

MINISTÉRIO DA DEFESA
EXÉRCITO BRASILEIRO
DEPARTAMENTO DE CIÊNCIA E TECNOLOGIA
INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA
CURSO DE MESTRADO EM ENGENHARIA NUCLEAR

JADNA MARA SANTOS MENDES

APLICAÇÃO DO MÉTODO DE EXPANSÃO POLINOMIAL NODAL
PARA SOLUÇÃO ESTACIONÁRIA DA EQUAÇÃO TRIDIMENSIONAL
DE DIFUSÃO DE NÊUTRONS A DOIS GRUPOS

Rio de Janeiro

2017

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA

JADNA MARA SANTOS MENDES

**APLICAÇÃO DO MÉTODO DE EXPANSÃO POLINOMIAL
NODAL PARA SOLUÇÃO ESTACIONÁRIA DA EQUAÇÃO
TRIDIMENSIONAL DE DIFUSÃO DE NÊUTRONS A DOIS
GRUPOS**

Dissertação de Mestrado apresentada ao Curso de Mestrado em Engenharia Nuclear do Instituto Militar de Engenharia, como requisito parcial para obtenção do título de Mestre em Ciências em Engenharia Nuclear.

Orientadores:

Sergio de Oliveira Vellozo - D.Sc.

Sérgio Barros Paixão - M.Sc.

Rio de Janeiro

2017

c2017

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA

Praça General Tibúrcio, 80 - Praia Vermelha

Rio de Janeiro - RJ CEP: 22290-270

Este exemplar é de propriedade do Instituto Militar de Engenharia, que poderá incluí-lo em base de dados, armazenar em computador, microfilmear ou adotar qualquer forma de arquivamento.

É permitida a menção, reprodução parcial ou integral e a transmissão entre bibliotecas deste trabalho, sem modificação de seu texto, em qualquer meio que esteja ou venha a ser fixado, para pesquisa acadêmica, comentários e citações, desde que sem finalidade comercial e que seja feita a referência bibliográfica completa.

Os conceitos expressos neste trabalho são de responsabilidade do(s) autor(es) e do(s) orientador(es).

621.48	Mendes, Jadna Mara Santos
M538a	Aplicação do método de expansão polinomial nodal para solução estacionária da equação tridimensional de difusão de nêutrons a dois grupos / Jadna Mara Santos Mendes; orientada por Sergio de Oliveira Vellozo; Sérgio Barros Paixão - Rio de Janeiro: Instituto Militar de Engenharia, 2017. 63p.: il. Dissertação (Mestrado) - Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro, 2017. 1. Curso de Engenharia Nuclear - teses e dissertações. 2. Método nodal. I. Vellozo, Sergio de Oliveira. II. Paixão, Sérgio Barros. III. Título. IV. Instituto Militar de Engenharia.

INSTITUTO MILITAR DE ENGENHARIA

JADNA MARA SANTOS MENDES

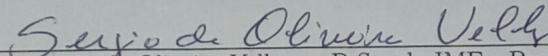
APLICAÇÃO DO MÉTODO DE EXPANSÃO POLINOMIAL
NODAL PARA SOLUÇÃO ESTACIONÁRIA DA EQUAÇÃO
TRIDIMENSIONAL DE DIFUSÃO DE NÊUTRONS A DOIS
GRUPOS

Dissertação de Mestrado apresentada ao Curso de Mestrado em Engenharia Nuclear do Instituto Militar de Engenharia, como requisito parcial para a obtenção do título de Mestre em Ciências em Engenharia Nuclear.

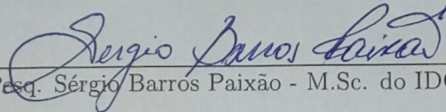
Orientadores: Prof. Sergio de Oliveira Vellozo - D.Sc.

Pesq. Sérgio Barros Paixão - M.Sc.

