

APLICAÇÃO DO MÉTODO DOS ELEMENTOS  
FINITOS NA SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO  
DE TRANSPORTE

José Rubens Maiorino

e

Wilson José Vieira

Divisão de Física de Reatores  
Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares  
Comissão Nacional de Energia Nuclear  
São Paulo - SP

SUMÁRIO

Neste trabalho é apresentado a aplicação do método dos Elementos Finitos na solução da equação de transporte de segunda ordem (auto-adjunta) para o fluxo de paridade par. A componente angular é tratada através de uma expansão em polinômios de Legendre desacoplada da componente espacial, a qual é aproximada por uma expansão em funções bases, interpolantes em cada elemento espacial. Resultados numéricos são apresentados para vários problemas padrões com o objetivo de ilustrar o método proposto.

## 1. Introdução

O sucesso alcançado pela aplicação do método dos elementos finitos /1/ na solução de equações diferenciais de interesse em vários ramos da Engenharia, principalmente na mecânica estrutural, despertou o interesse da aplicação desta técnica na solução de problemas matemáticos da Engenharia Nuclear, principalmente nos cálculos da distribuição de neutrons no caroço de reatores nucleares. Vários trabalhos tem sido publicados na literatura utilizando-se o método dos elementos finitos para a solução da equação de difusão de neutrons, visando-se o cálculo de parâmetros integrais (fator de multiplicação), e de parâmetros diferenciais (fluxo, distribuição de potência etc), em várias geometrias. Dentre vários trabalhos, cumpre destacar os de Kang e Hansen (1973) /2/, e o de Semenza et alli (1972) /3/, o primeiro aplicando o método dos elementos finitos para discretizar a equação de difusão na sua forma fraca, através do uso de polinômios interpolantes nos elementos (técnica dos resíduos ponderados), e o segundo através do uso de polinômios interpolantes e com a forma variacional da equação de difusão (técnica variacional). Das várias publicações em teoria de difusão de neutrons, (vide o recente encontro sobre métodos matemáticos na Engenharia Nuclear /4/), tem-se concluído que o método dos elementos finitos é uma técnica promissora para o desenvolvimento de poderosos códigos computacionais que descrevam a distribuição neutrônica no caroço, principalmente por: i) a possibilidade do tratamento de geometrias complexas, ii) o uso de um menor número de redes para discretizar o domínio da variável espacial (redes largas), e iii) a precisão numérica dos resultados e a economia em tempo computacional.

Apesar da equação de difusão multigrupo ser adequada para cálculos de criticalidade e distribuição de potência da maioria dos caroços de reatores nucleares, esta não descreve corretamente o comportamento neutrônico em sistemas com fortes heterogeneidades, e em problemas de penetração profunda (blindagem), nos quais a anisotropia angular é dominante. A equação de transporte, na sua forma linear /5/, é o modelo matemático mais adequado para tais situações; além de poder descrever tanto o transporte de neutrons, como o de gamas. Dentre vários métodos de solução da equação de transporte, cumpre destacar o método das ordenadas discretas, ou método SN /6/, e o método de Monte Carlo /7/, o primeiro sendo uma discretização angular e espacial da equação de transporte, e o segundo a simulação

estocástica do processo de transporte. Embora estes dois métodos tenham sido aplicados com sucesso na descrição dos fenômenos de transporte de neutrons e radiação gama, tendo resultado no desenvolvimento de códigos computacionais de uso amplamente aceito pela comunidade técnico-científica, tais como o ANISN e DOT (método  $S_N$ ) e MORSE (método Monte Carlo), estes métodos ainda sofrem de limitações. O método  $S_N$ , possui como desvantagem o efeito raio, devido a discretização angular, da necessidade de redes finas (da ordem do livre caminho médio de interação), além de não ter tido aplicação aceitável em geometrias tridimensional. O método de Monte Carlo, apesar de poder tratar com geometrias complexas, é extremamente dispendioso em termos de tempo computacional. Desta forma, o método dos elementos finitos, pode merecer uma atenção especial como ferramenta de cálculo para superar tais dificuldades, pois em princípio o método possui a mesma capacidade que o método de Monte Carlo para tratar com geometrias complexas, e pode ser competitivo em precisão e velocidade com os métodos determinísticos existentes, tal como o método  $S_N$ .

A aplicação do método dos elementos finitos na solução da equação de transporte é bastante recente, e em síntese tem consistido de duas aproximações. A primeira consiste em aplicar a técnica dos resíduos ponderados à equação de transporte íntegro-diferencial de 1ª ordem, e a segunda a formulação variacional à equação de transporte de segunda ordem para o fluxo de paridade par. Um dos primeiros trabalhos a fazer uso da técnica dos elementos finitos é o de Kaper et alli (1974) /8/, o qual faz uso da segunda formulação. Martin e Duderstadt (1977) /9/, aplicaram o método dos elementos finitos, usando polinômios interpolantes em espaço e ângulo, na forma fraca da equação de transporte de primeira ordem, particularmente em geometria plana, um grupo e meios com fortes heterogeneidades. Recentemente, Ackroyd et alli /10,11,12/, e Galliara e Willians /13/, tem dedicado um grande esforço para aplicar o método dos elementos finitos, através de formulações variacionais derivadas da equação de transporte de 2ª ordem. Nestes trabalhos a componente angular é tratada através de uma expansão em harmônicos esféricos, e a componente espacial através de polinômios interpolantes nos elementos. Entretanto, nestes trabalhos restringiu-se a ordem da expansão angular acoplada ao número de elementos.

O objetivo deste trabalho, é seguir na mesma linha de Ackroyd, ou seja, tratar a variável angular por uma expansão em harmônicos esféricos e usar o método dos elementos finitos para a variável espacial, na solução da equação de transporte de segunda ordem, por

com duas diferenças básicas; i) não acoplando a escolha do número de elementos ao da ordem de expansão angular, e ii) ao invés de usar a formulação variacional usou-se a formulação dos resíduos ponderados. Além disso, na medida em que, neste trabalho procura-se apenas demonstrar a possibilidade de tratar a variável angular desacoplada da variável espacial, restringiu-se a aplicação ao modelo monoenergético, em geometria plana e fontes e meios isotrópicos; porém com um tratamento geral no que concerne ao tipo de problema (fonte fixa, pesquisa de criticalidade), heterogeneidade do meio, e tipo de condições de contorno.

