

SOLUÇÃO DA EQUAÇÃO DE TRANSPORTE MONOENERGÉTICA EM GEOMETRIA TRIDIMENSIONAL PELO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS E PELA EXPANSÃO EM HARMÔNICOS ESFÉRICOS

Almir Fernandes  
José Rubens Maiorino \*

Coordenadoria para Projetos Especiais - COPESP  
Av. Professor Lineu Prestes, 2242  
CEP 05508-900, São Paulo, SP

\* Instituto de Pesquisas Energéticas e Nucleares (IPEN)

RESUMO

Este trabalho tem por objetivo apresentar o estudo de um método para solução da equação de transporte linear em 1 grupo de energia em meios materiais tridimensionais. A dependência angular será aproximada por uma expansão em harmônicos esféricos (até terceira ordem) enquanto que a dependência espacial será tratada pelo método de elementos finitos. São apresentados resultados comparativos com problemas com solução analítica (primeira ordem na expansão do fluxo) e também com o código DOT (terceira ordem na expansão do fluxo).

INTRODUÇÃO

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 de nêutrons.

Este trabalho tem por objetivo apresentar o estudo de um método para solução da equação de transporte linear em 1 grupo de energia em meios materiais tridimensionais. A dependência angular será aproximada por uma expansão em harmônicos esféricos (até terceira ordem) enquanto que a dependência espacial será tratada pelo método de elementos finitos. Este trabalho representa um passo inicial na busca de um programa para solução da equação de transporte dependente da energia em geometria tridimensional.

DESENVOLVIMENTO ANALÍTICO

A técnica de solução da equação de transporte através da expansão do componente angular em harmônicos esféricos para a derivação de um conjunto acoplado de equações diferenciais de primeira ordem é bastante antiga [1]. Mais recentemente, Fletcher [2, 3, 4] propôs 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 apresenta equações 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.

Para este desenvolvimento, considere a equação de transporte de nêutrons em geometria tridimensional independente da energia:

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

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

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

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

$$\sigma_s(\underline{r}, \Omega \cdot \Omega') = \frac{1}{4\pi} \sum_{l=0}^L (2l+1) \cdot \sigma^l(\underline{r}) \cdot \left[ P_l(\mu) \cdot P_l(\mu') + 2 \sum_{m=1}^l \frac{(l-m)!}{(l+m)!} P_l^m(\mu) \cdot P_l^m(\mu') \cdot \cos m(\varphi - \varphi') \right] \quad (4)$$

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

$$A_{lm} \cos m\varphi + B_{lm} \sin m\varphi = 0 \quad (5)$$

onde

$$\begin{aligned} A_{lm} = & \left\{ 2(l-m) \cdot H(l-1) \cdot \frac{\partial}{\partial z} \psi_{l-1,m} + 2 \cdot (l+m+1) \cdot \frac{\partial}{\partial z} \psi_{l+1,m} + \right. \\ & H(l-1) \cdot \delta_{m,1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{l-1,0} + H(l-1) \cdot H(m-1) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{l-1,m-1} - \\ & H(l-2) \cdot H(m-2) \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{l-1,m-1} - [1-H(l-N)] \cdot \delta_{m,1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{l+1,0} \\ & - [H(l-1)-H(l-N)] \cdot H(m-1) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{l+1,m-1} + \\ & [H(l-1)-H(l-N)] \cdot H(m-2) \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{l+1,m-1} + \\ & (l+m+1)(l+m+2)[1-H(l-N)] \cdot [1-H(m-N)] \cdot \\ & \left. \left[ \frac{\partial}{\partial x} \psi_{l+1,m+1} + \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{l+1,m+1} \right] - \right. \\ & (l-m)(l-m-1) \cdot H(l-1) \cdot [1-H(m-N)] \left[ \frac{\partial}{\partial x} \psi_{l-1,m+1} + \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{l-1,m+1} \right] \\ & \left. + 2(2l+1) \cdot \sigma^l \cdot \psi_{lm} - 2(2l+1) S_{lm} \right\} \quad (6) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
B_{lm} = & \left\{ 2(l-m) \cdot H(l-1) \cdot \frac{\partial}{\partial z} \Gamma_{l-1,m} + 2(l+m+1) \cdot \frac{\partial}{\partial z} \Gamma_{l+1,m} + \right. \\
& H(l-1) \cdot \delta_{m,1} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{l-1,0} + H(l-2) \cdot H(m-2) \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l-1,m-1} + \\
& H(l-1) \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{l-1,m-1} - [1-H(l-N)] \cdot \delta_{m,1} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{l+1,0} \\
& - H(m-2) \cdot [H(l-2)-H(l-N)] \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l+1,m-1} - \\
& H(m-1) \cdot [H(l-1)-H(l-N)] \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{l+1,m-1} \\
& \left. + (l+m+1)(l+m+2) \cdot [1-H(l-N)] \cdot [1-H(m-N)] \right. \\
& \left. \left[ \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l+1,m+1} - \frac{\partial}{\partial y} \psi_{l+1,m+1} \right] - \right. \\
& \left. (l-m)(l-m-1) \cdot H(l-1) [1-H(m-N)] \left[ \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{l-1,m+1} - \frac{\partial}{\partial y} \psi_{l-1,m+1} \right] + \right. \\
& \left. 2(2l+1) \cdot \sigma^l \cdot \Gamma_{lm} - 2(2l+1) Q_{lm} \right\}, \quad (7)
\end{aligned}$$

