 2      | 1                | 1,31440 | 0,019676                   | 0,006242                      | 0,010690                       |
|        | 2                | 0,57800 | 0,051740                   | 0,082280                      | -                              |
| 3      | 1                | 1,31492 | 0,019707                   | 0,004820                      | 0,011120                       |
|        | 2                | 0,57501 | 0,047170                   | 0,072000                      | -                              |
| 4      | 1                | 1,31596 | 0,019610                   | 0,004337                      | 0,011130                       |
|        | 2                | 0,57107 | 0,041400                   | 0,059000                      | -                              |
| 5      | 1                | 1,33014 | 0,019753                   | 0,005605                      | 0,010160                       |
|        | 2                | 0,69500 | 0,162600                   | 0,024240                      | -                              |
| 6      | 1                | 1,53468 | 0,010138                   | 0,00                          | 0,009095                       |
|        | 2                | 0,70205 | 0,004394                   | 0,00                          | -                              |
| 7      | 1                | 1,34625 | 0,037020                   | 0,00                          | 0,036825                       |
|        | 2                | 0,29682 | 0,007800                   | 0,00                          | -                              |

TABELA A1.3 - FATOR DE MULTIPLICAÇÃO DO PROBLEMA 3

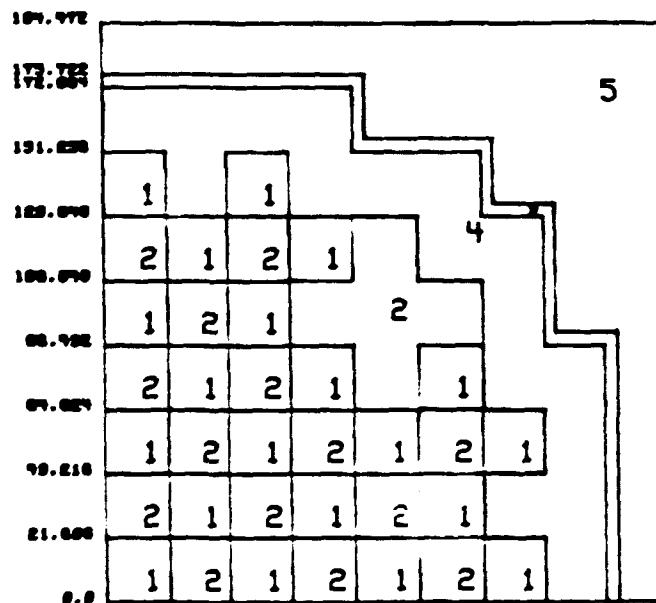
| Benchmark | EDEF     | Erro Relativo |
|-----------|----------|---------------|
| 1,087575  | 1,079419 | 0,75%         |

Neste caso particular, o provável motivo para tão acentuada discrepância entre o resultado obtido com o programa EDEF e o valor padrão refere-se à impossibilidade de um maior detalhamento do problema devido a limitações de linguagem de programação utilizada (no caso, o Turbo-Pascal não permite que o total de variáveis em um bloco do programa exceda a 64 Kbytes, limitando o dimensionamento das matrizes do programa e, desta forma, o tamanho dos problemas que podem ser solucionados)

**PROBLEMA QUATRO: Reator 2D-IAEA [60].**

**Descrição:** Este problema consiste em calcular a distribuição de fluxo e o fator de multiplicação para um problema em dois grupos de energia e cinco regiões. Na figura A1.4 abaixo ilustra-se o domínio deste problema, enquanto que na tabela A1.4 apresentam-se os valores dos parâmetros físicos homogeneizados por zona.

Os resultados obtidos pelo programa EDEF foram comparados com os fornecidos pela referência [60], adotado como padrão. Na tabela A1.5 apresenta-se uma comparação de valores para o fator de multiplicação.



**FIGURA A1.20- DOMÍNIO DO PROBLEMA 4**

TABELA A1.4 - DADOS DO PROBLEMA 4

| região | grupo de energia | D (cm)  | $\Sigma_T(\text{cm}^{-1})$ | $\nu\Sigma_T(\text{cm}^{-1})$ | $\Sigma_{p+\lambda}(\text{cm}^{-1})$ |
|--------|------------------|---------|----------------------------|-------------------------------|--------------------------------------|
| 1      | 1                | 1,41760 | 0,025970                   | 0,005360                      | 0,017420                             |
|        | 2                | 0,37335 | 0,066690                   | 0,104330                      | -                                    |
| 2      | 1                | 1,41970 | 0,025760                   | 0,006010                      | 0,016940                             |
|        | 2                | 0,37300 | 0,076060                   | 0,124720                      | -                                    |
| 3      | 1                | 1,02130 | 0,003220                   | 0,00                          | 0,00                                 |
|        | 2                | 0,57501 | 0,047170                   | 0,00                          | -                                    |
| 4      | 1                | 1,38377 | 0,025164                   | 0,00                          | 0,024241                             |
|        | 2                | 0,29745 | 0,032006                   | 0,00                          | -                                    |
| 5      | 1                | 1,45540 | 0,029500                   | 0,00                          | 0,029030                             |
|        | 2                | 0,28994 | 0,009490                   | 0,00                          | -                                    |

TABELA A1.5 - FATOR DE MULTIPLICAÇÃO DO PROBLEMA 4

| Ono                  | e. r. | Benchmark | EDEF                  | e. r. |
|----------------------|-------|-----------|-----------------------|-------|
| 1,05009 <sup>1</sup> | 1,56% | 1,033999  | 1,052334 <sup>1</sup> | 1,78% |
| 1,03506 <sup>2</sup> | 0,10% |           | 1,034309 <sup>2</sup> | 0,03% |

\* Os resultados apresentados sob o nome Ono referem-se aos resultados da referência [60], sendo que:

<sup>1</sup> refere-se ao domínio discretizado em 9x9 intervalos;

<sup>2</sup> refere-se ao domínio discretizado em 18x18 intervalos.

O resultado adotado como padrão refere-se à solução do problema pelo código CITATION com 170x170 intervalos, conforme referência [59].

## APÊNDICE 2

### PRÉ-PROCESSADOR

Com o objetivo de simplificar a modelagem de domínios em três dimensões, os programas que utilizam a técnica de elementos finitos, de modo geral, utilizam um programa para o pré-processamento dos dados, ou seja, os dados não são fornecidos ao programa que processará os cálculos, mas sim a um programa que se utilize de uma interface mais amigável com o usuário.

Neste sentido, estudou-se a possibilidade de se utilizar o pré-processador do código ANSYS [61]. Entretanto, apenas o módulo de carga deste pré-processador encontra-se disponível nesta instituição e, como o código é utilizado para cálculos estruturais, não há compatibilidade entre os dados requeridos pelo programa ETEFEH com os requeridos pelo código ANSYS. Desta forma, seria necessário um processamento inicial dos dados gerados pelo pré-processador do código ANSYS com o objetivo de compatibilizar os dados, para um posterior processamento dos mesmos pelo programa ETEFEH.

Outra possibilidade seria a utilização de um programa referenciado por Oliveira [62] e desenvolvido por Wood e Williams [34]. Neste segundo trabalho, é apresentado um exemplo de entrada e saída de dados.

Com o conhecimento adquirido destes estudos, foi desenvolvido o programa PREPROC para microcomputadores compatíveis com IBM-PC. Com este programa foram preparados os dados para os diversos problemas solucionados pelo programa ETEFEH nesta dissertação. Para o estudo da parte gráfica, a bibliografia básica foi Foley e Van Dam [63] e Newman [64].

Deve-se salientar que os elementos utilizados pelo programa ETEFEH são tetraédricos e, no entanto, para simplificar a visualização, a entrada de dados se faz por meio de elementos hexaédricos que são, automaticamente, divididos em seis tetraedros cada. Para uma melhor visualização deste processo, considere a figura A2.1 abaixo. Nesta figura, é apresentado um hexaedro com seus nós numerados de '1' até '8'. Na figura A2.2 a seguir, este hexaedro é subdividido em seis tetraedros, sendo que cada nó continua recebendo a mesma numeração que apresentava na figura original.

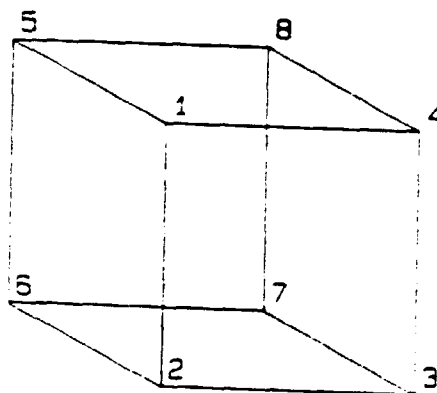


FIGURA A2.1 - CUBO

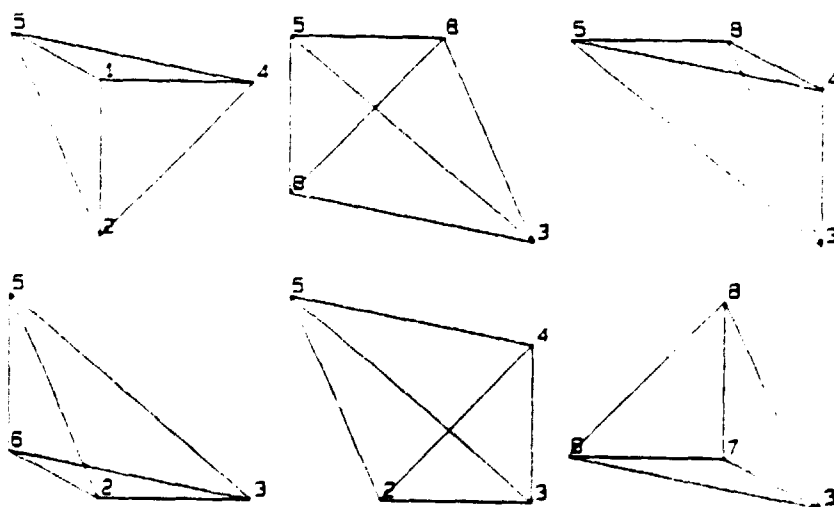


FIGURA A2.2 - CUBO SUBDIVIDIDO EM SEIS TETRAEDROS

Os parâmetros físicos são definidos por regiões, sendo que cada hexaedro pode pertencer a uma região diferente. Este mesmo programa calcula a largura de banda do problema que está sendo solucionado e fornece este resultado ao programa "principal". Com o arquivo de dados completo e correto em mãos, pode-se obter uma cópia em papel do domínio da problema por intermédio do programa PLOTTER, especialmente desenvolvido para este fim.

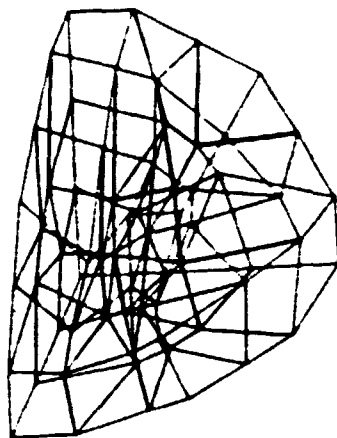
Com o objetivo de simplificar a entrada de dados para certas classes de problemas, permite-se realizar uma translação ou rotação dos dados fornecidos para um plano. Deste modo, problemas como um cilindro, um toroide ou simplesmente um cubo, podem ser gerados de forma simples e eficiente.

Para que os dados sejam fornecidos ao programa de solução da equação de transporte, utilizam-se programas de transferência tais como os programas que se encontram nos pacotes HIRMA [65] (conexão microcomputador-IBM 4381) ou CONNECT [66] (conexão microcomputador-CDC Cyber 180/830).

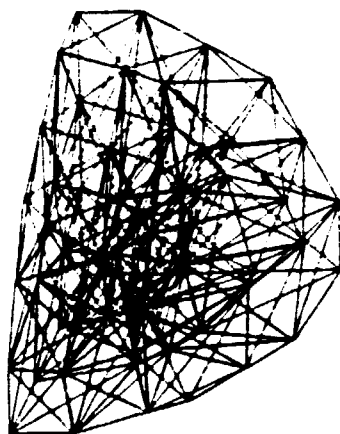
A seguir são apresentados diversos exemplos de entrada de dados com o programa PREPROC, com suas respectivas saídas em papel por meio do programa PLOTTER.