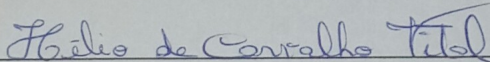
Aprovada em 08 de fevereiro de 2017 pela seguinte Banca Examinadora:



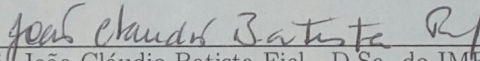
Prof. Sergio de Oliveira Vellozo - D.Sc. do IME - Presidente



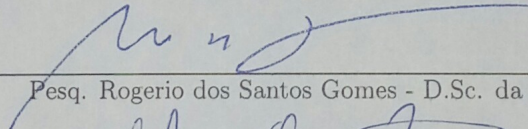
Pesq. Sérgio Barros Paixão - M.Sc. do IDQBRN/CTEx



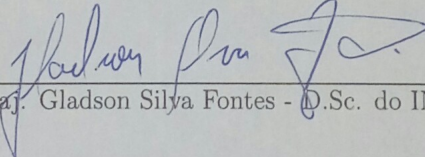
Pesq. Helio de Carvalho Vital - Ph.D. do IDQBRN/CTEx



Maj. João Cláudio Batista Fiel - D.Sc. do IME



Pesq. Rogerio dos Santos Gomes - D.Sc. da CNEN



Maj. Gladson Silva Fontes - D.Sc. do IME

Rio de Janeiro

2017

AGRADECIMENTOS

É com grande satisfação que deixo aqui meus sinceros agradecimentos a todos que de alguma forma contribuíram com realização deste trabalho.

Em primeiro lugar a Deus por motivos infinitos.

Aqui meus humildes agradecimentos a esses dois que praticamente me “adotaram” no meu pouco conhecimento, Prof. Sergio Vellozo e Prof. Sérgio Paixão, aos quais eu não tenho palavras para expressar o quão maravilhoso foi poder trabalhar com Eles.

Ao Instituto Militar de Engenharia e a Coordenação de Aperfeiçoamento de Pessoal de Nível Superior por fornecer subsídios, os quais me permitiram realizar esse trabalho.

Com muito carinho, agradeço à minha família de sangue (Mãe e Irmãos), Eles são minha base! Aos demais familiares e amigos de longas datas pelas palavras de apoio e confiança.

Agradeço ao pessoal da UNIFESSPA, aos Professores que me deram assistência no começo dessa jornada, Fernanda, Edney e Fábio. E aos colegas, em especial, Mário, Solange e Janaina.

Agradeço aos amigos que me acolheram, Família Santos, Família Petine, Família Magalhães. Aos colegas de turma, em especial, Camila, Gabriela e Mayara, onde encontrei companheirismo. Aos professores do IME pelas oportunidades. A todos da Seção de Engenharia Nuclear, servidores, alunos das outras turmas, pelo apoio e bate-papos extra-classe.

Aos membros da banca de defesa desta dissertação por terem aceitado convite e por suas colaborações com o trabalho.

E por fim, ao Rio, que eu amo de paixão, por ter me recebido de braços abertos. Acreditar Sempre!

SUMÁRIO

LISTA DE ILUSTRAÇÕES.	07
LISTA DE TABELAS	08
LISTA DE SÍMBOLOS	09
LISTA DE SIGLAS.	11
1 INTRODUÇÃO	14
1.1 Objetivo	15
2 FUNDAMENTOS TEÓRICOS.	16
2.1 Nêutrons e suas interações com a matéria	16
2.2 Seções de choque	17
2.3 Equação de transporte de nêutrons	17
2.4 A aproximação da difusão.	18
2.5 A equação da difusão.	18
3 MÉTODOS COMPUTACIONAIS.	20
3.1 Introdução.	20
3.2 Caracterização dos métodos	21
3.2.1 Método de Diferenças Finitas de Baixas Ordens.	21
3.2.2 Método de Diferenças Finitas de Altas Ordens.	21
3.2.3 Métodos dos Elementos Finitos.	22
3.2.4 Métodos Nodais.	22
3.2.5 Métodos de Matriz Resposta	22
3.2.6 Combinação de Métodos.	23
3.2.6.1 Método de Probabilidade de Colisão Nodal.	23
3.2.6.2 Método de Expansão Nodal.	23
3.2.6.3 Método de Expansão de Fluxo	24
3.3 Métodos usados em diferentes reatores	24
3.3.1 Métodos para reatores moderados por água leve (LWR).	24
3.3.2 Métodos para reatores de altas temperaturas (HTR).	25
3.3.3 Métodos para reatores regeneradores rápidos (FBR)	26
3.4 Sumário das vantagens e desvantagens associadas.	26
4 O MÉTODO DA EXPANSÃO POLINOMIAL NODAL	28
4.1 Expansão de segunda ordem - o NEM básico	32
4.2 Expansões de ordens superiores	34
5 BENCHMARK IAEA-3D	38
6 SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS	40