## 2. Análise

Seja a equação de transporte de 1ª ordem, monoenergética, em geometria plana, e com espalhamento e fontes isotrópicas, escrita da maneira usual /5/,

$$\mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi(x, \mu) + \sigma(x) \Psi(x, \mu) = \frac{\sigma_s(x)}{2} \int_{-1}^1 \Psi(x, \mu') d\mu' + S(x),$$

$$0 < x < a, \quad -1 < \mu < 1, \quad (1)$$

onde  $x$  representa a variável espacial,  $\mu$  o cosseno diretor zenital medido a partir do eixo  $x$  (Fig.1),  $\Psi(x, \mu)$  é o fluxo angular,  $\sigma(x)$  e  $\sigma_s(x)$  as secções de choque macroscópicas, total e de espalhamento, e  $S(x)$  a dependência espacial das fontes externas,  $S_{ext}$ , e de fissão, ou seja,

$$S(x) = S_{ext}(x) + \frac{\nu \sigma_f(x)}{k} \int_{-1}^1 \Psi(x, \mu') d\mu', \quad 0 < x < a, \quad (2)$$

com  $\nu$  o número médio de neutrons emitidos por fissão,  $\sigma_f(x)$  a secção de choque macroscópica de fissão, e  $k$  o fator de multiplicação efetivo.

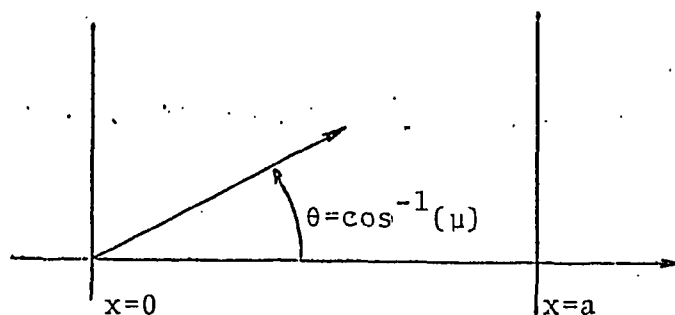


Fig.1 - Geometria do problema.

As condições de contorno usualmente impostas ao fluxo angular, são do tipo:

$$\Psi(0, \mu) = f_1(\mu); \mu > 0, \quad (3.a)$$

ou

$$\Psi(0, \mu) = \Psi(0, -\mu); \mu \in (-1, 1), \quad (3.b)$$

e

$$\Psi(a, \mu) = f_2(\mu); \mu < 0, \quad (4.a)$$

ou

$$\Psi(a, \mu) = \Psi(a, -\mu); \mu \in (-1, 1), \quad (4.b)$$

com  $f_1(\mu)$  e  $f_2(\mu)$  as distribuições incidentes nos contornos, sendo, neste trabalho, restringidas aos seguintes casos:

- i.) incidência isotrópica;  $f_1(\mu)$  e/ou  $f_2(\mu) = 1$ ,
- ii.) superfície livre;  $f_1(\mu)$  e/ou  $f_2(\mu) = 0$ ,
- iii.) feixe incidente,  $f_1(\mu) = \frac{1}{\mu_0} \delta(\mu - \mu_0)$ , e/ou  $f_2(\mu) = \frac{1}{\mu a} \delta(\mu - \mu a)$
- iv.) incidência cossenoidal,  $f_1(\mu) = \sum_{\beta_1} \alpha_1 \mu^{\beta_1}$  e/ou

$$f_2(\mu) = \sum_{\beta_2} \alpha_2 \mu^{\beta_2},$$

e as condições (3.b) e (4.b) indicam as condições de reflexão total.

Definindo os fluxos angulares de paridade par (+) e ímpar (-), por,

$$\Psi^\pm(x, \mu) = \frac{1}{2} (\Psi(x, \mu) \pm \Psi(x, -\mu)), \quad \mu \in (-1, 1), \quad (5)$$

pode-se derivar,

$$\Psi^-(x, \mu) = -\frac{\mu}{\sigma(x)} \frac{\partial}{\partial x} \Psi^+(x, \mu), \quad (6)$$

e a equação de transporte de 2º ordem para o fluxo de paridade par,

$$\begin{aligned} -\mu \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{\mu}{\sigma(x)} \frac{\partial}{\partial x} \psi^+(x, \mu) \right] + \sigma(x) \psi^+(x, \mu) = \\ = \sigma_S(x) \int_0^1 \psi^+(x, \mu') d\mu' + S(x), \quad 0 < x < a. \end{aligned} \quad (7)$$

O objetivo deste trabalho é solucionar a Eq.(7) para o fluxo de paridade par, sendo que uma vez esta grandeza encontrada, o fluxo de paridade ímpar pode ser encontrado através da Eq. (6), e portanto a solução geral da Eq. (1) pode ser encontrada através das Eqs. (5). Mais além, nota-se que uma vez encontrado o fluxo angular de paridade par, o fluxo total pode ser calculado por,

$$\phi(x) = \int_{-1}^1 \Psi(x, \mu') d\mu' = 2 \int_0^1 \psi^+(x, \mu') d\mu'. \quad (8)$$