No primeiro exemplo, apresenta-se o caso hipotético de um domínio esférico, em que se representa um oitavo do domínio (por questões de simetria). Este domínio é representado por vinte e sete (27) elementos hexaédricos (figura A2.3) que são, posteriormente, subdivididos em cento e sessenta e dois (162) elementos tetraédricos (figura A2.4).





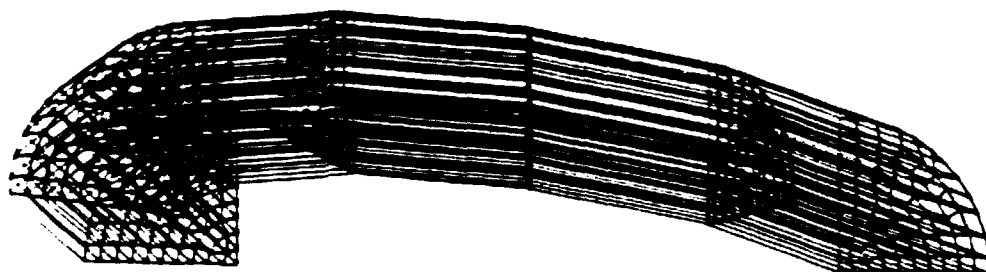
**FIGURA A2.3 – ESFERA SUBDIVIDIDA EM 27 HEXAEDROS**



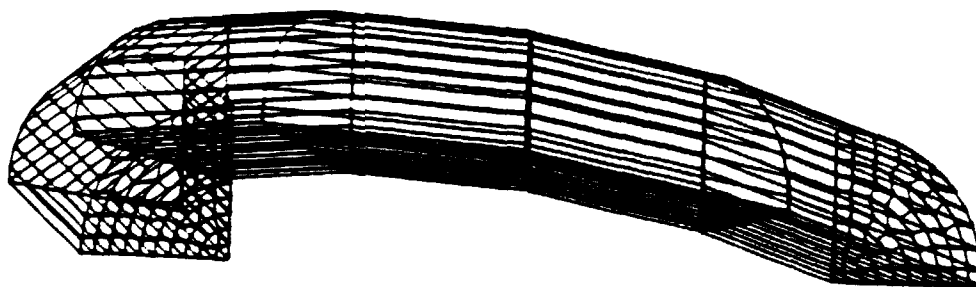
**FIGURA A2.4 – ESFERA SUBDIVIDIDA EM 162 TETRAEDROS**

No segundo exemplo, apresenta-se o caso do toro que foi posteriormente solucionado pelo programa ETEFEH. Este domínio é representado por trezentos e oitenta e quatro (384) elementos hexaédricos que são posteriormente subdivididos em dois mil trezentos e quatro (2304) elementos tetraédricos. Esta figura é de muito difícil visualização quando apresenta todos os elementos (mesmo apresentando-se apenas os elementos hexaédricos). Desta forma, foi desenvolvida a opção para impressão apenas dos elementos do contorno, que diminui em muito o número de linhas impressas

(tanto na tela quanto em papel), sem, no entanto, prejudicar as formas externas da figura. Com isto, a figura A2.5 apresenta o toro subdividido em 384 elementos hexaédricos, enquanto que a figura A2.6 apresenta apenas as linhas de contorno destacadas.

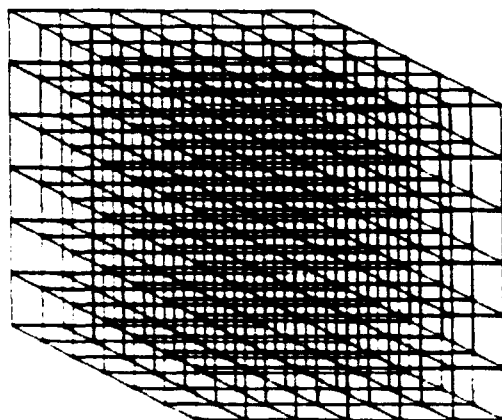


**FIGURA A2.5 – TORO SUBDIVIDIDO EM 384 HEXAEDROS**

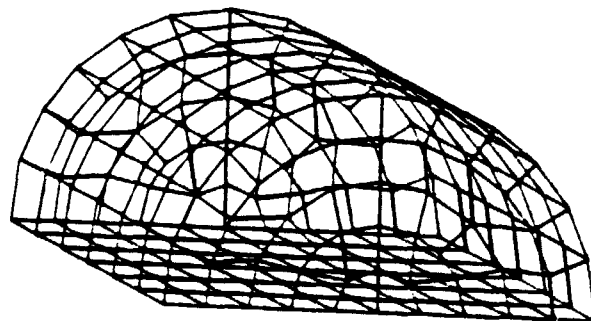


**FIGURA A2.6 – TORO COM O CONTORNO DESTACADO**

As figuras finais (A2.7, A2.8) representam os domínios de dois outros problemas solucionados pelo programa ETEFEH, respectivamente um cubo e um cilindro. No primeiro caso, apresentam-se apenas os hexaedros, enquanto que no segundo caso, apenas o contorno é destacado.



**FIGURA A2.7 - CUBO SUBDIVIDIDO EM 216 HEXAEDROS**



**FIGURA A2.8 - CILINDRO COM O CONTORNO DESTACADO**

Outra facilidade apresentada pelo pré-processador é permitir o destaque do tipo de contorno ou das regiões em que o domínio é subdividido na tela do microcomputador. Caso a opção seja pelo tipo de contorno, as faces cujo contorno é caracterizado por superfície livre são diferenciadas das faces refletidas. Caso a opção seja pelo destaque das regiões, o domínio é apresentado com cada região sendo representada por uma cor diferente.

## APÊNDICE 3

### TRATAMENTO BANDEADO

As matrises que se originaram no desenvolvimento deste trabalho podem apresentar a característica especial de serem não nulas em determinadas regiões bem características e que representam um determinado padrão. Esta característica pode ser utilizada para um armazenamento mais econômico em termos de espaço de memória requerida para solucionar qualquer problema.

Considere um domínio  $\Omega$  subdividido em  $NE$  elementos e composto por  $NM$  nós. No caso particular de um elemento cúbico, cada nó estará ligado a outros quatro nós neste mesmo elemento (considerando que o nó se liga a ele próprio) e um número que não pode ser estabelecido a priori de outros nós de elementos vizinhos. No entanto, o número total de ligações de um determinado nó não será superior a sete (para todos os nós pertencentes a elementos internos) ou inferior a quatro (para os nós de elementos com três faces contíguas pertencentes aos contornos do problema). O ponto importante neste caso, é que a matriz originada deste desenvolvimento poderá ser heptadiagonal (como são as matrises que surgem da aplicação da técnica de diferenças finitas), caso os nós sejam numerados de forma adequada. Para o caso mais geral de um domínio subdividido em elementos de formato genérico (ou ainda para um domínio com diversos tipos de elementos) pode-se obter sempre um pequeno número de diagonais não nulas na matriz dos coeficientes.

Matriz bandeada é o nome geralmente adotado para uma matriz que possui a característica acima. Desta forma, quando o número de nós do nosso sistema é grande e a largura de banda pequena, pode-se armazenar esta matriz de uma forma alternativa que

reduzirá a memória requerida para a solução do problema (por largura de banda entende-se a diferença máxima na numeração de dois nós interligados). Por exemplo, considere o caso abaixo da matriz quadrada  $M$  7x7 bandeda e com largura de banda igual a três (3) e sua respectiva matriz reduzida  $N$ :

$$M = \begin{bmatrix} a & b_1 & d_1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ b_2 & c & e_1 & g_1 & 0 & 0 & 0 \\ d_2 & e_2 & f & h_1 & j_1 & 0 & 0 \\ 0 & g_2 & h_2 & i & k_1 & m_1 & 0 \\ 0 & 0 & j_2 & k_2 & l & n_1 & p_1 \\ 0 & 0 & 0 & m_2 & n_2 & o & q_1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & p_2 & q_2 & r \end{bmatrix}$$

FIGURA A3.1 - MATRIZ QUADRADA 7x7 COM LARGURA DE BANDA 3

$$N = \begin{bmatrix} 0 & 0 & a & b_1 & d_1 \\ 0 & b_2 & c & e_1 & g_1 \\ d_2 & e_2 & f & h_1 & j_1 \\ g_2 & h_2 & i & k_1 & m_1 \\ j_2 & k_2 & l & n_1 & p_1 \\ m_2 & n_2 & o & q_1 & 0 \\ p_2 & q_2 & r & 0 & 0 \end{bmatrix}$$

FIGURA A3.2 - MATRIZ REDUZIDA 5x7 EQUIVALENTE À MATRIZ ANTERIOR.

Neste exemplo, a memória requerida para o armazenamento da matriz foi reduzido em cerca de 40% (De 49 posições de memória para 35 posições). Esta redução será tanto maior quanto maior for a diferença entre o número de nós do problema e a largura de banda conseguida. Desta forma, é muito importante uma numeração que reduza a banda ao máximo, havendo na literatura [67, 68] programas especialmente desenvolvidos com a

finalidade de renumerar os nós de um dado problema de modo a otimizar (minimizar) o valor de banda. Outros trabalhos são realizados com o intuito de otimizar a geração e numeração dos nós [69, 70, 71, 72, 73]. Deve-se notar ainda que a largura da matriz reduzida é igual a  $(2^{\text{BANDA}}-1)$ , o que significa que uma má numeração dos nós poderá originar uma matriz "reduzida" que necessite de mais memória para ser armazenada que a matriz original.

Como proceder para obter uma numeração razoável para os nós é uma técnica que se desenvolve com as aplicações, não estando explicitada na literatura envolvida [53]. Uma primeira sugestão que pode ser dada aos usuários destes programas, é efetuar a numeração dos nós de tal forma que cada nó esteja ligado a nós com numeração o mais próxima possível entre si. Caso o nó de número 1 esteja ligado ao nó de número NM (onde NM é o número de nós do problema), a largura da banda será a máxima possível, resultando em uma matriz "reduzida" muitas vezes maior que a matriz original. Para o caso de um domínio regular, onde cada camada apresenta o mesmo número de nós que a camada precedente, a numeração por camada será a mais eficiente, como pode ser notado no exemplo bidimensional da figura A3.3, apresentada a seguir.

No exemplo da figura A3.3, o valor calculado para banda é igual a 6 (por ser esta a máxima diferença entre a numeração de dois nós adjacentes).

Como sugestão para um caso mais geral, a teoria dos grafos [74] poderia ser muito útil. Por exemplo, ao nó que apresentasse o menor número de ligações seria atribuído o número 1. Cada nó que se ligasse a este receberia a menor numeração ainda disponível. A partir da segunda etapa, seria selecionado o nó de menor número ainda com ligações a numerar e estas ligações seriam numeradas. Para exemplificar, considere a sequência de numeração da figura A3.4 apresentada a seguir.

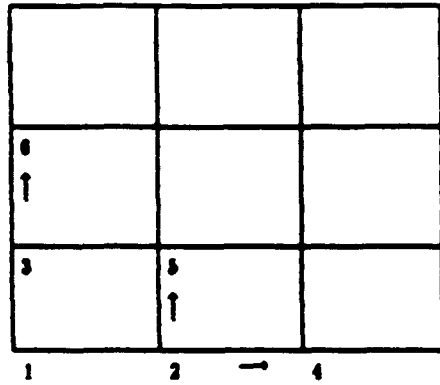
|    |    |    |    |    |    |
|----|----|----|----|----|----|
| 31 | 32 | 33 | 34 | 35 | 36 |
| 25 | 26 | 27 | 28 | 29 | 30 |
| 19 | 20 | 21 | 22 | 23 | 24 |
| 13 | 14 | 15 | 16 | 17 | 18 |
| 7  | 8  | 9  | 10 | 11 | 12 |
| 1  | 2  | 3  | 4  | 5  | 6  |

**FIGURA A3.3 - DOMÍNIO BIDIMENSIONAL NUMERADO DE MODO A MINIMIZAR BANDA**

|        |   |  |
|--------|---|--|
|        |   |  |
|        |   |  |
| 3<br>↑ |   |  |
| 1 →    | 2 |  |

**FIGURA A3.4.A - NUMERAÇÃO DOS NÓS A PARTIR DA TEORIA DOS GRAFOS - PRIMEIRA ETAPA**





**FIGURA A3.4.B - NUMERAÇÃO DOS NÓS A PARTIR  
DA TEORIA DOS GRAFOS - SEGUNDA ETAPA**

Pode-se notar que, neste caso específico, as duas numerações sugeridas levam ao mesmo resultado.