6.1	NEM3D-1A	40
6.2	Processo iterativo	40
6.2.1	Fluxograma	42
6.2.2	Critérios de convergência	43
6.3	Resultados e comparações	43
6.3.1	BENCHMARK IAEA-3D	44
6.3.2	Resultados NEM3D-1A	44
7	COMPARAÇÕES COM OUTROS PROGRAMAS	49
7.1	Programas computacionais	49
7.2	Resultados comparativos	50
7.3	O autovalor (k_{eff})	50
7.4	Desvios máximos e mínimos de distribuição de potência	51
8	CONCLUSÕES E SUGESTÕES	52
8.1	Conclusões	52
8.2	Sugestões	52
9	REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS	54
10	APÊNDICES	56
10.1	Apêndice 1: Método dos Resíduos Ponderados	57
10.1.1	Método de Galerkin	59
10.1.2	Método dos Momentos	59
10.2	Apêndice 2: Funções de base e suas relações	60

LISTA DE ILUSTRAÇÕES

FIG.2.1	Representação esquemática da interação nêutron-núcleo (DUDERSTADT e HAMILTON, 1942)	16
FIG.4.1	Representação esquemática de um nodo e suas faces	29
FIG.4.2	Representação esquemática das correntes parciais no nodo m	32
FIG.5.1	Seção transversal, $z = 190\text{cm}$ (ANL-7416, 1977)	38
FIG.5.2	Seção longitudinal, $y = 0$ (ANL-7416, 1977).	39
FIG.6.1	Distribuição radial média de potência, integrada axialmente, de referência	44
FIG.6.2	Distribuição de desvios de resultados NEM3D-1A - 10cm x 10cm x 10cm	45
FIG.6.3	Distribuição de desvios de resultados NEM3D-1A - 10cm x 10cm x 20cm	46
FIG.6.4	Distribuição de desvios de resultados NEM3D-1A - 20cm x 20cm x 2,5cm	46
FIG.6.5	Distribuição de desvios de resultados NEM3D-1A - 20cm x 20cm x 5cm	47
FIG.6.6	Distribuição de desvios de resultados NEM3D-1A - 20cm x 20cm x 10cm	47
FIG.6.7	Distribuição de desvios de resultados NEM3D-1A - 20cm x 20cm x 20cm	48
FIG.10.1	Polinômios - Função de forma.	60
FIG.10.2	Polinômios básicos - Função de forma	61
FIG.10.3	Polinômios de ordens superiores - Função de forma.	61
FIG.10.4	Ortogonalidade entre polinômios.	62
FIG.10.5	Ortogonalidade entre polinômios e segundas derivadas.	62

LISTA DE TABELAS

TAB.5.1 Dados Nucleares (ANL-7416, 1977).	39
TAB.7.1 Comparações de resultados de k_{eff}	51
TAB.7.2 Desvios máximos e mínimos para a distribuição de potência radial.	51