com  $\Psi_{lm}$  e  $\Gamma_{lm}$  os momentos da expansão do fluxo;

$S_{lm}$  e  $S_{lm}^*$  os momentos da fonte externa;

$L$  a ordem da expansão da seção de choque;

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

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

A equação acima é válida para  
 $l=0,1,2,\dots,N$   
 $m=0,1,\dots,l$ .

Desde que  $\cos m\varphi$  e  $\sin m\varphi$  são linearmente independentes, tem-se necessariamente que  $A_{lm} = 0$  e, exceto para o caso  $m=0$ ,  $B_{lm} = 0$  (pois neste último caso tem-se  $\sin m\varphi=0$ ). Como as equações (6) e (7) 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.

## EQUAÇÃO TIPO DIFUSÃO

Considerando as equações (6) e (7) obtidas anteriormente para os diversos valores possíveis de  $l$  e  $m$ , tem-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 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:

$l=0, m=0$ :

$$\frac{\partial}{\partial z} \psi_{10} + \frac{\partial}{\partial x} \psi_{11} + \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{11} + \sigma_0 \cdot \psi_{00} = S_{00}, \quad (8.a)$$

$l=1, m=0$ :

$$\frac{\partial}{\partial z} \psi_{00} + 2 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \psi_{20} + 3 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} + 3 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} + 3 \cdot \sigma_1 \cdot \psi_{10} = 3 \cdot S_{10}, \quad (8.b)$$

$l=1, m=1$ :

$$\begin{aligned}
3 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \psi_{21} + \frac{\partial}{\partial x} \psi_{00} - \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} + 6 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} + 6 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} + 3 \cdot \sigma_1 \cdot \psi_{11} = \\
= 3 \cdot S_{11}, \quad (8.c)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
3 \cdot \frac{\partial}{\partial z} \Gamma_{21} + \frac{\partial}{\partial y} \psi_{00} - \frac{\partial}{\partial y} \psi_{20} + 6 \cdot \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} - 6 \cdot \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22} + 3 \cdot \sigma_1 \cdot \Gamma_{11} = \\
= 3 \cdot Q_{11}, \quad (8.d)
\end{aligned}$$

e assim sucessivamente para os demais 12 momentos da expansão [5, 6].

Isolando-se  $\psi_{10}$  na equação (8.b),  $\psi_{11}$  em (8.c),  $\Gamma_{11}$  em (8.d) e substituindo em (8.a), obtém-se:

$$-\frac{1}{3} \cdot \nabla \cdot \left[ \left[ \frac{1}{\sigma_1} \right] \cdot \nabla \psi_{00} \right] + \sigma_0 \cdot \psi_{00} = S_{00}^*. \quad (9)$$