O programa **PREPROC**, que deve ser utilizado para gerar a entrada de dados do programa **ETEFEH**, realiza o cálculo do valor de banda do problema que está sendo solucionado sem, no entanto, otimizá-lo. Também no programa **EDEF** a característica bandada das matrises é utilizada.

## APÊNDICE 4

### PROGRAMA ETEFEE - DADOS DE ENTRADA

Os dados de entrada do programa ETEFEE podem ser fornecidos por meio do programa PREPROC em um microcomputador. Pode-se, também, efetuar a entrada de dados diretamente em um computador de grande porte por meio dos cartões apresentados a seguir.

**1º cartão**

**TÍTULO**

**(A80)**

**2º cartão**

**NM, NHEX, NR, BANDA, ORDEM, ORDEML, ITMAX, TOL, LBDA**

**(714, 2F12.6)**

**3º cartão -  $i=1, \dots, NM$**

**X(i), Y(i), Z(i)**

**(3F8.3)**

**4º cartão -  $i=1, \dots, NHEX$**

**a) LIXO, REGIÃO (i), TREZE, LETRA(i)**

**(A24, I3, A13, A1)**

4o cartão

b) (ELE(j), j=1,...,8)  
(8I5)

5o cartão - i=1,...,4

LIXO

(A10)

6o cartão - i=1,...,NR

a) K, SIGMAT, (SIGESP(j,k), j=1,...,ORDEML)  
(14,2X,5F7.4)

6o cartão

b) (S(j,k), j=1,...,NMAX)  
(6X, 10F7.4,/,6X,6F7.4)

7o cartão - i=1,...,NE

LIXO, (FACE(i,j), j=1,...,4)  
(A15, 4A3)

As variáveis indicadas nos cartões acima correspondem às seguintes informações:

**TÍTULO** - título do problema que está sendo solucionado;

**NM** - número total de nós do problema;

**NHEX** - número total de hexaedros do problema (cada hexaedro será em seguida

subdividido em 6 tetraedros  $\Rightarrow NE = 6^{\circ}NHEX$ );

**NR** - número de regiões do problema;

**BANDA** - largura de banda do problema;

**ORDEM** - ordem da aproximação do problema (estão implementadas apenas as opções **ORDEM=1** e **ORDEM=3**);

**ORDEML** - ordem da expansão da seção de choque de espalhamento (**ORDEML  $\leq$  ORDEM**);

**ITMAX** - número máximo de iterações do problema (se **ITMAX=1**, será solucionada a equação de difusão), caso não ocorra convergência antes;

obs. se **ORDEM=1**, então, obrigatoriamente **ITMAX=1**;

**TOL** - máximo erro relativo permitido entre iterações sucessivas para todo e qualquer momento para admitir convergência;

**LBDA** - valor de lambda para condição de contorno tipo superfície livre;

**X(i), Y(i), Z(i)** - coordenadas do nó (i);

**LIXO** - variável auxiliar - sem efeito;

**TREZE** - variável auxiliar - sem efeito;

**REGIÃO(i)** – variável que indica a que região pertence o hexaedro (i);

**LETRA(i)** – variável que indica se o hexaedro (i) pertence ou não ao contorno;

**ELE(j)** – variável auxiliar que realiza a leitura da topologia do elemento i;

**K** – variável auxiliar para leitura da região;

**SIGMAT(K)** – seção de choque total da região K;

**SIGESP(j,K)** – termo de ordem j da expansão da seção de choque na região K;

$$NMAX = \begin{cases} 1, & \text{ORDEM} = 1 \\ 16, & \text{ORDEM} = 3 \end{cases}$$

**S(j,K)** – expansão de ordem j do termo fonte na região K;

**FACE(i,j)** – tipo de contorno da ~~jésima~~ face do elemento i.

## APÊNDICE 5

### EXPANSÃO DO FLUXO ATÉ QUINTA ORDEM

Neste apêndice é apresentado o desenvolvimento algébrico resultante da expansão do fluxo em harmônicos esféricos até quinta ordem. Neste caso, trinta e seis momentos surgem da expansão:  $\psi_{00}$ ,  $\psi_{10}$ ,  $\psi_{11}$ ,  $\Gamma_{11}$ ,  $\psi_{20}$ ,  $\psi_{21}$ ,  $\Gamma_{21}$ ,  $\psi_{22}$ ,  $\Gamma_{22}$ ,  $\psi_{30}$ ,  $\psi_{31}$ ,  $\Gamma_{31}$ ,  $\psi_{32}$ ,  $\Gamma_{32}$ ,  $\psi_{33}$ ,  $\Gamma_{33}$ ,  $\psi_{40}$ ,  $\psi_{41}$ ,  $\Gamma_{41}$ ,  $\psi_{42}$ ,  $\Gamma_{42}$ ,  $\psi_{43}$ ,  $\Gamma_{43}$ ,  $\psi_{44}$ ,  $\Gamma_{44}$ ,  $\psi_{50}$ ,  $\psi_{51}$ ,  $\Gamma_{51}$ ,  $\psi_{52}$ ,  $\Gamma_{52}$ ,  $\psi_{53}$ ,  $\Gamma_{53}$ ,  $\psi_{54}$ ,  $\Gamma_{54}$ ,  $\psi_{55}$ ,  $\Gamma_{55}$ .

$l=0, m=0$  :

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi_{10} + \frac{\partial}{\partial x} \psi_{11} + \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{11} + \sigma_0 \cdot \psi_{00} = S_{00} , \quad (\text{A5.1})$$

$l=1, m=0$  :

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi_{00} + 2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} + 3 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} + 3 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} + 3 \cdot \sigma_1 \cdot \psi_{10} = 3 \cdot S_{10} , \quad (\text{A5.2})$$

$l=1, m=1$  :

$$3 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} + \frac{\partial}{\partial x} \psi_{00} - \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} + 6 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} + 6 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} + 3 \cdot \sigma_1 \cdot \psi_{11} = 3 \cdot S_{11} , \quad (\text{A5.3})$$

$$3 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} + \frac{\partial}{\partial y} \psi_{00} - \frac{\partial}{\partial y} \psi_{20} + 6 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} - 6 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22} + 3 \cdot \sigma_1 \cdot \Gamma_{11} = 3 \cdot Q_{11} , \quad (\text{A5.4})$$

$l=2, m=0$  :

$$2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} + 3 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} + 6 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} + 6 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} - \frac{\partial}{\partial x} \psi_{11} - \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{11} + 5 \cdot \sigma_2 \cdot \psi_{20} = 5 \cdot S_{20} , \quad (\text{A5.5})$$

$l=2, m=1$  :

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi_{11} + 4 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} + \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} - \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} + 10 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} + 10 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} + 5 \cdot \sigma_2 \cdot \psi_{21} = 5 \cdot S_{21} , \quad (\text{A5.6})$$

$$\frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{11} + 4 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} + \frac{\partial}{\partial y} \psi_{20} - \frac{\partial}{\partial y} \psi_{20} + 10 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} - 10 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22} + 5 \cdot \sigma_2 \cdot \Gamma_{21} = 5 \cdot Q_{21} , \quad (\text{A5.7})$$

$l=2, m=2$  :

$$10 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} + \frac{\partial}{\partial x} \psi_{11} - \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} - \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{11} + \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} + 30 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} + 30 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} + 10 \cdot \sigma_2 \cdot \psi_{22} = 10 \cdot S_{22} , \quad (\text{A5.8})$$

$$10 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} + \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{11} - \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} + \frac{\partial}{\partial y} \psi_{11} - \frac{\partial}{\partial y} \psi_{21} + 30 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} - 30 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22} + 10 \cdot \sigma_2 \cdot \Gamma_{22} = 10 \cdot Q_{22} , \quad (\text{A5.9})$$

$l=3, m=0$  :

$$6 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} + 8 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} - 6 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} - 6 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} + 20 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} + 20 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} + 14 \cdot \sigma_2 \cdot \psi_{20} = 14 \cdot S_{20} , \quad (\text{A5.10})$$

$l=3, m=1$  :

$$2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} + 5 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{41} + \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} - \frac{\partial}{\partial x} \psi_{40} - \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} - \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} + 15 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{42} + 15 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{42} + 7 \cdot \sigma_3 \cdot \psi_{31} = 7 \cdot S_{31} , \quad (\text{A5.11})$$

$$2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} + 5 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{41} + \frac{\partial}{\partial y} \psi_{20} - \frac{\partial}{\partial y} \psi_{40} - \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} + \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22} + 15 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{42} - 15 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{42} + 7 \cdot \sigma_3 \cdot \Gamma_{31} = 7 \cdot Q_{31} , \quad (\text{A5.12})$$

$l=3, m=2$  :

$$2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} + 12 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{42} + \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} - \frac{\partial}{\partial x} \psi_{41} - \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} + \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{41} + 42 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{42} - 42 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{43} + 14 \cdot \sigma_3 \cdot \psi_{32} = 14 \cdot S_{32} , \quad (\text{A5.13})$$

$$2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} + 12 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{42} + \frac{\partial}{\partial y} \psi_{21} - \frac{\partial}{\partial y} \psi_{41} + \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} - \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{41} + 42 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{42} - 42 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{43} + 14 \cdot \sigma_3 \cdot \Gamma_{32} = 14 \cdot Q_{32} , \quad (\text{A5.14})$$

$l=3, m=3$  :

$$14 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{43} + \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} - \frac{\partial}{\partial x} \psi_{42} + 56 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{44} - \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} + \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{42} + 56 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{44} + 14 \cdot \sigma_3 \cdot \psi_{33} = 14 \cdot S_{33} , \quad (\text{A5.15})$$

$$14 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{43} + \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22} - \frac{\partial}{\partial y} \psi_{42} - 56 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{44} + \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} - \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{42} + 56 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{44} + 14 \cdot \sigma_3 \cdot \Gamma_{33} = 14 \cdot Q_{33} , \quad (\text{A5.16})$$

$l=4, m=0$  :

$$8 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} + 10 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{40} - 12 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{31} - 12 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{31} + 30 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{31} + 30 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{31} + 18 \cdot \sigma_4 \cdot \psi_{40} = 18 \cdot S_{40} , \quad (\text{A5.17})$$



$l=4, m=1 :$

$$\begin{aligned} & 3 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{31} + 6 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{31} + \frac{\partial}{\partial x} \psi_{30} - \frac{\partial}{\partial x} \psi_{30} - 3 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{32} - 3 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{32} \\ & + 21 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{32} + 21 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{32} + 9 \cdot \sigma_4 \cdot \psi_{41} = 9 \cdot S_{41} , \end{aligned} \quad (\text{A5.18})$$

$$\begin{aligned} & 3 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{31} + 6 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{31} + \frac{\partial}{\partial y} \psi_{30} - \frac{\partial}{\partial y} \psi_{30} - 3 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{32} + 3 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{32} \\ & + 21 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{32} - 21 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{32} + 9 \cdot \sigma_4 \cdot \Gamma_{41} = 9 \cdot Q_{41} , \end{aligned} \quad (\text{A5.19})$$

$l=4, m=2 :$

$$\begin{aligned} & 4 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{32} + 14 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{32} + \frac{\partial}{\partial x} \psi_{31} - \frac{\partial}{\partial x} \psi_{31} - \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{31} + \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{31} + 56 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{33} + \\ & 56 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{33} - 2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{33} - 2 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{33} + 18 \cdot \sigma_4 \cdot \psi_{42} = 18 \cdot S_{42} , \end{aligned} \quad (\text{A5.20})$$

$$\begin{aligned} & 4 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{32} + 14 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{32} + \frac{\partial}{\partial y} \psi_{31} - \frac{\partial}{\partial y} \psi_{31} + \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{31} - \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{31} + 56 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{33} - \\ & 56 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{33} + 2 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{33} - 2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{33} + 18 \cdot \sigma_4 \cdot \Gamma_{42} = 18 \cdot Q_{42} , \end{aligned} \quad (\text{A5.21})$$