LISTA DE SÍMBOLOS

Σ	- Seção de choque macroscópica
σ_t	- Seção de choque microscópica total
σ_s	- Seção de choque microscópica de espalhamento
σ_a	- Seção de choque microscópica de absorção
σ_e	- Seção de choque microscópica de espalhamento elástico
σ_{in}	- Seção de choque microscópica de espalhamento inelástico
σ_f	- Seção de choque microscópica de fissão
σ_γ	- Seção de choque microscópica de captura radiativa
Σ_t	- Seção de choque macroscópica total
Σ_s	- Seção de choque macroscópica de espalhamento
Σ_a	- Seção de choque macroscópica de absorção
ν	- número médio de nêutrons produzidos por fissão
$\hat{\Omega}$	- Vetor unitário de direção
ϕ	- Fluxo de nêutrons
E	- Energia da partícula
\vec{r}	- Vetor posição no espaço
t	- Tempo
χ	- Espectro de fissão
q_{ex}	- Fonte externa
\vec{J}	- Corrente de nêutrons
D	- Coeficiente de difusão
S	- Fonte de nêutrons
$[J(r)]$	- Matriz coluna de corrente
$[A(r)]$	- Matriz de remoção
$[F(r)]$	- Matriz de fissão
g	- Grupo de energia
$\Sigma_{gg'}$	- Seção de choque macroscópica de espalhamento do grupo g' para o grupo g
m	- Nodo m
V_m	- Volume do nodo m
S_u^m	- Superfície transversal à direção u ($u = x, y$ ou z)
a_x^m	- Dimensão em x do nodo m
a_y^m	- Dimensão em y do nodo m
a_z^m	- Dimensão em z do nodo m
Φ_g^m	- Fluxo médio de nêutrons do grupo g no nodo m
S_V	- Superfície que envolve todo o volume V
\hat{n}_s	- Vetor unitário
$J_{gus}^{\pm m}$	- Corrente parcial de nêutrons no grupo g , na direção u , na superfície s , no nodo m
ψ_{gu}^m	- Fluxo médio transversal do grupo g , na direção u , no nodo m
A_u^m	- Área de interface entre duas regiões na direção u , no nodo m
h_k	- Polinômio de ordem k
J_{in}	- Corrente parcial de entrada
J_{out}	- Corrente parcial de saída

- L_{gu}^m - Fuga transversal do grupo g , na direção u , no nodo m
- \bar{L}_{gu}^m - Fuga média transversal do grupo g , na direção u , no nodo m
- w_i - Função peso
- λ - Autovalor
- ϵ_p - Fator de convergência
- F^n - Potência
- k_{eff} - Fator de multiplicação efetivo

LISTA DE SIGLAS

ANL	Argone National Laboratory
ANM	Analytic Nodal Method
BWR	Boiling Water Reactor
EPRI	Electric Power Research Institute
FBR	Fast Breeder Reactor
FDM	Finite Difference Method
FEM	Finite Element Method
HTR	High Temperature Reactor
IAEA	International Atomic Energy Agency
LD	Linearmente Dependente
LI	Linearmente Independente
LMFBR	Liquid Metal Fast Breeder Reactors
LWR	Light Water Reactor
MIT	Instituto de Tecnologia de Massachusetts
NEM	Nodal Expansion Method
NM	Nodal Method
ORNL	Oak Ridge National Laboratory
PWR	Pressurized Water Reactor

RESUMO

Estuda-se o método da expansão polinomial nodal (NEM) proposto por Finne-
mann (Atomkernenergie Bd.30 – 1977), para solução das equações de difusão de
nêutrons tridimensionais na forma multigrupo, em geometria cartesiana. Utiliza-se
a técnica de resíduos ponderados para o cálculo dos coeficientes de acoplamento das
expansões de ordens superiores.

Derivado da combinação dos métodos nodais e de elementos finitos, o NEM
fornece equações formalmente exatas obtidas através da integração da equação de
balanço de nêutrons.

Simulou-se o caso referência tridimensional a dois grupos de energia proposto
pela AIEA através do programa computacional NEM3D-1A, utilizando-se diferentes
dimensões de nodo. Comparações entre os resultados de referência, os obtidos por
NEM3D-1A e por outros programas indicaram boa concordância.

ABSTRACT

The nodal expansion method (NEM), as proposed by Finnemann (Atomkernenergie Bd.30 – 1977), has been used to solve the multigroup neutron diffusion equations in three-dimensional Cartesian geometry. The weighted residual technique has been applied to determine the higher-order coupling coefficients.