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

$$\begin{aligned}
-\frac{4}{3} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial z} \psi_{20} \right] - \frac{9}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial z} \psi_{20} \right] - \frac{6}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} \right] \\
-\frac{1}{3} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} \right] - \frac{6}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{20} \right] - \frac{1}{3} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{20} \right] \\
+ 5 \cdot \sigma_2 \cdot \psi_{20} = S_{20}^*, \quad (10)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-\frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial z} \psi_{21} \right] - \frac{8}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial z} \psi_{21} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] - \\
-\frac{8}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] - \frac{5}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{21} \right] + \\
5 \cdot \sigma_2 \cdot \psi_{21} = S_{21}^*, \quad (11)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-\frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial z} \Gamma_{21} \right] - \frac{8}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial z} \Gamma_{21} \right] - \frac{5}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{21} \right] \\
-\frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} \right] - \frac{8}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} \right] + \\
5 \cdot \sigma_2 \cdot \Gamma_{21} = Q_{21}^*, \quad (12)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-\frac{10}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial z} \psi_{22} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{2}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} \right] - \frac{16}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} \right] \\
-\frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{2}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22} \right] - \frac{16}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22} \right] + \\
10 \cdot \sigma_2 \cdot \psi_{22} = S_{22}^*, \quad (13)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
-\frac{10}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial z} \Gamma_{22} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{2}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} \right] - \frac{16}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} \right] \\
-\frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{2}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} \right] - \frac{16}{7} \cdot \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_3} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} \right] + \\
10 \cdot \sigma_2 \cdot \Gamma_{22} = Q_{22}^*. \quad (14)
\end{aligned}$$

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

$$\begin{aligned}
S_{00}^* &= S_{00} - \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{S_{10}}{\sigma_1} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{Q_{11}}{\sigma_1} \right] - \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{S_{11}}{\sigma_1} \right] - \\
&\frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{20} \right] - \frac{1}{3} \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{20} \right] + \frac{2}{3} \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial z} \psi_{20} \right] \\
&+ \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{21} \right] + \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial z} \psi_{21} \right] + \frac{\partial}{\partial z} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{21} \right] \\
&+ \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial z} \Gamma_{21} \right] - 2 \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \psi_{22} \right] + 2 \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \psi_{22} \right] \\
&+ 2 \frac{\partial}{\partial y} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial x} \Gamma_{22} \right] + 2 \frac{\partial}{\partial x} \left[ \frac{1}{\sigma_1} \frac{\partial}{\partial y} \Gamma_{22} \right], \quad (15)
\end{aligned}$$

e assim sucessivamente para os demais termos fonte.

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, a que leva a uma nova estimativa para os momentos. O processo prossegue até que ocorra a convergência de todos os momentos.

Genericamente, as equações dos momentos podem ser tratadas por:

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[ \alpha_1 \frac{\partial}{\partial x} \phi \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \alpha_2 \frac{\partial}{\partial y} \phi \right] - \frac{\partial}{\partial z} \left[ \alpha_3 \frac{\partial}{\partial z} \phi \right] + \sigma \cdot \phi = S \quad (16)$$

## APLICAÇÃO DO MÉTODO DOS ELEMENTOS FINITOS AS EQUAÇÕES TIPO DIFUSÃO

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:

$$\phi(x,y,z) \cong \bar{\phi}(x,y,z) = \sum_{i=1}^M a_i \cdot N_i(x,y,z) \quad (17)$$

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  $\phi$ . Este trabalho considera que os parâmetros físicos permanecem constantes em cada elemento. Substituindo a aproximação (17) na equação (16), surge um resíduo decorrente da aproximação do momento, ou seja,

$$-\frac{\partial}{\partial x} \left[ \alpha_1 \frac{\partial}{\partial x} \bar{\phi} \right] - \frac{\partial}{\partial y} \left[ \alpha_2 \frac{\partial}{\partial y} \bar{\phi} \right] - \frac{\partial}{\partial z} \left[ \alpha_3 \frac{\partial}{\partial z} \bar{\phi} \right] + \sigma \bar{\phi} - S = R \quad (18)$$

Quanto melhor for a aproximação (17), tanto menor deverá ser o resíduo  $R$  dado pela equação acima. A técnica de Resíduos Ponderados propõe multiplicar a equação (18) por uma função ponderação e integrar no domínio do problema, fazendo com que o resultado obtido seja igual a zero. Logo, multiplicando a equação (18) por uma função ponderação  $W_j$  e integrando no domínio, obtém-se:

$$-\sum_{i=1}^M a_i \int_V \nabla \left[ \alpha_1 \frac{\partial}{\partial x} N_i, \alpha_2 \frac{\partial}{\partial y} N_i, \alpha_3 \frac{\partial}{\partial z} N_i \right] W_j d\Omega + \sum_{i=1}^M a_i \int_V \sigma \cdot N_i \cdot W_j d\Omega = \int_V S W_j d\Omega \quad (19)$$