$l=4, m=3 :$

$$\begin{aligned} & 2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{33} + 16 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{33} + \frac{\partial}{\partial x} \psi_{32} - \frac{\partial}{\partial x} \psi_{32} + 72 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{34} - \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{32} + \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{32} + \\ & 72 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{34} + 18 \cdot \sigma_4 \cdot \psi_{43} = 18 \cdot S_{43} , \end{aligned} \quad (\text{A5.22})$$

$$\begin{aligned} & 2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{33} + 16 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{33} + \frac{\partial}{\partial y} \psi_{32} - \frac{\partial}{\partial y} \psi_{32} - 72 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{34} + \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{32} - \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{32} + \\ & 72 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{34} + 18 \cdot \sigma_4 \cdot \Gamma_{43} = 18 \cdot Q_{43} , \end{aligned} \quad (\text{A5.23})$$

$l=4, m=4 :$

$$\begin{aligned} & 18 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{34} + \frac{\partial}{\partial x} \psi_{33} - \frac{\partial}{\partial x} \psi_{33} + 90 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{35} - \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{33} + \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{33} + \\ & 90 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{35} + 18 \cdot \sigma_4 \cdot \psi_{44} = 18 \cdot S_{44} , \end{aligned} \quad (\text{A5.24})$$

$$\begin{aligned}
& 18 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{34} + \frac{\partial}{\partial y} \psi_{23} - \frac{\partial}{\partial y} \psi_{23} - 90 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{23} + \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{23} - \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{23} + \\
& 90 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{23} + 18 \cdot \sigma_4 \cdot \Gamma_{44} = 18 \cdot Q_{44} , \quad (A5.25)
\end{aligned}$$

$l=5, m=0 :$

$$10 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{40} + 20 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{41} - 20 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{41} + 22 \cdot \sigma_5 \cdot \psi_{20} = 22 \cdot S_{20} , \quad (A5.26)$$

$l=5, m=1 :$

$$4 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{41} + \frac{\partial}{\partial x} \psi_{40} - 6 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{42} - 6 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{42} + 11 \cdot \sigma_5 \cdot \psi_{31} = 11 \cdot S_{31} , \quad (A5.27)$$

$$4 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{41} + \frac{\partial}{\partial y} \psi_{40} - 6 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{42} + 6 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{42} + 11 \cdot \sigma_5 \cdot \Gamma_{31} = 11 \cdot Q_{31} , \quad (A5.28)$$

$l=5, m=2 :$

$$6 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{42} + \frac{\partial}{\partial x} \psi_{41} - 6 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{43} - 6 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{43} - \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{41} + 22 \cdot \sigma_5 \cdot \psi_{32} = 22 \cdot S_{32} , \quad (A5.29)$$

$$6 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{42} + \frac{\partial}{\partial y} \psi_{41} + \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{41} + 6 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{43} - 6 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{43} + 22 \cdot \sigma_5 \cdot \Gamma_{32} = 22 \cdot Q_{32} , \quad (A5.30)$$

$l=5, m=3 :$

$$4 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{43} + \frac{\partial}{\partial x} \psi_{42} - \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{43} - 2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{44} - 2 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{44} + 22 \cdot \sigma_5 \cdot \psi_{23} = 22 \cdot S_{23} , \quad (A5.31)$$

$$4 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{43} + \frac{\partial}{\partial y} \psi_{42} + 2 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{44} + \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{42} - 2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{44} + 22 \cdot \sigma_5 \cdot \Gamma_{23} = 22 \cdot Q_{23} , \quad (A5.32)$$

$l=5, m=4$  :

$$2 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \psi_{44} + \frac{\partial}{\partial x} \psi_{43} - \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{43} + 22 \cdot \sigma_3 \cdot \psi_{34} = 22 \cdot S_{44} , \quad (\text{A5.33})$$

$$2 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \Gamma_{44} + \frac{\partial}{\partial y} \psi_{43} + \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{43} + 22 \cdot \sigma_3 \cdot \Gamma_{34} = 22 \cdot Q_{44} , \quad (\text{A5.34})$$

$l=5, m=5$  :

$$\frac{\partial}{\partial x} \psi_{54} - \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{44} + 22 \cdot \sigma_3 \cdot \psi_{35} = 22 \cdot S_{54} , \quad (\text{A5.35})$$

$$\frac{\partial}{\partial y} \psi_{54} + \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{44} + 22 \cdot \sigma_3 \cdot \Gamma_{35} = 22 \cdot Q_{54} . \quad (\text{A5.36})$$

Simplificando este conjunto de 36 equações diferenciais acopladas de primeiro grau para um conjunto de 12 equações acopladas de segundo grau, obtém-se:

$$-\frac{1}{3} \cdot \nabla \cdot \left[ \left[ \frac{1}{\sigma_1} \right] \cdot \nabla \psi_{00} \right] + \sigma_0 \cdot \psi_{00} = S_{00}^* , \quad (\text{A5.37})$$

$$\begin{aligned} & -\frac{4}{3} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \psi_{20} \right] - \frac{9}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \psi_{20} \right] - \frac{6}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} \right] \\ & - \frac{1}{6} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} \right] - \frac{6}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{20} \right] - \frac{1}{6} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{20} \right] \\ & + 5 \cdot \sigma_2 \cdot \psi_{20} = S_{20}^* , \end{aligned} \quad (\text{A5.38})$$

$$\begin{aligned} & -\frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{2}{\sigma_1} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \psi_{21} \right] - \frac{16}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \psi_{21} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] - \\ & - \frac{13}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] - \frac{10}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{21} \right] + \\ & 10 \cdot \sigma_2 \cdot \psi_{21} = S_{21}^* , \end{aligned} \quad (\text{A5.39})$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{2}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} \right] - \frac{16}{7} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} \right] - \frac{10}{7} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} \right] \\
& - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} \right] - \frac{13}{7} \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} \right] + \\
& 10 \cdot \sigma_2 \cdot \Gamma_{21} = \dot{Q}_{21} \quad . \quad (A5.40)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{10}{7} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{2}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} \right] - \frac{16}{7} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} \right] \\
& - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{2}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22} \right] - \frac{16}{7} \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22} \right] + \\
& 10 \cdot \sigma_2 \cdot \psi_{22} = \dot{S}_{22} \quad . \quad (A5.41)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{10}{7} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{2}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} \right] - \frac{16}{7} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} \right] \\
& - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{2}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} \right] - \frac{16}{7} \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} \right] + \\
& 10 \cdot \sigma_2 \cdot \Gamma_{22} = \dot{Q}_{22} \quad . \quad (A5.42)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{4}{7} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{40} \right] - \frac{25}{11} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{40} \right] - \frac{12}{7} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{40} \right] \\
& - \frac{30}{11} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{40} \right] - \frac{12}{7} \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{40} \right] - \frac{30}{11} \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{40} \right] \\
& + 9 \cdot \sigma_4 \cdot \psi_{40} = 9 \cdot \dot{S}_{40} \quad , \quad (A5.43)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{24}{7} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{42} \right] - \frac{42}{11} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{42} \right] - \frac{34}{11} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{42} \right] - \\
& \frac{16}{7} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{42} \right] - \frac{34}{11} \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{42} \right] - \frac{16}{7} \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{42} \right] + \\
& 10 \cdot \sigma_4 \cdot \psi_{42} = \dot{S}_{42} \quad , \quad (A5.44)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{24}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{42} \right] - \frac{42}{\Pi} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{42} \right] - \frac{34}{\Pi} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{42} \right] - \\
& \frac{16}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{42} \right] - \frac{34}{\Pi} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{42} \right] - \frac{16}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{42} \right] + \\
& 10 \cdot \sigma_4 \cdot \Gamma_{42} = Q_{42}^{\circ} .
\end{aligned} \tag{A5.45}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{2}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{43} \right] - \frac{32}{\Pi} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{43} \right] - \frac{39}{\Pi} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{43} \right] - \\
& \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{3}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{43} \right] - \frac{39}{\Pi} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{43} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{3}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{43} \right] + \\
& 18 \cdot \sigma_4 \cdot \psi_{43} = S_{43}^{\circ} .
\end{aligned} \tag{A5.46}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{2}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{43} \right] - \frac{32}{\Pi} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{43} \right] - \frac{39}{\Pi} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{43} \right] - \\
& \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{3}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{43} \right] - \frac{39}{\Pi} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{43} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{3}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{43} \right] + \\
& 18 \cdot \sigma_4 \cdot \Gamma_{43} = Q_{43}^{\circ} .
\end{aligned} \tag{A5.47}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{18}{\Pi} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{44} \right] - \frac{46}{\Pi} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{44} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{4}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{44} \right] \\
& - \frac{46}{\Pi} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{44} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{4}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{44} \right] + \\
& 18 \cdot \sigma_4 \cdot \psi_{44} = S_{44}^{\circ} .
\end{aligned} \tag{A5.48}$$

$$\begin{aligned}
& -\frac{18}{\Pi} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{44} \right] - \frac{46}{\Pi} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{44} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{3}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{44} \right] \\
& - \frac{46}{\Pi} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{44} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{4}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{44} \right] + \\
& 18 \cdot \sigma_4 \cdot \Gamma_{44} = Q_{44}^{\circ} .
\end{aligned} \tag{A5.49}$$

Nestas equações, o termo fonte é dado por:

$$\begin{aligned}
S_{00}^{\circ} = & S_{00} - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{S_{10}}{\sigma_1} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{Q_{11}}{\sigma_1} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{S_{11}}{\sigma_1} \right] - \\
& \frac{1}{6} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} \right] - \frac{1}{6} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{20} \right] + \frac{2}{3} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} \right] + \\
& \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} \right] - \\
& \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} \right] - 2 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22} \right] + 2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} \right] \\
& + 2 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} \right] + 2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} \right] , \tag{A6.50}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_{20}^{\circ} = & 5 \cdot S_{20} - 2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{S_{10}}{\sigma_1} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{S_{11}}{\sigma_1} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{Q_{11}}{\sigma_1} \right] - 3 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{S_{20}}{\sigma_3} \right] - \\
& 6 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{S_{21}}{\sigma_3} \right] - 6 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{Q_{21}}{\sigma_3} \right] - \frac{1}{3} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{00} \right] - \frac{1}{3} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{00} \right] \\
& + \frac{2}{3} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{00} \right] + 2 \cdot \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{9}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] + \frac{12}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] + 2 \cdot \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] - \frac{9}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} \right] + \frac{12}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} \right] + \\
& 2 \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 y} \psi_{22} \right] - \frac{6}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} \right] + \\
& \frac{6}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22} \right] - 2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} \right] - 2 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} \right] - \\
& \frac{6}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} \right] - \frac{6}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} \right] + \frac{12}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{40} \right] - \\
& \frac{6}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{40} \right] - \frac{6}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{40} \right] + \frac{30}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{41} \right] + \\
& \frac{30}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{41} \right] + \frac{30}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{41} \right] + \frac{30}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{41} \right] \\
& + \frac{90}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{42} \right] - \frac{90}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{42} \right] + \frac{90}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{42} \right] \\
& + \frac{90}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{42} \right] , \tag{A6.51}
\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
S_{22}^{\cdot} = & 10 \cdot S_{22} - 10 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{S_{22}}{\sigma_1} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{S_{21}}{\sigma_2} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{S_{11}}{\sigma_1} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{Q_{11}}{\sigma_2} \right] - \\
& \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{Q_{21}}{\sigma_2} \right] - 30 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{S_{22}}{\sigma_2} \right] - 30 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{Q_{22}}{\sigma_2} \right] + \frac{1}{3} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{00} \right] - \\
& \frac{1}{3} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{00} \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{1}{14} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} \right] + \frac{1}{14} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{20} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] + \\
& \frac{5}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] - \frac{2}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{21} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} \right] - \\
& \frac{5}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} \right] + \frac{2}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} \right] + 2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} \right] - \\
& 2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{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 y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} \right] \\
& + \frac{1}{14} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{40} \right] - \frac{1}{14} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{40} \right] - \frac{5}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{41} \right] \\
& - \frac{5}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{41} \right] + \frac{5}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{41} \right] + \frac{5}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{41} \right] \\
& + \frac{60}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{42} \right] - \frac{30}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{42} \right] - \frac{30}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{42} \right] \\
& + 30 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{43} \right] + 30 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{43} \right] + 30 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{43} \right] \\
& + 30 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{43} \right] + 120 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{44} \right] - 120 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{44} \right] \\
& + 120 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{44} \right] + 120 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{44} \right], \tag{A5.54}
\end{aligned}$$