Para solucionar a Eq. (7), inicialmente nota-se que as condições de contorno para o fluxo de paridade par são dadas por,

$$\psi^+(0, \mu) = f_1(\mu) + \left[ \frac{\mu}{\sigma(x)} \frac{\partial}{\partial x} \psi^+ \right]_{x=0}, \quad \mu > 0, \quad (8.a)$$

e

$$\psi^+(0, \mu) = f_1(-\mu) - \left[ \frac{\mu}{\sigma(x)} \frac{\partial}{\partial x} \psi^+ \right]_{x=0}, \quad \mu < 0, \quad (8.b)$$

ou

$$\left[ \frac{\partial}{\partial x} \psi^+ \right]_{x=0} = 0; \quad \mu \in (-1, 1), \quad (8.c)$$

e

$$\psi^+(a, \mu) = f_2(-\mu) - \left[ \frac{\mu}{\sigma(x)} \frac{\partial}{\partial x} \psi^+ \right]_{x=a}, \quad \mu > 0, \quad (9.a)$$

e

$$\psi^+(a, \mu) = f_2(\mu) + \left[ \frac{\mu}{\sigma(x)} \frac{\partial}{\partial x} \psi^+ \right]_{x=a}, \quad \mu < 0, \quad (9.b)$$

ou

$$\left[ \frac{\partial}{\partial x} \psi^+ \right]_{x=a} = 0; \quad \mu \in (-1, 1), \quad (9.c)$$

com as condições dadas pelas Eqs. (8.c) e (9.c) indicando a condição de reflexão total, e as restantes equivalentes as condições de fluxo incidente nos contornos.

Ao invés de aplicar o método dos elementos finitos usando uma formulação variacional, conforme o tratamento de Ackroyd, prefere-se usar a técnica dos resíduos ponderados, por julgar-se esta formulação mais simples, e então pode-se multiplicar a equação de transporte de 2ª ordem por uma função ponderação  $\Phi(x, \mu)$ , e integrar-se no domínio espacial-angular para obter-se, após usar-se as condições de contorno dadas pelas Eqs. (8) e (9), a forma fraca da equação de transporte de 2ª ordem, ou seja:

$$\begin{aligned} & \int_0^a \int_{-1}^1 \sigma^{-1}(x) \left( \mu \frac{\partial}{\partial x} \Psi^+(x, \mu) \right) \left( \mu \frac{\partial}{\partial x} \Phi(x, \mu) \right) dx d\mu + \\ & \int_0^a \int_{-1}^1 \sigma(x) \Phi(x, \mu) \Psi^+(x, \mu) dx d\mu \\ & - \int_0^a \int_{-1}^1 \sigma_s(x) \Phi(x, \mu) \left( \int_0^1 \Psi^+(x, \mu') d\mu' \right) dx d\mu + 2la \int_0^1 \mu \Phi(a, \mu) \Psi^+(a, \mu) d\mu \\ & + 2lo \int_0^1 \mu \Phi(0, \mu) \Psi^+(0, \mu) d\mu = \int_0^a \int_{-1}^1 S(x) \Phi(x, \mu) dx d\mu + 2la \int_0^1 \mu \Phi(a, \mu) f_2(-\mu) d\mu \\ & + 2lo \int_0^1 \mu \Phi(0, \mu) f_1(\mu) d\mu, \end{aligned} \quad (10)$$

com  $lo$  e/ou  $la$  igual a zero no caso de reflexão total, e igual a um no caso de outro tipo de condição de contorno.

Para a introdução do método dos elementos finitos, divide-se o domínio da variável independente  $x \in (0, a)$ , em  $N$  subdomínios, ou elementos, de largura  $h_i = x_i - x_{i-1}$ , com  $x_0 = 0$  e  $x_N = a$ , e propõem-se como solução da Eq. (10),

$$\Psi^+(x, \mu) = \sum_{\ell=0}^L \sum_{i=0}^N \left( \frac{4\ell+1}{2} \right) a_i^{(\ell)} \vartheta_i(x) P_{2\ell}(\mu), \quad (11)$$

com  $P_{2\ell}(\mu)$  os polinômios de Legendre,  $\vartheta_i(x)$  as funções interpolantes no elemento  $\underline{i}$ , e os coeficientes  $a_i^{(\ell)}$  a serem determinados. Inicialmente, nota-se que as funções interpolantes devem ser escolhidas de maneira que,

$$\vartheta_i(x_j) = \begin{cases} 1 & ; i=j \\ 0 & ; i \neq j \end{cases}, \quad (12)$$

então que  $a_i^{(0)}$  é metade do valor do fluxo total no nó  $x_i$ . Assim, por exemplo pode-se escolher as funções interpolantes lineares, como:

$$\vartheta_0(x) = \begin{cases} \frac{x_1 - x}{x_1 - x_0} & ; (x_0 \leq x \leq x_1) \\ 0 & ; (x_1 \leq x \leq x_N) \end{cases}$$

$$\vartheta_i(x) = \begin{cases} 0 & ; (x_0 \leq x \leq x_{i-1}) \\ \frac{x - x_{i-1}}{x_i - x_{i-1}} & ; (x_{i-1} \leq x \leq x_i) \\ \frac{x_{i+1} - x}{x_{i+1} - x_i} & ; (x_i \leq x \leq x_{i+1}) \\ 0 & ; (x_{i+1} \leq x \leq x_N) \end{cases} \quad (13)$$

e

$$\vartheta_N(x) = \begin{cases} 0 & ; (x_0 \leq x \leq x_{N-1}) \\ \frac{x - x_{N-1}}{x_N - x_{N-1}} & ; (x_{N-1} \leq x \leq x_N) \end{cases}$$

Desta forma, escolhendo a função ponderação,  $\Phi(x, \mu)$ , como,

$$\Phi(x, \mu) = \vartheta_j(x) P_{2n}(\mu) ; \quad j=0, 1, 2, \dots, N$$

$$n=0, 1, 2, \dots, L, \quad (14)$$

pode-se obter, a partir da Eq. (10), um sistema de  $(N+1) \times (L+1)$  equações lineares para os coeficientes  $a_i^{(\ell)}$ , onde  $N$  é o número de elementos e  $L$  a ordem da aproximação angular, dado por:

$$\sum_{\ell=0}^L \sum_{i=0}^N A_{(j,i)}^{(n,\ell)} a_i^{(\ell)} = S_j^{(n)} \quad , \quad j=0, 1, \dots, N$$