Admitindo a forma tetraédrica para os elementos, tem-se para cada nó:

$$N_i = (\epsilon_i^x + \beta_i^x x + \gamma_i^x y + \delta_i^x z) \quad (20)$$

Considerando as condições de contorno do problema dadas por [2,3,4,5]:

i) fluxo contínuo nas interfaces (garantido pela escolha das funções base locais);

ii) vácuo ou superfície livre:

$$\mathbf{n} \cdot \nabla \Psi_{00} = -3 \cdot \lambda \cdot \sigma_0 \cdot \Psi_{00}, \quad \lambda \text{ arbitrário e}$$

$$\Psi_{1m} = 0, \quad l \neq 0 \text{ ou } m \neq 0,$$

iii) reflexão;

o sistema matricial resultante será então:

$$\mathbf{K} \cdot \Phi = \mathbf{S} \quad (21)$$

e, para um elemento isolado:

$$\begin{aligned}
a_i \left\{ \frac{(\alpha_1 \beta_i \beta_j + \alpha_2 \gamma_i \gamma_j + \alpha_3 \delta_i \delta_j) \Delta}{6} + \right. \\
\left. \frac{(1 + \delta_{ij}) \sigma_1 \Delta}{120} + \lambda \left[ \frac{\sigma_0}{\sigma_1} \right] \frac{(1 + \delta_{ij}) \otimes}{24} \right\} = \\
= \frac{[2(2l+1)/(1 + \delta_{m,0})] S_{1m} \Delta}{24} - \\
\frac{f_{tw}^{qs} \Delta S_{tw} \beta_{ej} - a_{tw} d_{tw}^{qs} \Delta \beta_{ej} \beta_{ci} +}{6} + \\
\frac{f_{tw}^{qs} n_e \otimes S_{tw}(\Gamma) + \Lambda_{tw}^{qs} d_{tw}^{qs} n_e \otimes}{6} \quad (22)
\end{aligned}$$

com:

$\Delta$  = duas vezes o volume do elemento tetraédrico,

$\otimes$  = duas vezes a área do elemento que pertence ao contorno que está sendo considerado;

$\zeta_r = 1$  para os elementos cuja condição de contorno seja do tipo reflexão e a ordem

do momento seja par;

= 0 nos demais casos;

$\zeta_v = 1$  para os elementos cuja condição de contorno seja do tipo reflexão e o

momento seja (0,0);

= 0 nos demais casos.

## PROGRAMA ETEFEH

Para solução destas equações, foi desenvolvido o programa ETEFEH (Equação de Transporte, Elementos Finitos, Esféricos Harmônicos) em linguagem FORTRAN. Para simplificar a entrada de dados, um pré-processador (PREPROC) [5, 6] foi elaborado em linguagem PASCAL e é disponível para micro-computador compatível com IBM-PC.

## PROBLEMA NÚMERO UM

Solução da equação de difusão para um reator composto de duas regiões, simulando situação unidimensional para efeito de comparação de resultados com solução analítica. Este problema pode ser representado em uma dimensão pela figura 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.

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

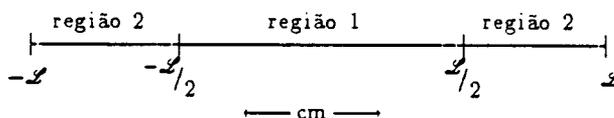


FIGURA 1 - DOMÍNIO DO PROBLEMA 1

Condições de contorno:  $\phi(L) = \phi(-L) = 0$ .  
A solução analítica é dada por:

$$\phi(x) = \begin{cases} \frac{S_1}{\Sigma_a} \left[ 1 - \alpha \cdot \cosh \left[ x \cdot \sqrt{\frac{\Sigma_a}{D}} \right] \right], & 0 \leq x \leq \frac{\mathcal{L}}{2} \\ \frac{S_1}{\Sigma_a} \cdot \beta \cdot \sinh \left[ (3-x) \cdot \sqrt{\frac{\Sigma_a}{D}} \right], & \frac{\mathcal{L}}{2} \leq x \leq \mathcal{L} \end{cases}$$

onde:

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

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

OBS:

1. Por questões de simetria, a solução apresentada representa apenas o domínio  $[0 \leq x \leq 3]$ , com a condição de contorno  $\left. \frac{d\phi}{dx} \right|_{x=0} = 0$  incorporada, ou seja,  $\phi(-x) = \phi(x)$ ;

2. Este problema foi solucionada 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 1 - RESULTADOS PARA O PROBLEMA 1

Posição	Solução Analítica	CITATION	ETEFEH
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  $13 \times 13 \times 13$  "mesh points", enquanto que com o programa ETEFEH foram utilizados  $6 \times 6 \times 12$  elementos hexaédricos (total de 2592 elementos tetraédricos).