$$\begin{aligned}
Q_{22}^{\cdot} = & 10 \cdot Q_{22} - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{Q_{11}}{\sigma_1} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{Q_{21}}{\sigma_2} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{S_{11}}{\sigma_1} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{S_{21}}{\sigma_2} \right] - \\
& 10 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{Q_{12}}{\sigma_1} \right] - 30 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{Q_{22}}{\sigma_1} \right] + 30 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{S_{22}}{\sigma_2} \right] + \frac{1}{3} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{00} \right] + \\
& \frac{1}{3} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{00} \right] - \frac{1}{6} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{20} \right] - \frac{1}{6} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} \right] - \\
& \frac{1}{14} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} \right] - \frac{1}{14} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{20} \right] + \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] + \\
& \frac{5}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{21} \right] - \frac{2}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} \right] - \\
& \frac{5}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} \right] - \frac{2}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} \right] - 2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22} \right] + \\
& 2 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} \right] + 2 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22} \right] - 2 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} \right] + \\
& \frac{1}{14} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{40} \right] + \frac{1}{14} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{40} \right] + \frac{5}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{41} \right] \\
& - \frac{5}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{41} \right] - \frac{5}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{41} \right] - \frac{5}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{41} \right] \\
& + \frac{60}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{42} \right] - \frac{30}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{42} \right] - \frac{30}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{42} \right] \\
& - 30 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{43} \right] - 30 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{43} \right] + 30 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{43} \right] \\
& + 30 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{43} \right] - 120 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{44} \right] - 120 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{44} \right] \\
& - 120 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{44} \right] + 120 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_2} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{44} \right] , \tag{A5.55}
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
S_{40}^{\circ} = & 9 \cdot S_{40} - 5 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{S_{10}}{\sigma_3} \right] + 15 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{S_{11}}{\sigma_3} \right] + 15 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{Q_{11}}{\sigma_3} \right] - 5 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{S_{10}}{\sigma_3} \right] - \\
& 6 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{S_{21}}{\sigma_3} \right] - 6 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{Q_{21}}{\sigma_3} \right] - 6 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} \right] - 6 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{20} \right] \\
& + \frac{12}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} \right] - \frac{12}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] - \frac{12}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] - \\
& \frac{12}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} \right] + \frac{12}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} \right] + \frac{6}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} \right] \\
& + \frac{6}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22} \right] - \frac{6}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} \right] + \frac{6}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} \right] + \\
& \frac{40}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{41} \right] - \frac{50}{11} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{41} \right] - \frac{30}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{41} \right] \\
& + \frac{60}{11} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{41} \right] + \frac{40}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{41} \right] - \frac{50}{11} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{41} \right] \\
& - \frac{30}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{41} \right] + \frac{60}{11} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{41} \right] + \frac{90}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{42} \right] \\
& + \frac{90}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{42} \right] - \frac{90}{11} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{42} \right] + \frac{90}{11} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{42} \right] \\
& + \frac{90}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{42} \right] + \frac{90}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{42} \right] - \frac{90}{11} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{42} \right] \\
& - \frac{90}{11} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{42} \right] , \tag{A5.56}
\end{aligned}$$











Os momentos originais da expansão podem facilmente ser reconstruídos a partir das equações originais (A5.1 – A5.36), desde que as equações para os nove momentos ( $\psi_{00}, \psi_{20}, \psi_{21}, \Gamma_{21}, \psi_{22}, \Gamma_{22}, \psi_{40}, \psi_{42}, \Gamma_{42}, \psi_{43}, \Gamma_{43}, \psi_{44}, \Gamma_{44}$ ) tenham sido solucionadas convenientemente.



## APÊNDICE 6

### CONDIÇÃO DE CONTORNO DE REFLEXÃO

Em seus diversos trabalhos [38, 39, 40, 41, 42, 43], Fletcher utiliza condições de contorno de três tipos:

- i) continuidade dos momentos nas interfaces;
- ii) superfície livre;
- iii) reflexão.

Neste trabalho, apenas as duas primeiras foram utilizadas no desenvolvimento do Capítulo 5. A terceira condição, como proposta por Fletcher, pode ser escrita: " Em um contorno reflectivo, o momento é zero se a harmônica que o atravessa é ímpar enquanto que a derivada normal é zero no caso par ".

Em nenhum de seus trabalhos Fletcher apresenta qualquer indicação sobre a demonstração de tal condição de contorno, cuja interpretação por si só já é motivo de dúvidas. De seus trabalhos, pode-se supor que as harmônicas pares sejam aquelas em que a soma dos índices dos momentos seja par e a função do ângulo azimutal seja o cosseno, ou, a soma dos índices é ímpar e a função do ângulo azimutal é o seno. Por outro lado, as harmônicas ímpares são aquelas em que a soma dos índices dos momentos é par e a função do ângulo azimutal é o seno, ou, a soma dos índices é ímpar e a função do ângulo azimutal é o cosseno.

Assumindo a interpretação dada acima, coerente com o fato de a harmônica ser dada pelo produto da função associada de Legendre (par se a soma dos índices é par e

ímpar se a soma dos índices é ímpar) pela função do ângulo azimutal (cosseno - par - e seno - ímpar -), o tratamento dispensado a este tipo de condição de contorno pode ser incluído a partir do tratamento apresentado no item 5.1. Neste caso, isolando o termo de contorno da equação 5.10:

$$I = -\alpha_i \cdot n_i \int_{A^o} N_j \cdot \frac{\partial}{\partial x_i} \cdot N_j \cdot dA^o$$

verifica-se facilmente que, no caso de a harmônica ser ímpar, o mesmo tratamento apresentado para condição de contorno tipo superfície livre e harmônica outra que não a dada pelos índices (00) pode ser aqui aplicado (condição de contorno de Dirichlet). Entretanto, se a harmônica é par,  $\Rightarrow \Rightarrow \mathbf{n} \cdot \nabla \psi_{\text{des}} = 0$ . Para este caso, a orientação da superfície influencia no valor da integral que está sendo calculada. Com isto, cada orientação deve ser analisada separadamente.

A6.1 - normal paralela a um dos eixos ortogonais do sistema de coordenadas:  $n_x = n_y = 0$  ( $// \hat{e}_z$ ) ou  $n_x = n_z = 0$  ( $// \hat{e}_y$ ) ou  $n_y = n_z = 0$  ( $// \hat{e}_x$ ):

$$I = -\alpha_i \cdot n_i \int_{A^o} N_j \cdot \frac{\partial}{\partial x_i} \cdot N_j \cdot dA^o = 0.$$

A6.2 - normal paralela a um dos planos ortogonais:

$$a) n_x = 0 \Rightarrow n_y \cdot \frac{\partial}{\partial y} N_j + n_z \cdot \frac{\partial}{\partial z} N_j = 0 \Rightarrow$$

$$I = - \int_{A^o} \alpha_i \cdot n_i \cdot N_j \cdot \frac{\partial}{\partial x_i} \cdot N_j \cdot dA^o = \frac{\alpha_j^2 - \alpha_k^2}{6} n_y \cdot \gamma_j^2 ;$$

$$b) n_y = 0 \Rightarrow n_x \cdot \frac{\partial}{\partial x} N_j^o + n_z \cdot \frac{\partial}{\partial z} N_j^o = 0 \Rightarrow$$

$$I = - \int_{A^o} \alpha_c^o \cdot n_c N_j^o \cdot \frac{\partial}{\partial x_c} N_i^o dA^o = \frac{(\alpha_1^o - \alpha_2^o) n_x \beta_1^o}{6} ;$$

$$c) n_z = 0 \Rightarrow n_x \cdot \frac{\partial}{\partial x} N_j^o + n_y \cdot \frac{\partial}{\partial y} N_j^o = 0 \Rightarrow$$

$$I = - \int_{A^o} \alpha_c^o \cdot n_c N_j^o \cdot \frac{\partial}{\partial x_c} N_i^o dA^o = \frac{(\alpha_1^o - \alpha_2^o) n_x \beta_1^o}{6} .$$

A6.3 - O plano não oferece nenhuma orientação específica, ou seja:  $n_x \neq 0$ ,  $n_y \neq 0$ ,  $n_z \neq 0$ . Desta forma:

$$I = \frac{[(\alpha_2^o - \alpha_1^o) n_y \gamma_j^o + (\alpha_1^o - \alpha_2^o) n_x \beta_j^o]}{6} \quad (A6.1)$$

A equação acima sintetiza as três hipóteses anteriores, a menos do item (c) da hipótese (A6.2). Contudo, se  $n_z=0$ , pode-se forçar  $n_y=-n_x$  na equação acima, levando ao resultado esperado. Desta forma, a equação (5.10) pode ser reescrita agora em sua forma completa, incluindo condição de contorno de reflexão e superfície livre como:

$$LE = \alpha_i \left\{ \frac{(\alpha_1^0 \beta_1^0 \beta_j^0 + \alpha_2^0 \gamma_1^0 \gamma_j^0 + \alpha_3^0 \delta_1^0 \delta_j^0) \Delta^0}{6} + \right.$$

$$\frac{(1 + \delta_{ij}) \sigma_1^0 \Delta^0}{120} + \zeta_r \frac{[(\alpha_2^0 - \alpha_3^0)n_y \gamma_j^0 + (\alpha_1^0 - \alpha_3^0)n_x \beta_j^0] \theta^0}{6} +$$

$$\zeta_v \lambda \left[ \frac{\sigma_0}{\sigma_1} \right] \frac{(1 + \delta_{ij}) \theta^0}{24}, \quad (A6.2)$$

sendo que

$\zeta_r = 1$  para elementos do contorno com condição de contorno tipo reflexão e ordem do harmônico par;

$\zeta_r = 0$  para os demais casos;

$\zeta_v = 1$  para elementos do contorno com condição de contorno tipo superfície livre e momento  $(0,0) \rightarrow \psi_{00}$ ;

$\zeta_v = 0$  nos demais casos.

Pode-se destacar ainda que, para a aproximação P1, ou seja, para a equação de difusão, a formulação acima fica simplesmente reduzida a

$$I = -\alpha_\xi \cdot n_\xi \int_{A^0} N_j^0 \cdot \frac{\partial}{\partial x_\xi} \cdot N_i^0 dA^0 = 0,$$

qualquer que seja a orientação da superfície. Este resultado está em acordo com as formulações usuais da equação de difusão.

Apresenta-se a seguir diversos testes a que o programa ETEFEH foi submetido com a utilização das aproximações P1 e P3 e incluindo condição de contorno de reflexão.

a) Problema número um: Simulação de uma situação unidimensional com a equação de difusão (P-1) e comparação de resultados com o código CITATION e ainda com a solução analítica;

b) Problema número dois: Solução da equação de difusão com simulação de placas paralelas;

c) Problema número três: Solução da equação de difusão em um toróide;

d) Problema número quatro: Solução da equação de transporte em um cilindro e comparação de fluxo total com código DOT.

## PROBLEMA NÚMERO UM

**Título:** Solução da equação de difusão para um reator composto de duas regiões, simulando situação unidimensional para efeito de comparação de resultados com solução analítica.

**Descrição** Este problema pode ser representado em uma dimensão pela figura A6.1 abaixo. As duas regiões apresentam constantes físicas idênticas, sendo que na região 1 tem-se uma fonte uniformemente distribuída e que emite 100 nêutrons/cm<sup>3</sup>/s, enquanto que a região 2 não apresenta fonte.

$$\Sigma_a = 0.5 \text{ cm}^{-1}; \Sigma_f = 1 \text{ cm}^{-1}; D = 0.3333 \text{ cm}; d = 0 \text{ cm}; L = 3 \text{ cm}.$$

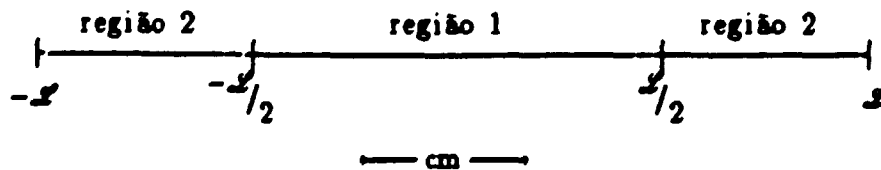


FIGURA 6.1 – DOMÍNIO DO PROBLEMA 1

Condições de contorno:  $\phi(L) = \phi(-L) = 0$ .