$$n=0, 1, \dots, L \quad , \quad (15)$$



ou em forma matricial

$$\begin{vmatrix} \Delta_{00} & \Delta_{01} & \Delta_{02} & \dots & \Delta_{0L} \\ \Delta_{10} & \Delta_{11} & \Delta_{12} & \dots & \Delta_{1L} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \dots & \cdot \\ \Delta_{L0} & \Delta_{L1} & \Delta_{L2} & \dots & \Delta_{LL} \end{vmatrix} \begin{vmatrix} \alpha_0 \\ \alpha_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \alpha_L \end{vmatrix} = \begin{vmatrix} \xi_0 \\ \xi_1 \\ \cdot \\ \cdot \\ \cdot \\ \xi_L \end{vmatrix} \quad (16)$$

onde, devido a escolha das funções interpolantes,  $\vartheta_i(x)$ , cada bloco  $\Delta_{n\ell}$ , é uma matriz tridiagonal da forma,

$$\Delta_{n\ell} = \begin{vmatrix} A_{0,0}^{(n,\ell)} & A_{0,1}^{(n,\ell)} & \dots & \dots & 0 \\ A_{1,0}^{(n,\ell)} & A_{1,1}^{(n,\ell)} & A_{1,2}^{(n,\ell)} & \dots & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & \dots & \dots & A_{N,N-1}^{(n,\ell)} & A_{N,N}^{(n,\ell)} \end{vmatrix} \quad (17)$$

com,

$$A_{j,i}^{(n,\ell)} = F_{ij} \Gamma_{n,\ell} + 2R_{ij} \delta_{n,\ell} - 2E_{ij} \delta_{n,0} \delta_{\ell,0} + 2C_{ij} \Pi_{n,\ell} \quad (18)$$

onde a matriz tridiagonal devido ao termo de fuga,

$$F_{ij} = \int_0^{a-\sigma} (x) \left( \frac{\partial}{\partial x} \vartheta_i(x) \right) \left( \frac{\partial}{\partial x} \vartheta_j(x) \right) dx, \quad (19)$$

pode ser calculada, usando-se a função interpolação dada pela equação (13), como,

$$F_{0,0} = \frac{1}{\sigma_0^+ h_1} \quad (20.a)$$

$$F_{i,i} = \frac{1}{\sigma_i^- h_i} + \frac{1}{\sigma_i^+ h_{i+1}} ; i \neq 0, i \neq N, \quad (20.b)$$

$$F_{i,i+1} = - \frac{1}{\sigma_i^+ h_{i+1}} , i = 0, 1, 2, \dots, (N-1), \quad (20.c)$$

$$F_{i,i-1} = - \frac{1}{\sigma_i^- h_i} , i = 1, 2, \dots, N, \quad (20.d)$$

c

$$F_{N,N} = \frac{1}{\sigma_N^- h_N} , \quad (20.e)$$

onde  $\sigma_i^+$  indica o valor da secção de choque macroscópica total, a esquerda (-), ou a direita, (+) do nó "i". Mais além, a matriz tri-diagonal devido ao termo de remoção,

$$R_{ij} = \int_0^a \sigma(x) \vartheta_i(x) \vartheta_j(x) dx, \quad (21)$$

ou, usando-se a função interpolação linear, pode ser calculada,

$$R_{00} = \frac{\sigma_0^+ h_1}{3}, \quad (22.a)$$

$$R_{ii} = \frac{\sigma_i^- h_i}{3} + \frac{\sigma_i^+ h_{i+1}}{3}, \quad \begin{matrix} i \neq 0 \\ i \neq N \end{matrix} \quad (22.b)$$

$$R_{i,i+1} = \sigma_i^+ \frac{h_{i+1}}{6} , i = 0, 1, 2, \dots, (N-1) \quad (22.c)$$

$$R_{i,i-1} = \sigma_i^- \frac{h_i}{6} , i = 1, 2, \dots, N \quad (22.d)$$

e

$$R_{N,N} = \sigma_N^- \frac{h_N}{3} , \quad (22.e)$$

e a matriz tridiagonal devido ao termo de espalhamento,

$$E_{ij} = \int_0^a \sigma_s(x) \vartheta_i(x) \vartheta_j(x) dx, \quad (23)$$

por fórmulas equivalentes as Eqs.(22), com a diferença que ao invés da secção de choque total ( $\sigma_i^+$ ), usa-se a secções de choque de espalhamento ( $\sigma_{s_i}^+$ ). O termo devido ao contorno,

$$C_{ij} = \lambda_0 \vartheta_i(x_0) \vartheta_j(x_0) + \lambda_a \vartheta_i(x_N) \vartheta_j(x_N),$$

possue, devido as funções interpolações, apenas dois termos na diagonal principal, sendo dados por,

$$C_{00} = \lambda_0, \quad C_{NN} = \lambda_a, \quad e \quad C_{ij} = 0; \quad i, j \neq 0 \text{ e } N \quad (24)$$

As matrizes  $\Gamma_{n,\ell}$  e  $\Pi_{n,\ell}$ , definidas como

$$\Gamma_{n,\ell} = (4\ell+1) \int_{-1}^1 \mu^2 P_{2\ell}(\mu) P_{2n}(\mu) d\mu, \quad (25)$$

e

$$\Pi_{n,\ell} = (4\ell+1) \int_0^1 \mu P_{2\ell}(\mu) P_{2n}(\mu) d\mu, \quad (26)$$

podem ser calculadas de,

$$\begin{aligned} \Gamma_{n,\ell} = & \frac{1}{(4n+1)} (2n+1)(2\ell+1) \frac{2}{4\ell+3} \delta_{\ell,n} + \frac{4\ell(2n+1)}{4n+3} \delta_{2\ell-1, 2n+1} \\ & + 4n \frac{(2\ell+1)}{4\ell+3} \delta_{2n-1, 2\ell+1} + 8 \frac{n\ell}{4\ell-1} \delta_{n,\ell}, \quad (27) \end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned} \Pi_{n,\ell} = & (-1)^{(\ell+n+1)} \frac{(2n)! (2\ell+1)! (2\ell+1)}{2^{(\ell+2n)} (2n-2\ell-1) (2\ell+2n+2) (\ell!)^2 (n!)^2} \\ & + (-1)^{(\ell+n)} \frac{(2\ell)(2n)! (2\ell-1)!}{2^{(2n+2\ell-2)} (2n-2\ell+1) (2\ell+2n) (\ell-1)! n!} \end{aligned} \quad (28)$$

com  $\delta_{n,\ell}$  denotando o operador delta-Kronecker.