A tabela 1 anterior apresenta uma comparação entre os resultados obtidos pelo programa ETEFEH e pelo código CITATION com a solução analítica. Como pode ser verificado, há uma boa concordância entre estes resultados, com os desvios do programa ETEFEH da mesma ordem que os desvios do programa CITATION. A figura 2 abaixo apresenta uma comparação dos resultados analíticos e os obtidos com o programa ETEFEH, sendo os que os mesmos podem ser considerados muito bons.

— Solução Analítica  
\* ETEFEH

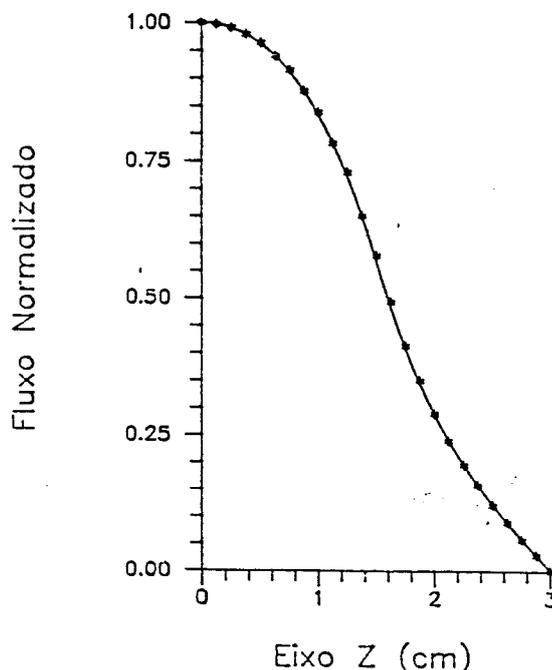


FIGURA 2 - FLUXO PARA O PROBLEMA NÚMERO 1.

#### PROBLEMA DOIS

Solução da equação de transporte para reator cilíndrico em duas regiões. 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 nêutron/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 3 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.

As figuras 4 e 5 representam o fluxo neutrônico total por meio de cortes no domínio do reator, sendo que no primeiro caso é apresentado um corte em  $z=3$  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  $z=2,75$  cm, sem referência a ângulo (vale ressaltar que o código DOT soluciona a equação de transporte bidimensional, sendo neste exemplo utilizada opção de geometria  $r-z$ ). No segundo caso, o corte adotado para o programa ETEFEH passa por  $x=y=0$  cm e para o código DOT é utilizado Raio=0,25 cm.

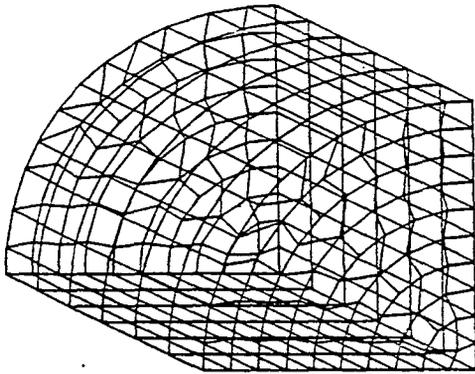


FIGURA 3 - DOMÍNIO DO PROBLEMA DOIS

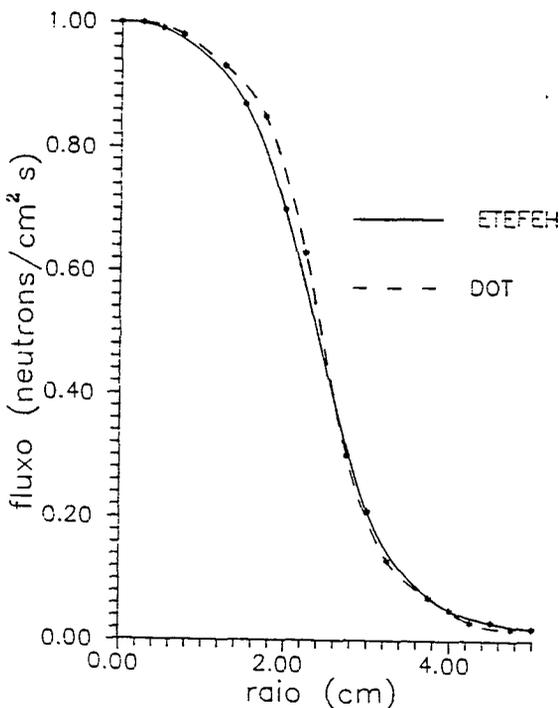


FIGURA 4 - FLUXO PARA O PROBLEMA DOIS

Os resultados obtidos neste exemplo para o fluxo total podem ser considerados aceitáveis. Uma nova modelagem com o programa ETEFEH para este problema, com um maior número de elementos, teria possibilitado a análise de sensibilidade do resultado.