A solução analítica é dada por:

$$\phi(x) = \begin{cases} \frac{S_1}{\Sigma_0} \left[ 1 - \alpha \cdot \cosh \left[ x \cdot \sqrt{\frac{\Sigma_0}{D}} \right] \right], & 0 \leq x \leq \frac{\mathcal{L}}{2} \\ \frac{S_1}{\Sigma_0} \cdot \beta \cdot \sinh \left[ (\mathcal{L} - x) \cdot \sqrt{\frac{\Sigma_0}{D}} \right], & \frac{\mathcal{L}}{2} \leq x \leq \mathcal{L} \end{cases}$$

onde:

$$\alpha = \frac{\cosh \left[ \frac{\mathcal{L}}{2} \sqrt{\frac{\Sigma_0}{D}} \right]}{\cosh \left[ \mathcal{L} \sqrt{\frac{\Sigma_0}{D}} \right]},$$

$$\beta = \frac{\sinh \left[ \frac{\mathcal{L}}{2} \sqrt{\frac{\Sigma_0}{D}} \right]}{\cosh \left[ \mathcal{L} \sqrt{\frac{\Sigma_0}{D}} \right]}$$

**QBS:**

1. Por questões de simetria, a solução apresentada representa apenas o domínio  $[0 \leq x \leq \mathcal{L}]$ , sendo que a condição de contorno  $\left. \frac{d}{dx} \phi \right|_{x=0} = 0$  foi incorporada.

Desta forma,  $\phi(-x) = \phi(x)$ ;

2. Este problema foi solucionado em três dimensões pelo programa ETEFEH e também pelo código CITATION. O problema é simétrico nas direções dos eixos  $x$  e  $y$  (condição de contorno de reflexão nas faces paralelas aos planos  $Oxz$  e  $Oyz$ ), sendo que a variação unidimensional do problema proposto é representada unicamente pela variação no eixo  $z$  do problema tridimensional (reflexão no plano  $Oxy$  e superfície livre para o plano paralelo a  $Oxy$  que passa pelo ponto  $(0,0,3)$ ).

**TABELA A6.1 - RESULTADOS PARA O PROBLEMA 1**

| <b>Posição</b> | <b>Solução Analítica</b> | <b>CITATION</b> | <b>ETEFEH</b> |
|----------------|--------------------------|-----------------|---------------|
| 0.000          | 167.358                  |                 | 167.61        |
| 0.125          | 166.974                  | 167.1           | 166.88*       |
| 0.250          | 165.816                  |                 | 166.07        |
| 0.375          | 163.854                  | 164.0           | 163.71*       |
| 0.500          | 161.044                  |                 | 161.29        |
| 0.625          | 157.318                  | 157.6           | 157.07*       |
| 0.750          | 152.591                  |                 | 152.83        |
| 0.875          | 146.750                  | 147.1           | 146.34*       |
| 1.000          | 139.659                  |                 | 139.87        |
| 1.125          | 131.150                  | 131.8           | 130.51*       |
| 1.250          | 121.025                  |                 | 121.19        |
| 1.375          | 109.045                  | 110.0           | 108.06*       |
| 1.500          | 94.930                   |                 | 95.00         |
| 1.625          | 80.695                   | 79.7            | 81.63*        |
| 1.750          | 68.355                   |                 | 68.34         |
| 1.875          | 57.620                   | 57.0            | 58.23*        |
| 2.000          | 48.239                   |                 | 48.18         |
| 2.125          | 39.990                   | 39.6            | 40.38*        |
| 2.250          | 32.680                   |                 | 32.62         |
| 2.375          | 26.138                   | 25.9            | 26.38*        |
| 2.500          | 20.210                   |                 | 20.16         |
| 2.625          | 14.756                   | 14.6            | 14.89*        |
| 2.750          | 9.649                    |                 | 9.62          |
| 2.875          | 4.769                    | 4.7             | 4.81*         |
| 3.000          | 0.000                    |                 | 0.00          |

\* corresponde a valores interpolados no programa ETEFEH, já que o mesmo calcula a variável fluxo nos nós da discretização do domínio.

A discretização deste problema com o código CITATION apresentou 13x13x13 "mesh points", enquanto que com o programa ETEFEH foram utilizados 6x6x12 elementos hexaédricos (total de 2592 elementos tetraédricos).



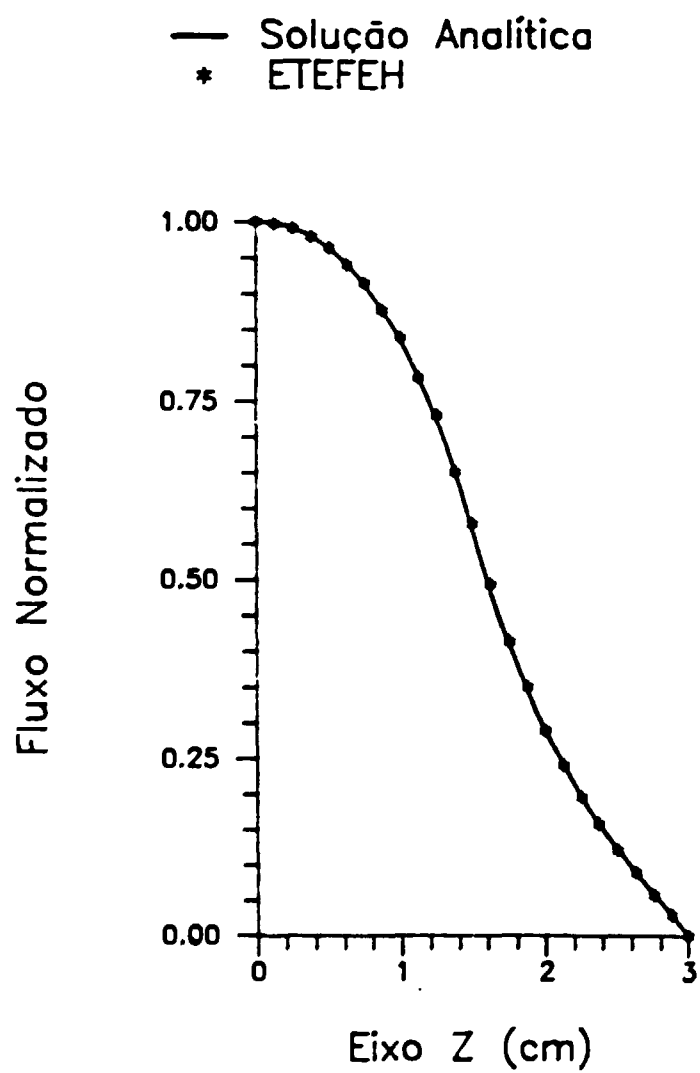


FIGURA A6.2 - FLUXO PARA O PROBLEMA 1.

## PROBLEMA NÚMERO DOIS

**Título:** Solução da equação de difusão para um domínio composto de duas regiões e simulando situação bidimensional, para efeito de análise de sensibilidade com relação às variações em diversos parâmetros.

**Descrição:** Este problema pode ser representado tridimensionalmente pela figura A6.3, sendo que o espaçamento na variável  $z$  é uma das variáveis em estudo. As dimensões do problema nas variáveis  $x$  e  $y$  são de  $-4.5$  cm a  $4.5$  cm, sendo que a região 2 é representada por um quadrado menor de  $-1.5$  cm a  $1.5$  cm. As condições de contorno são de reflexão no eixo  $z$  (simulando simetria ao longo da coordenada  $z$ ) e superfície livre para os demais contornos. As constantes físicas para as duas regiões são as mesmas, valendo  $\Sigma_a = 0.5$  cm<sup>-1</sup>;  $\Sigma_t = 1$  cm<sup>-1</sup>;  $D = 0.333$  cm;  $d = 0.4$  cm. A região interna possui fonte de emitindo 100 partículas/cm<sup>3</sup>/s, enquanto que a região externa não apresenta fonte.

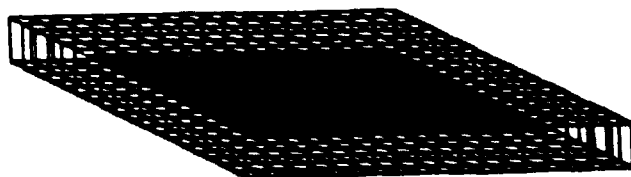


FIGURA A6.3 - DOMÍNIO DO PROBLEMA 2

Um primeiro teste realizado com o programa apresenta o domínio discretizado em  $18 \times 18 \times 1$  elementos hexaédricos, sendo que o espaçamento entre nós consecutivos é constante, valendo 0,5 cm. O espaçamento adotado para a variável  $g$  também é de 0,5 cm. O valor esperado para o fluxo neutrônico calculado pelo programa para as posições de coordenadas  $A \equiv (-1,0; -2,0; 0,0)$ ;  $B \equiv (-1,0; 2,0; 0,0)$ ;  $C \equiv (1,0; -2,0; 0,0)$ ;  $D \equiv (1,0; 2,0; 0,0)$ ;  $E \equiv (-2,0; -1,0; 0,0)$ ;  $F \equiv (-2,0; 1,0; 0,0)$ ;  $G \equiv (2,0; -1,0; 0,0)$  e  $H \equiv (2,0; 1,0; 0,0)$   $I \equiv (-1,0; -2,0; 0,5)$ ;  $J \equiv (-1,0; 2,0; 0,5)$ ;  $K \equiv (1,0; -2,0; 0,5)$ ;  $L \equiv (1,0; 2,0; 0,5)$ ;  $M \equiv (-2,0; -1,0; 0,5)$ ;  $N \equiv (-2,0; 1,0; 0,5)$ ;  $O \equiv (2,0; -1,0; 0,5)$  e  $P \equiv (2,0; 1,0; 0,5)$  é o mesmo (por questões de simetria). No entanto, observa-se que o resultado apresentado pelo programa não corresponde a esta expectativa, apresentado desvios entre os diversos pontos. Com o objetivo de representar um estudo sobre estas variações, este problema apresenta alguns testes com relação às variáveis que podem influenciar o resultado final do problema.

Assim, o segundo teste realizado apresenta o mesmo problema solucionado em geometria equivalente a  $36 \times 36 \times 1$  elementos hexaédricos, correspondendo a um espaçamento de 0,25 cm entre nós vizinhos. O espaçamento com relação ao eixo  $z$  foi mantido em 0,25 cm. Para possibilitar esta simulação, foi utilizada a simetria do problema e considerou-se apenas a parte positiva do domínio (foi solucionado apenas uma quarta parte do problema original), com condição de contorno reflectiva nos planos ortogonais  $Oxz$  e  $Oyz$ . Com esta aproximação, passam a ser considerados como pontos com mesmo valor de fluxo apenas aqueles em que todas as coordenadas são positivas, ou seja, com relação aos pontos do teste anterior, apenas  $D$ ,  $H$ ,  $L$ ,  $P$  possuem mesmo valor de fluxo, uma vez que os demais pontos não existem.

Um terceiro teste realizado com este problema refere-se ao espaçamento adotado no eixo  $z$ , que foi reduzido para 0,05 cm. Foi mantida a relação do segundo teste para os

demais planos, ou seja, espaçamento de 0,25 cm em nós vizinhos. Os pontos de interesse neste caso passam a ser  $D \equiv (1,0; 2,0; 0,0)$ ,  $H \equiv (2,0; 1,0; 0,0)$ ,  $L \equiv (1,0; 2,0; 0,05)$ ,  $P \equiv (2,0; 1,0; 0,05)$ .

Um quarto e último teste realizado neste problema foi reduzir o espaçamento no eixo  $z$  para 0,005 cm, mantendo uma vez mais o espaçamento de 0,25 cm entre nós vizinhos nos demais planos. Neste último caso, os pontos de interesse são:  $D \equiv (1,0; 2,0; 0,0)$ ,  $H \equiv (2,0; 1,0; 0,0)$ ,  $L \equiv (1,0; 2,0; 0,005)$ ,  $P \equiv (2,0; 1,0; 0,005)$ .