O vetor bloco,  $|\underline{\alpha}_0, \underline{\alpha}_1, \dots, \underline{\alpha}_L|^T$ , é dado por

$$\underline{\alpha}_\ell = \begin{pmatrix} a_0^{(\ell)} \\ a^{(\ell)} \\ 1 \\ \vdots \\ a^{(\ell)} \\ N \end{pmatrix}, \quad \ell=0, 1, \dots, L \quad (29)$$

e o vetor bloco devido os termos de fonte e condições de contorno,  $|\underline{s}_0, \underline{s}_1, \dots, \underline{s}_L|^T$ , é dado por,

$$\underline{s}_\ell = \begin{pmatrix} s_0^{(\ell)} \\ s^{(\ell)} \\ \vdots \\ s^{(\ell)} \\ s_N \end{pmatrix}, \quad \ell=0, 1, \dots, L, \quad (30)$$

com

$$s_j^{(\ell)} = 2s_j \delta_{\ell,0} + s_{a,j,N} \delta_{\ell,2}^{(\ell)} + s_{\ell,0} \delta_{j,0} \delta_{\ell,1}^{(\ell)}, \quad (31)$$

onde:

$$s_j = \int_0^a S(x) \vartheta_j(x) dx, \quad (32)$$

ou, usando a função interpolação linear,

$$\begin{aligned} s_0 &= \left[ (S_{\text{ext}}^+)_0 + \left( \frac{v\sigma_f}{k} \right)_0^+ (a_0^{(0)} + a_1^{(0)}) \right] h_1, \\ s_j &= \left[ (S_{\text{ext}}^-)_j + \left( \frac{v\sigma_f}{k} \right)_j^- (a_{j-1}^{(0)} + a_j^{(0)}) \right] h_j \\ &\quad + \left[ (S_{\text{ext}}^+)_j + \left( \frac{v\sigma_f}{k} \right)_j^+ (a_j^{(0)} + a_{j+1}^{(0)}) \right] h_{j+1}, \quad j \neq 0 \text{ e } N, \\ s_N &= \left[ (S_{\text{ext}}^-)_N + \left( \frac{v\sigma_f}{k} \right)_N^- (a_{N-1}^{(0)} + a_N^{(0)}) \right] h_N. \end{aligned} \quad (33)$$

Os números  $\theta_1^{(\ell)}$  e  $\theta_2^{(\ell)}$  definidas como,

$$\theta_1^{(\ell)} = \int_0^1 \mu P_{2\ell}(\mu) f_1(\mu) d\mu, \quad (34)$$

e

$$\theta_2^{(\ell)} = \int_0^1 \mu P_{2\ell}(\mu) f_2(-\mu) d\mu, \quad (35)$$

podem facilmente ser calculados, dependendo das condições de contorno. Assim, para incidência isotrópica tem-se:

$$\theta_\alpha^{(\ell+1)} = \left( \frac{1 - 2\ell}{4 + 2\ell} \right) \theta_\alpha^{(\ell)}; \quad \alpha = 1, 2 \\ \ell = 0, 1, 2, \dots, (L-1), \quad (36)$$

com  $\theta_\alpha^{(0)} = 1/2$ . No caso de superfície livre, tem-se

$$\theta_\alpha^{(\ell)} = 0; \quad \alpha = 1, 2 \\ \ell = 0, 1, 2, \dots, L, \quad (37)$$

e no caso de incidência monodirecional, tem-se.

$$\theta_{\alpha}^{(\ell)} = P_{2\ell}(\mu_{\alpha}); \quad \alpha = 1, 2$$

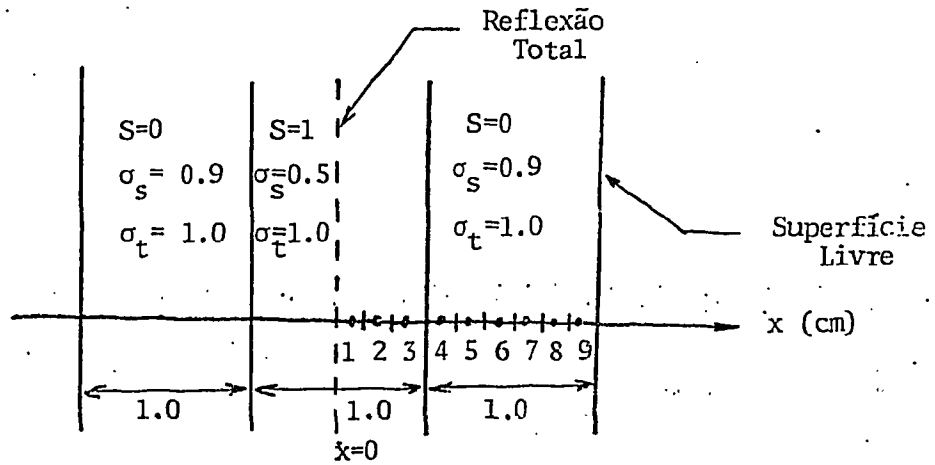
$$\ell = 0, 1, 2, \dots, L.$$

Desta forma todas as grandezas necessárias para solucionar o sistema de equações lineares, dado pela Eq. (15), podem ser calculadas e portanto invertendo-se a matriz pode-se obter os coeficientes  $a_i^{(\ell)}$ , e o fluxo de paridade par pode ser calculado através da Eq. (11). Além do mais, conforme discutido anteriormente, o conhecimento de  $a_i^{(0)}$  fornece de imediato o fluxo total. Finalmente, no caso de problemas que envolvem pesquisa de auto-valor pode-se utilizar técnicas iterativas convencionais para a solução do problema.