## 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. Verificou-se a viabilidade do método proposto por J.K.Fletcher, sendo que a chave do mesmo está na viabilização de um algoritmo rápido para solução das equações tipo difusão.

O método dos elementos finitos, por sua versatilidade na modelagem de domínios complexos, mostrou-se adequado ao tratamento de problemas de transporte de nêutrons. Por outro lado, outros tipos de elementos deverão ser introduzidos para o tratamento dos volumes de controle, possibilitando o estudo de outras funções interpolantes e aumentando a versatilidade do programa computacional.

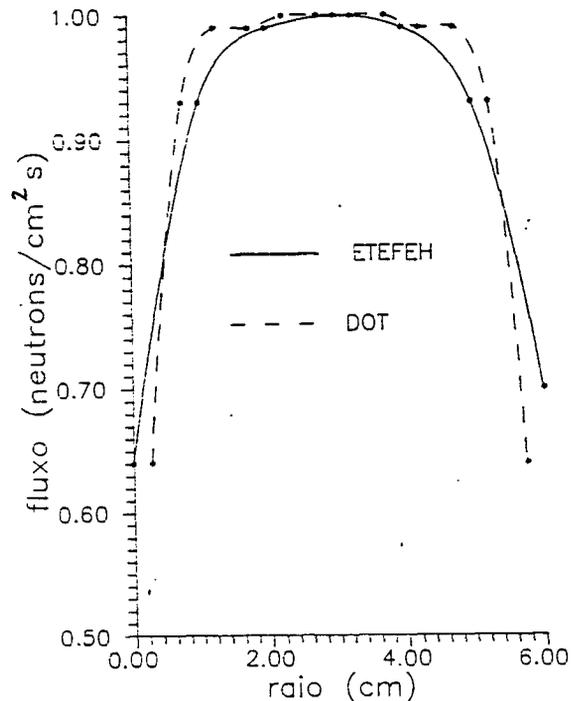


FIGURA 5 - FLUXO PARA O PROBLEMA DOIS

As condições de contorno aplicadas ao programa ETEFEH foram as mesmas propostas por Fletcher, sendo que é de interesse que se realize um estudo mais aprofundado das mesmas. Outros desenvolvimentos que podem ser sugeridos são:

- desenvolvimento e implantação de algoritmo para solução da equação de transporte multigrupo;
- utilização de propriedades (constantes físicas) variáveis no interior do elemento;
- desenvolvimento de um pós-processador para análise dos resultados do programa ETEFEH de modo simples na tela do microcomputador, por exemplo.

## Agradecimentos

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

## REFERÊNCIAS

- [1] DAVIES, C.N. Neutron transport theory. London, Oxford Univ. Press, 1957.
- [2] FLETCHER, J.K., The solution of the multigroup neutron transport equation using spherical harmonics. TRG Report, 2547, 1973.
- [3] FLETCHER, J.K., The solution of the multigroup neutron transport equation using spherical harmonics. Nuclear Science and Engineering, 84:33-46, 1983.
- [4] FLETCHER, J.K., A solution of the neutron transport equation using spherical harmonics. Journal of Physics, 16(12):2827-2835, 1983.
- [5] FERNANDES, A., Estudo de um método para solução da equação de transporte monoenergética e em geometria tridimensional pelo método dos elementos finitos e pela expansão em harmônicos esféricos. Dissertação de mestrado, IPEN/USP, 1991.
- [6] FERNANDES, A., Solução da equação de transporte em geometria tridimensional (X-Y-Z) pelo método dos elementos finitos e da expansão em harmônicos esféricos. In: Anais do VII Encontro Nacional de Física de Reatores e Termohidráulica. (Recife, PE, Brasil, 26 a 28 de Abril, 1989). Universidade Federal de Pernambuco, 1989.

## ABSTRACT

This work presents a method to solve the neutron transport equation in three space dimensions and one group. The angular flux is approximated by spherical harmonics (up to the third order) and the finite element method is applied to the space component. There are results to an analytical problem (first order) and a comparison with the DOT code (third order).