Resulting from the combination of nodal and finite element methods, NEM provides rigorously accurate equations obtained by integrating the neutron balance equation.

The two-group coarse-mesh three-dimensional IAEA benchmark has been simulated by NEM3D-1A using different node sizes. The NEM3D-1A calculations were found to be in good agreement with those obtained by using other standard codes.

1 INTRODUÇÃO

A solução da Equação da Difusão de nêutrons é indispensável à compreensão e análise do comportamento de um reator sob condições normais de operação ou em situações de acidentes postulados. O conhecimento da distribuição espacial e da evolução temporal da população dos nêutrons, em cada grupo de energia, só é possível se o conjunto das equações envolvidas for resolvido, ainda que de forma aproximada. Os programas computacionais desenvolvidos para tais finalidades são chamados de Códigos.

Ao longo de anos, uma teoria bem fundamentada sobre estratégias de utilização do Método das Diferenças Finitas, como forma de aproximar os operadores diferenciais e esquematizar a solução do problema, foi desenvolvida no Departamento de Engenharia Nuclear do Instituto de Tecnologia de Massachusetts (MIT) - EUA, dando origem à uma vasta gama de teses, publicações científicas e relatórios técnicos. A vantagem do método reside no fato de que, com a diminuição da largura do intervalo (h) entre pontos da malha da dimensão discretizada (u - espaço ou tempo), a solução numérica tende à solução analítica. Porém, é fato que com a redução da largura de intervalo, mantida a geometria do problema, o número de pontos (N) a serem calculados aumenta linearmente, considerando-se apenas uma dimensão. A desvantagem do método reside no fato de que resultados confiáveis surgem a partir de valores reduzidos de h , tornando-o praticamente pouco atrativo para problemas tridimensionais, devido ao elevado número de pontos de malha onde as variáveis neutrônicas necessitam ser calculadas, ainda que para o caso estacionário.

Apesar dos avanços tecnológicos computacionais, do aumento significativo da velocidade de processamento e capacidade de armazenagem de dados, a busca por métodos confiáveis que permitam simular um reator inteiro, completo em sua geometria, usando valores de h consideravelmente grandes (do tamanho do elemento combustível) tem sido alvo de interesse de pesquisadores. Tais métodos são denominados “métodos de malha grossa”. Dentre eles, destacam-se os “Métodos Nodais”. Essa categoria de métodos se deriva do balanço integral de nêutrons, onde as variáveis principais são calculadas no volume e nas superfícies de contorno do nodos, são formalmente exatos e o acoplamento

entre nodos se dá através de termos transversais.

No estudo em proposição, objetiva-se o Método da Expansão Polinomial Nodal (NEM - “Nodal Expansion Method”), conforme proposto por (FINNEMANN, 1977). Nesse método, as correntes parciais médias transversais, responsáveis pelos acoplamentos entre nodos, são determinadas através do emprego da Lei de Fick. O fluxo unidimensional (média transversal) é expandido através de um polinômio, onde os coeficientes são determinados através de técnicas de resíduos ponderados, permitindo a utilização de nodos de arestas da ordem de 20 cm. A principal dificuldade no método está na estimativa dos erros associados. Porém, suas vantagens suplantam tal dificuldade, tornando-a apenas curiosidade.

1.1 OBJETIVO

Desenvolver e compreender a teoria do método da expansão polinomial nodal, baseado em estudo proposto por (FINNEMANN, 1977), aplicada a um sistema de equações de difusão de nêutrons na forma multigrupo e estacionário (DOS SANTOS, 1991). Analisar, compreender e realizar modificações na estrutura do programa computacional NEM3D (PAIXÃO, 2016) para a simulação do caso teste referência (“benchmark”) proposto pela Agência Internacional de Energia Atômica (IAEA) (ANL-7416, 1977), comparando os resultados obtidos com aqueles fornecidos como padrão de referência e por outros programas computacionais, porventura disponíveis.