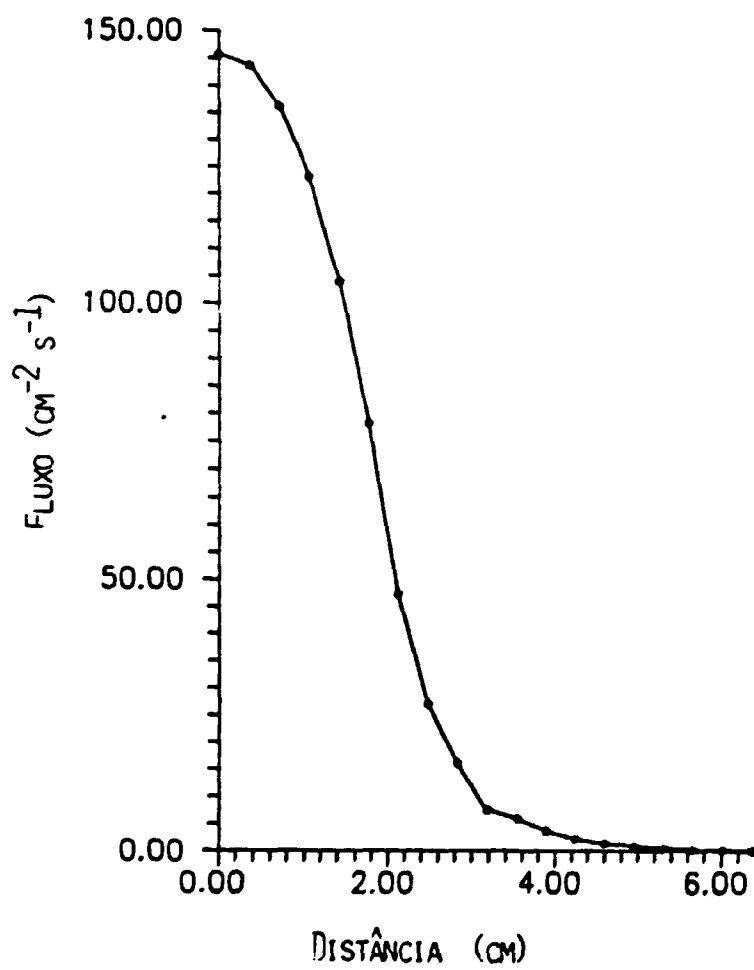
Com os quatro testes realizados, pode ser observado que há grande melhoria na convergência de resultados de um problema para outro, na sequência em que estes foram apresentados. Assim, a tabela A6.2 apresenta o valor obtido para o fluxo nos pontos A, B, C, D, E, F, G, H, I, J, K, L, M, N, O, P para os quatro testes realizados e ainda o valor médio obtido para cada caso teste.

Da observação dos resultados apresentados na tabela A6.2, pode-se inferir que o programa apresenta resultados que tendem a convergir com a diminuição do volume do elemento modelado. Desta forma, desde que o número de elementos para qualquer problema tridimensional é elevado (este problema, por exemplo, apresenta, em suas quatro versões, 1944 elementos tetraédricos e 722 nós, resultando em uma matriz dos coeficientes de  $722 \times 129$ , já utilizando a estrutura bandeada da matriz, com sua melhor otimização), a versão atual do programa ETEFEH apresenta como restrição severa o tratamento de problemas onde o conhecimento preciso do fluxo seja requerido.

A figura A6.4 apresenta o fluxo para o caso teste número 4 deste segundo problema com um corte pela diagonal  $x=y$ ,  $z=0,0$  cm.

**TABELA A6.2 – RESULTADOS PARA O PROBLEMA 2**

| <b>posição</b> | <b>Teste 1</b>   | <b>Teste 2</b>   | <b>Teste 3</b>  | <b>Teste 4</b>  |
|----------------|------------------|------------------|-----------------|-----------------|
| <b>A</b>       | <b>34,371964</b> | <b>-</b>         | <b>-</b>        | <b>-</b>        |
| <b>B</b>       | <b>34,598843</b> | <b>-</b>         | <b>-</b>        | <b>-</b>        |
| <b>C</b>       | <b>34,687592</b> | <b>-</b>         | <b>-</b>        | <b>-</b>        |
| <b>D</b>       | <b>35,197256</b> | <b>34,861029</b> | <b>34,6866</b>  | <b>34,6852</b>  |
| <b>E</b>       | <b>35,305296</b> | <b>-</b>         | <b>-</b>        | <b>-</b>        |
| <b>F</b>       | <b>34,607548</b> | <b>-</b>         | <b>-</b>        | <b>-</b>        |
| <b>G</b>       | <b>34,624518</b> | <b>-</b>         | <b>-</b>        | <b>-</b>        |
| <b>H</b>       | <b>34,198312</b> | <b>34,404169</b> | <b>34,6807</b>  | <b>34,6852</b>  |
| <b>I</b>       | <b>35,218638</b> | <b>-</b>         | <b>-</b>        | <b>-</b>        |
| <b>J</b>       | <b>34,686942</b> | <b>-</b>         | <b>-</b>        | <b>-</b>        |
| <b>K</b>       | <b>34,599504</b> | <b>-</b>         | <b>-</b>        | <b>-</b>        |
| <b>L</b>       | <b>34,349166</b> | <b>34,473619</b> | <b>34,6832</b>  | <b>34,6852</b>  |
| <b>M</b>       | <b>34,224106</b> | <b>-</b>         | <b>-</b>        | <b>-</b>        |
| <b>N</b>       | <b>34,624663</b> | <b>-</b>         | <b>-</b>        | <b>-</b>        |
| <b>O</b>       | <b>34,607416</b> | <b>-</b>         | <b>-</b>        | <b>-</b>        |
| <b>P</b>       | <b>35,273977</b> | <b>34,920662</b> | <b>34,6890</b>  | <b>34,6852</b>  |
| <b>MÉDIO</b>   | <b>34,70</b>     | <b>34,66</b>     | <b>34,6849</b>  | <b>34,6852</b>  |
| <b>DESVIO</b>  | <b>± 0,35</b>    | <b>± 0,23</b>    | <b>± 0,0032</b> | <b>± 0,0009</b> |

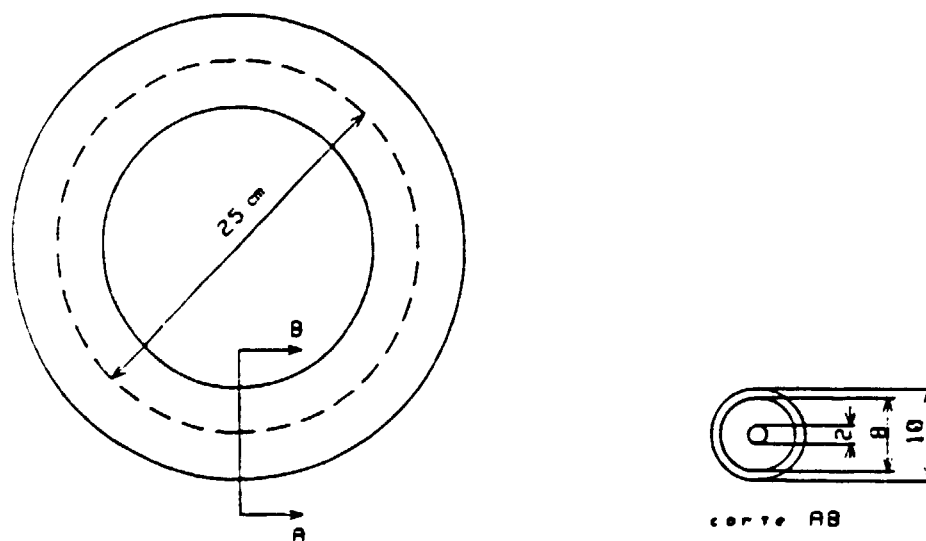


**FIGURA A6.4 – FLUXO PARA O PROBLEMA 2**

### PROBLEMA TRÊS

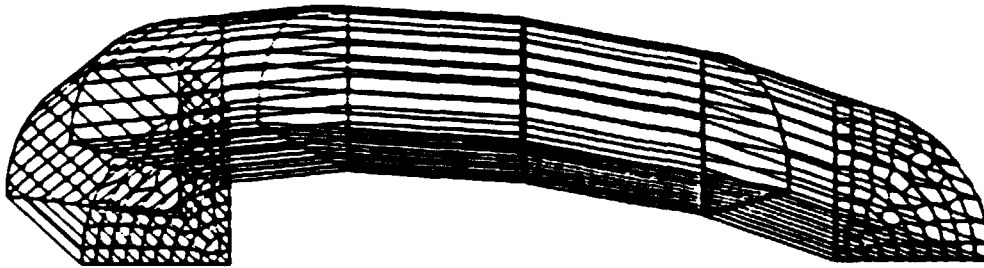
**Título:** Solução da equação de difusão para um domínio toroidal.

**Descrição** Este problema consiste em solucionar a equação de difusão em um toróide com três regiões distintas, representando uma fonte na região central emitindo  $1.0E05$  partículas/cm<sup>3</sup>/s e duas regiões exteriores



**FIGURA A6.5 – DOMÍNIO DO PROBLEMA 3**

Utiliza-se a simetria do problema para a modelagem do mesmo, sendo que a figura A6.5 abaixo representa esta modelagem, resultando que o programa subdivide os elementos hexaédricos representados abaixo por elementos tetraédricos. As constantes físicas de cada região são apresentadas na tabela A6.3. O valor de distância extrapolada utilizado é de 1,5 cm.



**FIGURA A6.6 – MODELAGEM DO PROBLEMA 3**

Na figura anterior, define-se ângulo polar como sendo o ângulo que percorre a circunferência menor do toróide ( $\chi$ ) e ângulo toroidal ( $\varphi$ ) como sendo o ângulo que percorre a circunferência maior do mesmo.

**TABELA A6.3 – DADOS DO PROBLEMA 3**

| Região | $\Sigma_a$ (cm <sup>-1</sup> ) | D (cm)  | S (n/cm <sup>2</sup> /s) | Raio (cm) |
|--------|--------------------------------|---------|--------------------------|-----------|
| 1      | 0,4                            | 0,74074 | 1,0E05                   | 0,5       |
| 2      | 0,4                            | 0,74074 | 0                        | 4,5       |
| 3      | 0,2                            | 0,33333 | 0                        | 5,0       |

As figuras A6.7, A6.8 e A6.9 apresentam o fluxo neutrônico para diversos cortes no domínio, sendo que no primeiro caso é realizado um corte no plano  $s=0$  cm por um raio



a  $45^\circ$  do ângulo polar. No segundo caso, o corte é realizado no plano  $s=0$  cm, passando ainda por  $R_{aio}=3$  cm e a variação se dá no ângulo polar. No terceiro caso, o corte é realizado no plano  $s=0$  cm, passando por  $R_{aio}=1,5$  cm e a variação ocorrendo no ângulo polar. Nas figuras A6.7 e A6.8 o resultado esperado é uma constante para o fluxo (devido à simetria do problema), sendo que o resultado obtido pode apenas ser considerado razoável.