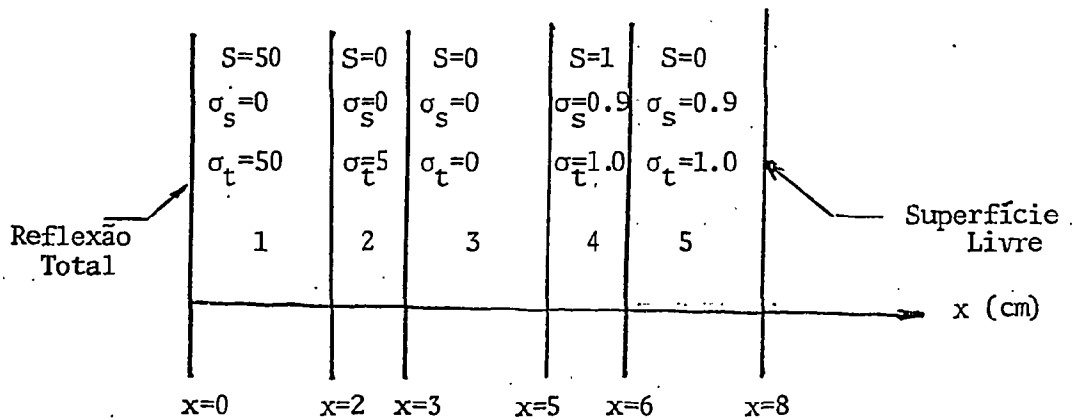
### 3. Resultados Numéricos

Com o intuito de testar a potencialidade do método, alguns problemas, cujos resultados numéricos encontravam-se disponíveis, foram solucionados e comparados com aqueles publicados. O primeiro problema considerado foi o de três regiões com uma fonte unitária na região central simetria em  $x=0$  e condição de contorno de superfície livre nas faces externas. Os resultados publicados para este problema foram obtidos usando-se os códigos ANISN e MPN-1 /14/. Na figura 2, ilustra-se a geometria do problema, bem como os pontos para os quais os fluxos totais foram calculados e os parâmetros que definem os meios. Na tabela 1 ilustra-se os resultados publicados junto com os calculados para diferentes números de elementos (E) e ordem da expansão angular (L).

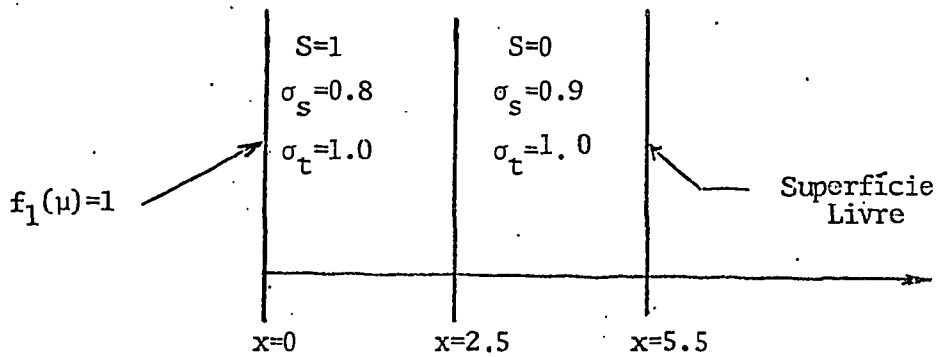
O segundo problema considerado é um clássico "problema mostra" solucionado por vários outros autores /9,13,15/, consistindo de multiregiões com severas heterogeneidades, descontinuidade de fontes e meios altamente absorvedores. A geometria e as propriedades materiais são mostradas na figura 2. Na tabela 2 ilustra-se os resultados obtidos e compara-se com os resultados "exatos" publicados por Garcia e Siewert /15/ que obtiveram a solução deste problema através do método  $F_N$ . Além disso, na figura 3 ilustra-se o comportamento das soluções obtidas.



a. Problema 1 : três regiões com simetria.



b. Problema 2 : fortes heterogeneidades.



c. Problema 3 : incidência isotrópica.

Figura 2 : Geometria e Parâmetros dos Problemas Amostras.

Tabela 1 : Resultados numéricos do fluxo total para o problema 1.

| Posição | L=1    |        | L=2    |        | L=3    |        | Publicados * |        |
|---------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|--------------|--------|
|         | E=11   | E=18   | E=11   | E=18   | E=11   | E=18   | MPN-1        | ANISN  |
| 1       | 1.208  | 1.206  | 1.223  | 1.221  | 1.225  | 1.223  | 1.221        | 1.219  |
| 2       | 1.160  | 1.158  | 1.174  | 1.172  | 1.178  | 1.176  | 1.178        | 1.178  |
| 3       | 1.058  | 1.057  | 1.066  | 1.064  | 1.069  | 1.067  | 1.074        | 1.062  |
| 4       | 0.9044 | 0.9036 | 0.8925 | 0.8918 | 0.8847 | 0.8842 | 0.8733       | 0.8829 |
| 5       | 0.7628 | 0.7623 | 0.7434 | 0.7431 | 0.7341 | 0.7341 | 0.7264       | 0.7267 |
| 6       | 0.6396 | 0.6392 | 0.6208 | 0.6207 | 0.6146 | 0.6146 | 0.6119       | 0.6132 |
| 7       | 0.5293 | 0.5290 | 0.5141 | 0.5139 | 0.5113 | 0.5111 | 0.5112       | 0.5124 |
| 8       | 0.4277 | 0.4275 | 0.4157 | 0.4155 | 0.4153 | 0.4149 | 0.4167       | 0.4180 |
| 9       | 0.3312 | 0.3310 | 0.3197 | 0.3194 | 0.3192 | 0.3188 | 0.3206       | 0.3181 |

\*Os Resultados publicados para o MPN-1 foram obtidos usando-se o P-15 e os Resultados do ANISN foram obtidos com 9 redes espaciais e  $S_8$ .