2 FUNDAMENTOS TEÓRICOS

2.1 NÊUTRONS E SUAS INTERAÇÕES COM A MATÉRIA

Nêutrons são partículas desprovidas de carga elétrica (neutras) e que viajam em linha reta, tendo a sua trajetória desviada apenas quando colidem com um núcleo atômico, quando podem ser absorvidos ou espalhados em uma nova direção. Nem os elétrons que orbitam o núcleo (componentes da nuvem eletrônica), nem o campo elétrico causado por um núcleo (carregado positivamente) são capazes de alterar o percurso de um nêutron (DUDERSTADT e HAMILTON, 1942). Em suma, os nêutrons colidem com núcleos, não com átomos. O parâmetro que descreve a interação dos nêutrons com a matéria é a seção de choque macroscópica, (Σ), e o seu inverso, ($\frac{1}{\Sigma}$), é o livre caminho médio, que é a distância média entre uma interação e outra.

Nêutrons podem interagir com a matéria de acordo com o esquema apresentado na FIG. 2.1

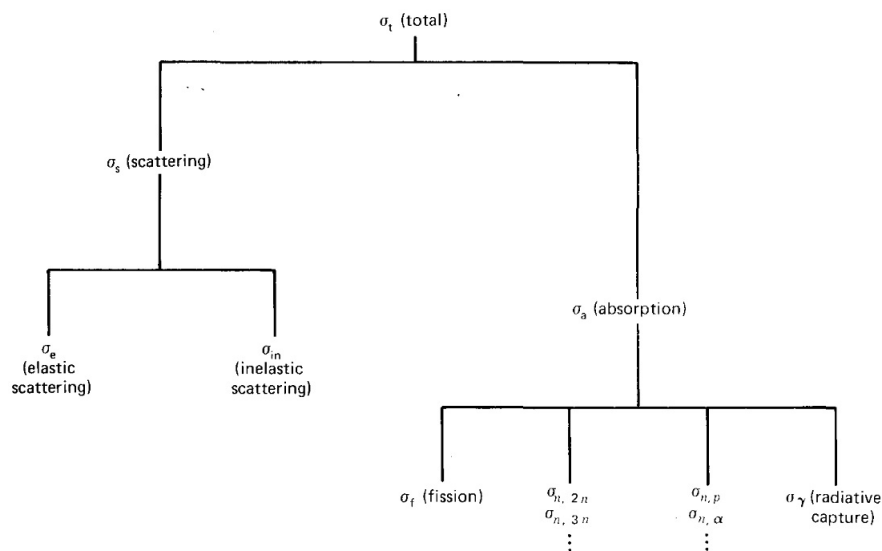


Figura 2.1: Representação esquemática da interação nêutron-núcleo (DUDERSTADT e HAMILTON, 1942)

2.2 SEÇÕES DE CHOQUE

Em geral, apesar do nome ser inapropriado, a seção de choque macroscópica de um núcleo caracteriza a probabilidade por unidade de comprimento, ou seja, a densidade linear de probabilidade da ocorrência de um processo de interação neutron-núcleo. A seção de choque macroscópica total, Σ_t , é a soma das seções de choque de espalhamento e absorção (DUDERSTADT e HAMILTON, 1942). Seguindo a definição:

$$\Sigma_t = \Sigma_s + \Sigma_a$$

2.3 EQUAÇÃO DE TRANSPORTE DE NÊUTRONS

A equação de transporte integro-diferencial fornece a descrição quantitativa da distribuição de partículas em meios materiais, representando o balanço de nêutrons em um elemento de volume do espaço de fase,

$$\begin{aligned} & \frac{1}{v} \frac{\partial \phi}{\partial t} + \hat{\Omega} \cdot \vec{\nabla} \phi + \Sigma_t \phi \\ &= \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' \Sigma_s(\vec{r}, E' \rightarrow E, \hat{\Omega}' \cdot \hat{\Omega}) \phi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t) \\ &+ \frac{\chi(E)}{4\pi} \int_{4\pi} d\hat{\Omega}' \int_0^\infty dE' \nu \Sigma_f(\vec{r}, E') \phi(\vec{r}, \hat{\Omega}', E', t) + q_{ex} \end{aligned} \quad (2.1)$$

Sendo $\phi \equiv \phi(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t)$, $\Sigma_t \equiv \Sigma_t(\vec{r}, E)$ e $q_{ex} \equiv q_{ex}(\vec{r}, \hat{\Omega}, E, t)$.