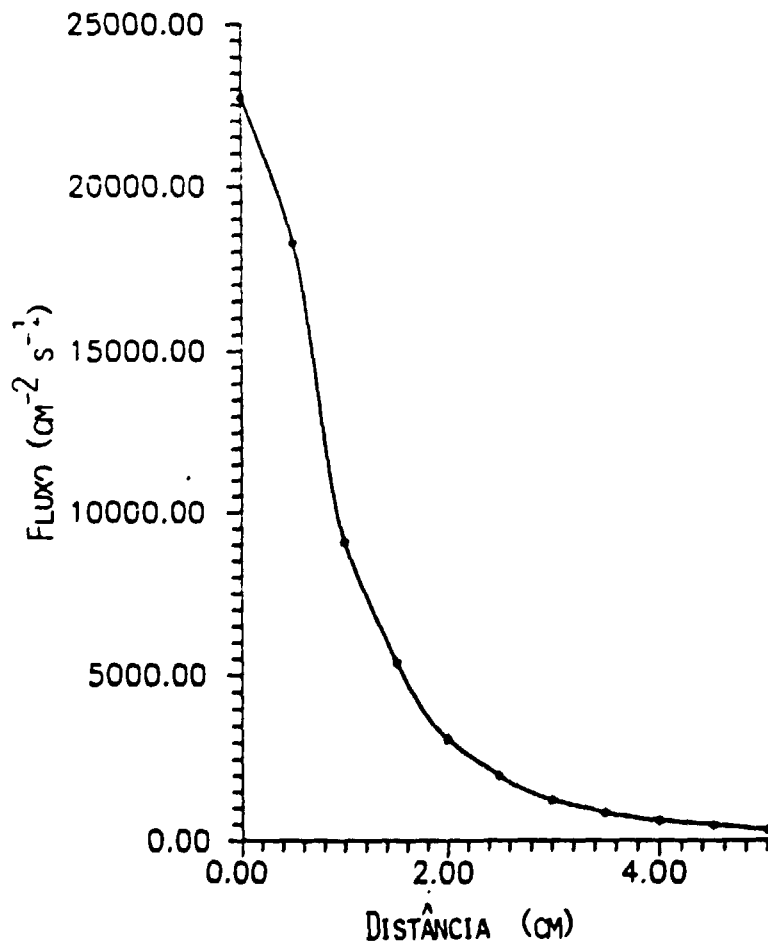
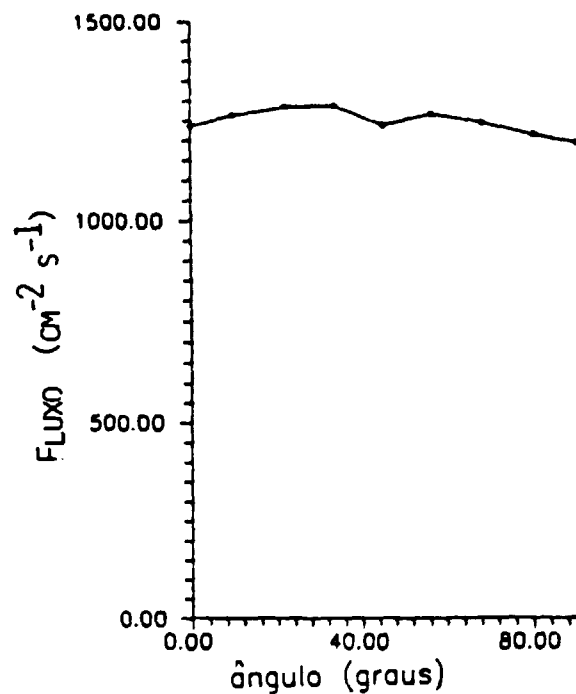
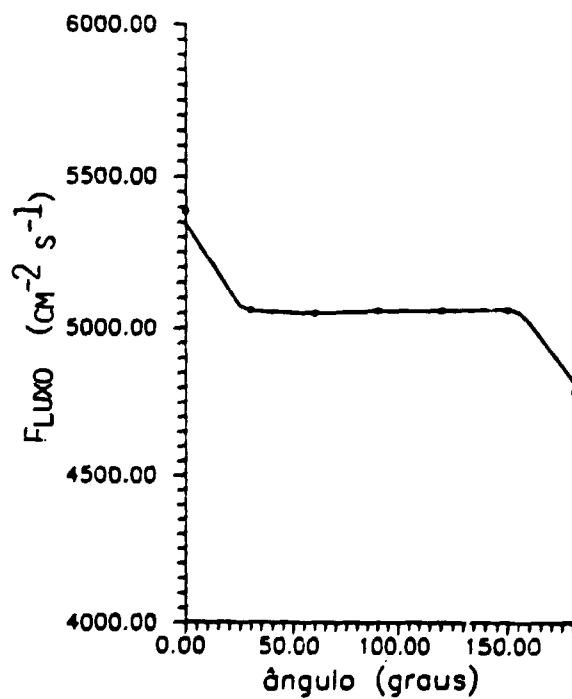


FIGURA A6.7 FLUXO PARA O PROBLEMA 3 - CORTE 1



**FIGURA A6.8 FLUXO PARA O PROBLEMA 3 - CORTE 2**



**FIGURA A6.9 FLUXO PARA O PROBLEMA 3 - CORTE 3**

### PROBLEMA NÚMERO QUATRO

**Título:** Solução da equação de transporte para reator cilíndrico em duas regiões.

**Descrição** Este problema consiste em solucionar a equação de transporte em geometria tridimensional para um reator cilíndrico em duas regiões. As dimensões do cilindro são: altura 6 cm e raio 5 cm. As constantes físicas nas duas regiões são idênticas, sendo que na região interna do cilindro (correspondendo a um cilindro menor com raio de 2,5 cm) há uma fonte emitindo 1 partícula/cm<sup>3</sup>/s. As faces externas do cilindro apresentam condição de contorno de superfície livre, com valor adotado de  $\lambda=0,5$ . O fluxo total obtido por meio do programa ETEFEH (384 hexaedros) será comparado com a solução obtida pelo código DOT (12x12 "mesh points"), adotada como padrão. Na figura A6.10 é representada a modelagem do problema para o programa ETEFEH, ressaltando que os elementos hexaédricos destacados na figura são subdivididos em elementos tetraédricos pelo pré-processador.

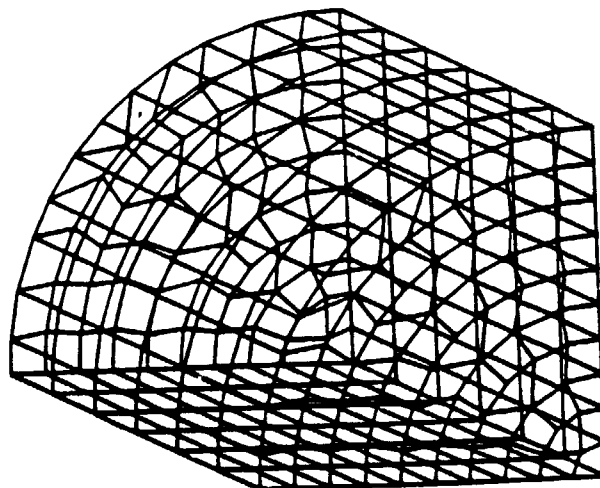


FIGURA A6.10 – MODELAGEM DO PROBLEMA 4

As figuras A6.11 e A6.12 representam o fluxo total por meio de cortes no domínio, sendo que no primeiro caso é apresentado um corte em  $s=3$  cm e por um ângulo de  $45^\circ$  para a solução do programa ETEFEH, enquanto que para o código DOT o corte se dá para  $s=2,75$  cm, sem referência a ângulo (vale ressaltar que o código DOT soluciona a equação de transporte bidimensional, sendo neste exemplo utilizada opção de geometria  $r-s$ ). No segundo caso, o corte adotado para o programa ETEFEH passa por  $x=y=0$  cm e para o código DOT é utilizado  $\text{Raio}=0,25$  cm. Os resultados obtidos neste exemplo para o fluxo total podem ser considerados aceitáveis.

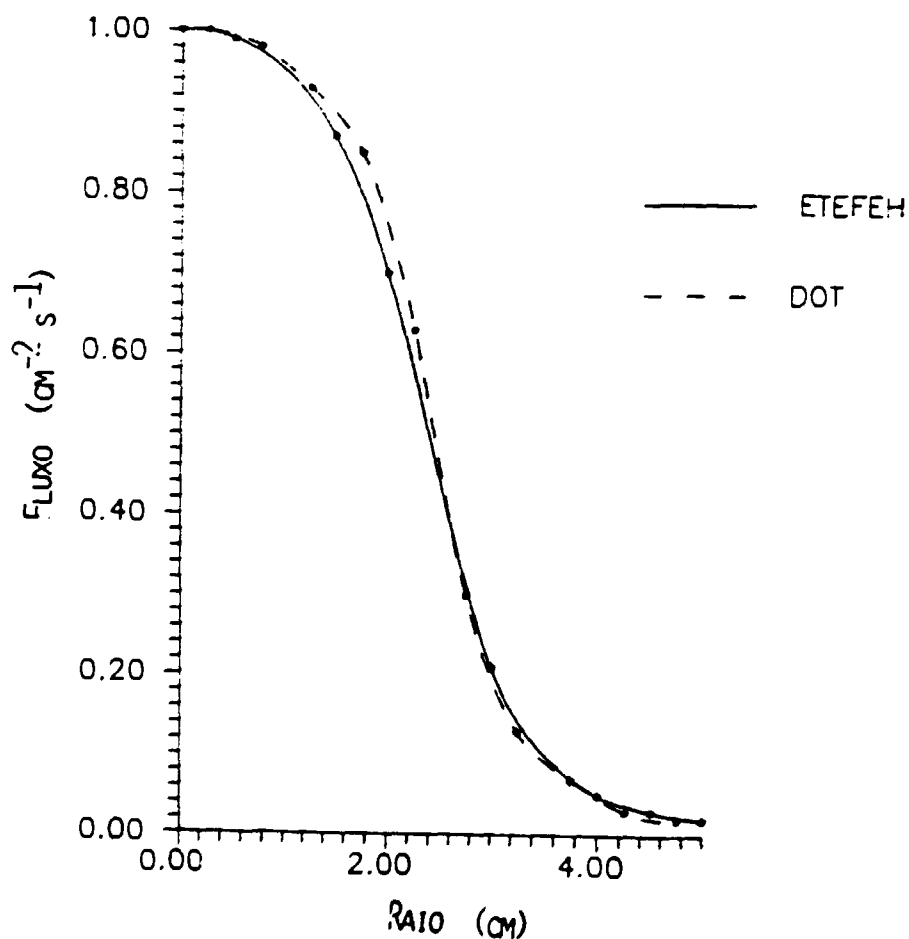
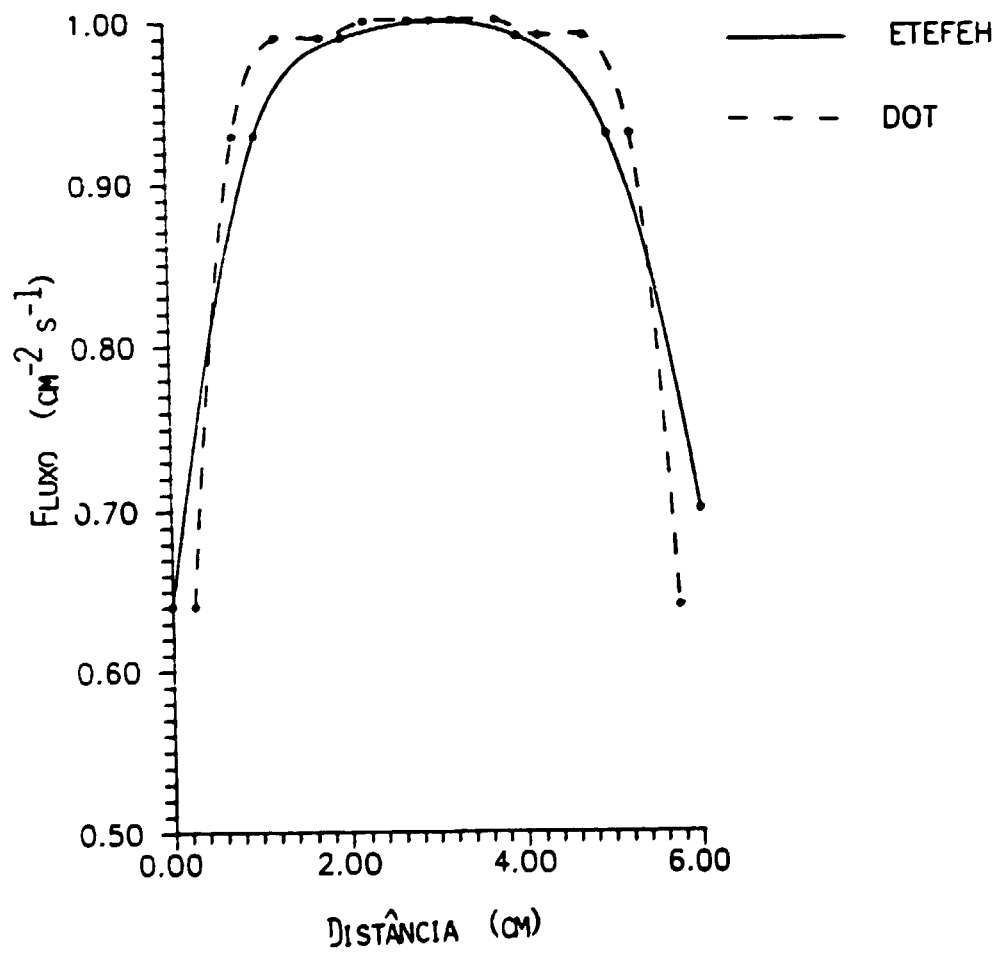


FIGURA A6.11 FLUXO PARA O PROBLEMA 4 - CASO 1



**FIGURA A6.12 - FLUXO PARA O PROBLEMA 4 - CASO 2**