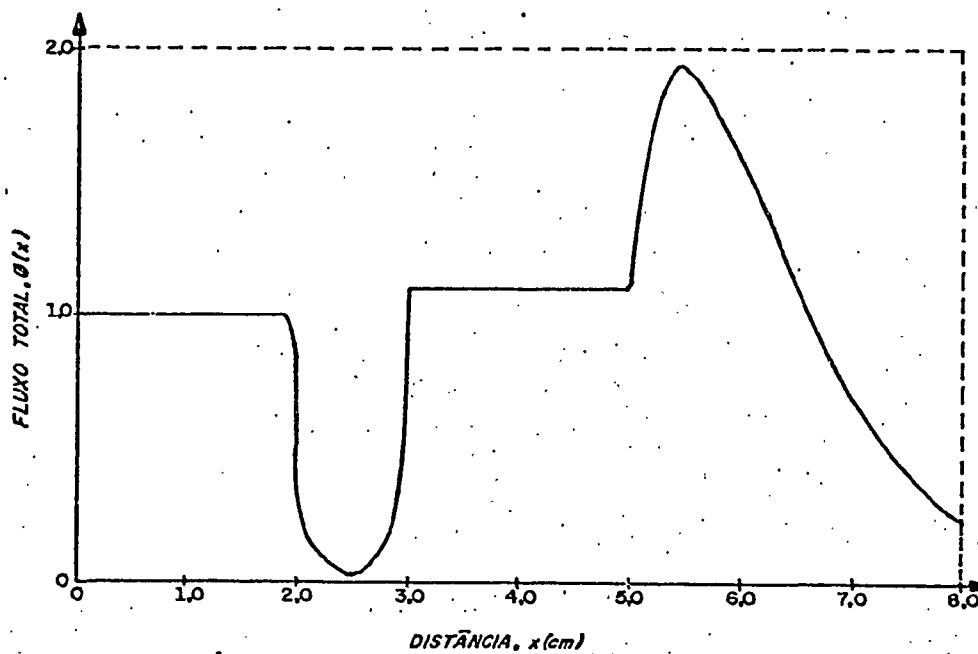


Figura 3. Distribuição de fluxo para o problema 2.



Tabela 2 : Resultados numéricos do fluxo total para o problema 2.

| x(cm) | L=1     |        | L=2     |        | L=3     |        | "EXATO" |
|-------|---------|--------|---------|--------|---------|--------|---------|
|       | E=18    | E=20   | E=18    | E=20   | E=18    | E=20   |         |
| 0.00  | 1.000   | 0.9999 | 1.000   | 0.9999 | 0.9999  | 0.9999 | 1.000   |
| 1.00  | 1.000   | 1.0001 | 1.000   | 1.000  | 1.0000  | 1.0000 | 1.000   |
| 1.90  | 0.9998  | 0.9998 | 0.9999  | 0.9999 | 0.9999  | 0.9999 | 0.9995  |
| 1.95  | 1.0060  | 1.0060 | 1.004   | 1.004  | 1.004   | 1.004  | 0.9902  |
| 1.99  | 0.8662  | 0.8687 | 0.8718  | 0.8745 | 0.8723  | 0.8750 | 0.8372  |
| 2.00  | 0.5104  | 0.5166 | 0.5144  | 0.5206 | 0.5184  | 0.5246 | 0.5010  |
| 2.05  | 0.2794  | 0.2893 | 0.2643  | 0.2738 | 0.2562  | 0.2656 | 0.2602  |
| 2.09  | 0.1704  | 0.1853 | 0.1619  | 0.1757 | 0.1604  | 0.1739 | 0.1798  |
| 2.10  | 0.1490  | 0.1656 | 0.1425  | 0.1580 | 0.1424  | 0.1574 | 0.1651  |
| 2.30  | -       | 0.0289 | -       | 0.0323 | -       | 0.0334 | -       |
| 2.50  | -0.0284 | 0.0243 | -0.0276 | 0.0249 | -0.0205 | 0.0237 | 0.03009 |
| 2.70  | -       | 0.0470 | -       | 0.0564 | -       | 0.0594 | -       |
| 2.90  | 0.2855  | 0.3301 | 0.2778  | 0.3159 | 0.2805  | 0.3168 | 0.3520  |
| 2.95  | 0.5658  | 0.5936 | 0.5393  | 0.5640 | 0.5236  | 0.5485 | 0.5650  |
| 2.99  | 0.9343  | 0.9565 | 0.9292  | 0.9504 | 0.9171  | 0.9391 | 0.9151  |
| 3.00  | 1.059   | 1.081  | 1.074   | 1.095  | 1.074   | 1.096  | 1.106   |
| 5.10  | 1.300   | 1.320  | 1.352   | 1.373  | 1.374   | 1.396  | 1.441   |
| 5.50  | 1.819   | 1.836  | 1.906   | 1.925  | 1.936   | 1.955  | 1.941   |
| 6.00  | 1.574   | 1.587  | 1.580   | 1.595  | 1.573   | 1.588  | 1.634   |
| 7.00  | 0.6725  | 0.6795 | 0.6566  | 0.6641 | 0.6563  | 0.6640 | 0.7085  |
| 8.00  | 0.2210  | 0.2234 | 0.2256  | 0.2281 | 0.2297  | 0.2323 | 0.2225  |

O terceiro problema, trata-se de duas regiões com uma fonte unitária na primeira região e com incidência isotrópica na face esquerda, como mostrado na figura 2. Na tabela 3 ilustra-se os resultados obtidos para o fluxo total e compara-se com os resultados publicados /16/, obtidos através do método  $F_N$ .