Encontrar soluções para a EQ 2.1 não é trivial e desafia as abordagens elementares dos métodos analíticos. Isso se dá, principalmente, devido à dependência energética das seções de choque macroscópicas e à dependência angular e energética da seção de choque de espalhamento.

2.4 A APROXIMAÇÃO DA DIFUSÃO

Devido à estrutura complexa da equação de transporte, torna-se, muitas vezes, obrigatório introduzir-se aproximações. Uma delas, bastante comum em projetos, é a aproximação da difusão. Em síntese, ela descreve o espalhamento angular através de uma anisotropia linear, acarretando limitações para o seu uso. A simplicidade da equação obtida, a equação da difusão, justifica a sua adoção. A lei de Fick é a essência do processo. Ela relaciona a corrente de nêutrons \vec{J} com o gradiente do fluxo, $\vec{\nabla}\phi$, sendo D o coeficiente de difusão:

$$\vec{J} = -D\vec{\nabla}\phi$$

Como exemplo, temos a equação da difusão dependente do tempo a um grupo de energia. Ela foi obtida pela substituição de \vec{J} pela lei de Fick.

$$\frac{1}{v} \frac{\partial \phi}{\partial t} = \vec{\nabla} \cdot D\vec{\nabla}\phi - \Sigma_a \phi + S$$

No caso estacionário, ela se reduz a:

$$\vec{\nabla} \cdot D\vec{\nabla}\phi - \Sigma_a \phi + S = 0$$

2.5 A EQUAÇÃO DA DIFUSÃO

Equação Fundamental de Balanço Neutrônico

A base formal da abordagem nodal, no presente trabalho, é oriunda da equação de balanço 2.2

$$\nabla \cdot [J(r)] + [A(r)] [\phi(r)] = \frac{1}{\lambda} [F(r)] [\phi(r)] \quad (2.2)$$

relacionando a corrente total e o fluxo, os termos de perda por absorção, a fonte de

nêutrons de fissão e o fator de multiplicação do meio.

Em que $A(r)$ representa o termo de perda por absorção e espalhamento, $F(r)$ representa a fonte nêutrons por fissão e λ é o fator de multiplicação do meio (HENRY, 1975).

3 MÉTODOS COMPUTACIONAIS

3.1 INTRODUÇÃO

O projeto do núcleo de um reator tem por objetivo principal definir as características físicas e neutrônicas do núcleo, especificando os parâmetros relevantes que o caracterizam neutronicamente, tais como fator de multiplicação e distribuições de fluxo e potência, dentre outros. A distribuição de fluxo pode ser descrita pela solução da equação de transporte de Boltzmann. Tal solução apresenta dificuldades, das quais se destacam: a não linearidade do sistema, devido a efeitos de realimentação das seções de choque, e os elevados requisitos computacionais, devido à quantidade de variáveis a serem tratadas bem como suas dependências. Felizmente, para a engenharia de tais projetos, algumas aproximações mostraram-se eficientes e suficientemente precisas, dentre as quais se destacam: a utilização da equação da difusão de nêutrons e a utilização de quantidade definida de grupos de energia, derivada do desenvolvimento de técnicas de homogeneização adequadas.