Tabela 3 : Resultados numéricos do fluxo total para o problema 3.

| x(cm) | L=1    |        | L=2    |        | L=3    |        | Publicados<br>F <sub>6</sub> |
|-------|--------|--------|--------|--------|--------|--------|------------------------------|
|       | E=10   | E=20   | E=10   | E=20   | E=10   | E=20   |                              |
| 0.0   | 2.7964 | 2.7880 | 2.7863 | 2.7738 | 2.7849 | 2.7687 | 2.7436                       |
| 0.5   | 3.3680 | 3.3555 | 3.3856 | 3.3692 | 3.3924 | 3.3732 | 3.3652                       |
| 1.0   | 3.5774 | 3.5659 | 3.5769 | 3.5664 | 3.5732 | 3.5641 | 3.5653                       |
| 1.5   | 3.5404 | 3.5290 | 3.5396 | 3.5291 | 3.5361 | 3.5267 | 3.5118                       |
| 2.0   | 3.2520 | 3.2403 | 3.2698 | 3.2544 | 3.2767 | 3.2580 | 3.2267                       |
| 2.5   | 2.5857 | 2.5815 | 2.5832 | 2.5797 | 2.5826 | 2.5796 | 2.5794                       |
| 3.1   | 1.7211 | 1.7252 | 1.6989 | 1.7076 | 1.6931 | 1.7049 | 1.7079                       |
| 3.7   | 1.1795 | 1.1821 | 1.1778 | 1.1797 | 1.1803 | 1.1809 | 1.1870                       |
| 4.3   | 0.7953 | 0.7963 | 0.7980 | 0.7985 | 0.7982 | 0.7989 | 0.7989                       |
| 4.9   | 0.4966 | 0.4965 | 0.5015 | 0.5004 | 0.5025 | 0.5010 | 0.5006                       |
| 5.5   | 0.2310 | 0.2306 | 0.2295 | 0.2283 | 0.2291 | 0.2272 | 0.2230                       |

#### 4. Conclusões

De acordo com os resultados numéricos apresentados anteriormente, demonstrou-se que mesmo usando funções interpolações lineares, que dificilmente representam o fluxo em sistemas com fortes heterogeneidades, e baixas ordens na expansão angular, o método em questão pode fornecer até dois algarismos significativos quando comparado com resultados considerados "exatos" (ex. método F<sub>N</sub>).

Os Resultados apresentados mostram que a convergência é aparentemente não assintótica, mas sim oscilante em torno da "solução exata", apesar de neste trabalho não ter sido feito um estudo rigoroso da convergência do método.

Relativamente a aspectos numéricos, não se procurou neste trabalho otimizar o programa de computação ou pesquisar técnicas de inversão eficientes, e desta forma não é possível estabelecer, no estágio atual, a eficiência numérica do método. Entretanto, o desacoplamento da componente angular da espacial, irá contribuir para diminuir o tempo computacional, na medida em que pode-se usar um número relativamente grande de elementos com uma ordem pequena na expansão angular, e ainda obter-se resultados relativamente confiáveis.

veis, como demonstrados nos resultados numéricos apresentados.

Finalmente, para estabelecer com mais rigor a potencialidade do método, é ainda necessário investigar vários outros aspectos, tais como: i) extensão para o modelo com espalhamento anisotrópico; ii) convergência do método; iii) geometrias bi e tri-dimensionais, e principalmente; iv) uso de função interpolantes de maior ordem.

### Referências

1. Zienkiewicz, O.C.; "The Finite Element Method in Engineering Science", Mc Graw-Hill, London, 1971.
2. Kang, C.M. & Hansen, M.F. "Finite Element Method for Reactor Analysis", Nucl. Sci. Engng, 31, 456-495, 1973.
3. Semenza, L.A.; E.E. Lewis; & E.C. Rossaw, "The Application of the Finite Element Method to the Multigroup Neutron Diffusion Equation", Nucl. Sci. Engng, 47, 302-310, 1972.
4. Proceedings of the International Topical Meeting on Advances in Mathematical Methods for the Solution of Nuclear Engineering Problems, München, April 27-29, 1981.
5. Case, K.M. & P.F. Zweifel, "Linear Transport Theory", Addison-Wesley Publishing Co., 1967.
6. Carlson, B.G. "Solution of Transport Equation by  $S_N$  approximations", LA-1599, Los Alamos Scientific Laboratory, Los Alamos, 1953.
7. Spanier, J. & E.M. Gelbard, "Monte Carlo Principles and Neutron Transport Problems". Addison-Wesley Publishing Co., 1969.
8. Kaper, H.G.; Leaf, G.K.; Lindeman, A.J. "Applications of Finite Element Method in Reactor Mathematics. Numerical solutions of the Neutron Transport Equations".

ANL-8126, Argonne National Lab., 1974..

9. Martin, W.R. & Duderstadt, J.J.; "Finite Element Solutions of the Neutron Transport Equation with applications to Strong Heterogeneities", Nucl. Sci. Engng. 62, 371-390, 1977.
10. Ackroyd, R.T. "A Finite Element Method for Neutron Transport-I. Some Theoretical Considerations", Ann. Nucl. Energy, 5, 75-94, 1978.
11. Ackroyd, R.T. "A Finite Element Method for Neutron Transport-III. Two-Dimensional One-Group Test Problems." , Ann. Nucl. Energy, 6, 563-577, 1979.
12. Ackroyd, R.T; A.K.Ziver; J.H.Goddard; "A Finite Element Method for Neutron Transport-Part IV: A Comparison of Some Finite Element Solutions of Two Group Benchmark Problems with Conventional Solutions", Ann. Nucl. Energy, 7, 335-349, 1980.
13. Galliara, J. & M.M.R. Willians; "A Finite Element Method for Neutron Transport-II. Some Practical Considerations", Ann. Nucl. Energy, 6, 205-223, 1979.
14. Yamaguchi, M. & Maiorino, J.R. "MPN-1: Um Módulo de Computação para a Solução da Equação de Transporte em Multi-regiões Através do Método  $P_N$ ". IPEN-Inf. 10, Novembro, 1981.
15. Garcia, R.D.M. & C.E. Siewert; "A Multiregion Calculation in the Theory of Neutron Diffusion", Nucl. Sci. Engng., 76, 53-77, 1980.
16. Pontedeiro, E.M.B.D. & J.R. Maiorino, "Solução da Equação de Transporte Linear, Monoenergética em Multiregiões com Espalhamento Anisotrópico Através do Método  $F_N$ ", 3º Encontro Nacional de Física de Reatores, 99-115, 1982.