Em um passado recente, o método de diferenças finitas de baixas ordens tornou-se a ferramenta mais utilizada devido a aspectos de flexibilidade de programação e confiabilidade de resultados. Trata-se de um método cujos resultados convergem para a solução exata à medida que o intervalo de malha é reduzido, e que possibilita, através de sua teoria bem fundamentada, a prévia análise de aspectos de estabilidade e de estimativa de erros associados ao seu emprego. No caso de reatores de pequeno porte moderados à água leve, o largo emprego desse método provou sua qualidade e eficiência. Porém, no caso de reatores comerciais, devido ao aumento dos requisitos de precisão e das dimensões do núcleo, tendo em vista aspectos significativos de gerenciamento de combustível, incorreu num crescimento da quantidade de pontos de malha de forma tão significativa que as simulações ficaram restritas a centros possuidores de computadores de grande porte. As possibilidades de se utilizar então esse método como rotina de simulação tornaram-se proibitivas. Na intenção de contornar essa dificuldade, foram desenvolvidas técnicas de aceleração de convergência e de otimização de algoritmos.

Com o advento dos computadores do tipo pessoal, avanços e melhorias no desempenho e eficiência dos processadores e aumento da capacidade de armazenamento das máquinas, considerável ênfase foi dada ao desenvolvimento de métodos capazes de suportar maiores larguras de intervalos de malha, sem perda de confiabilidade de seus resultados, dando origem à classe dos chamados “métodos de malha grossa”.

3.2 CARATERIZAÇÃO DOS MÉTODOS

No intuito de delinear um panorama de alguns dos principais métodos utilizados em cálculos de núcleos de reatores, apresenta-se a seguir uma breve explanação sobre cada um deles. Como toda breve explanação carece de maiores aprofundamentos, as descrições apresentadas restringem-se a aspectos que possam ressaltar características fundamentais.

3.2.1 MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS DE BAIXAS ORDENS

Baseado na forma tradicional da equação de diferenças, geralmente obtida através de um processo do tipo “box integration”, fornece resultados em pontos específicos da malha; ou seja, centrados na malha ou centrados nas interfaces. De base teórica bem fundamentada, utiliza-se de técnicas iterativas e de métodos auxiliares para aceleração de convergência de seus resultados.

3.2.2 MÉTODO DE DIFERENÇAS FINITAS DE ALTAS ORDENS

Algumas vezes chamado de “método de diferenças finitas de malha grossa”, utiliza-se das informações de pontos adicionais, além daqueles imediatamente vizinhos. Apesar de fornecer resultados em pontos específicos da malha, o acoplamento entre esses se dá de

forma ajustada conforme características próprias do problema.

3.2.3 MÉTODOS DOS ELEMENTOS FINITOS

Conceitualmente distinto do método de diferenças finitas de altas ordens, os resultados dos fluxos não se dão em pontos específicos da malha e de forma direta. Em vez disso, a solução é obtida através de uma expansão polinomial dentro do elemento da malha (elemento finito), com coeficientes a determinar. As condições de continuidade ao longo das interfaces dos elementos vizinhos fornecem os conjuntos de equações necessárias à determinação desses coeficientes, relacionando-os aos valores de fluxos e suas derivadas.

3.2.4 MÉTODOS NODAIS

Derivam-se da forma integrada das equações de balanço de nêutrons e, conseqüentemente, fornecem resultados integrados em cada elemento (nodo) da malha. Oferecem por resultado, valores médios de fluxos integrados no volume do nodo e de correntes médias de nêutrons integradas nas superfícies transversais de interface entre nodos imediatamente vizinhos. Formalmente exatos, não dependem da aproximação da difusão. Necessitam de considerações específicas sobre as distribuições espaciais e angulares das distribuições de fluxos.

3.2.5 MÉTODOS DE MATRIZ RESPOSTA

Caracterizam-se pelo pré-cálculo das “funções resposta”, que são matrizes que relacionam os fluxos neutrônicos entrantes através das interfaces do elemento (célula) da malha aos fluxos de saída. As células da malha podem conter estruturas fortemente heterogêneas. Formalmente exatos, dependem de considerações a respeito das distribuições

espaciais e angulares dos fluxos entrante e sainte. Assemelham-se aos métodos nodais, porém podem ser considerados mais genéricos.

3.2.6 COMBINAÇÃO DE MÉTODOS

A combinação de características básicas de métodos tem sido alvo de investigações, gerando variações eficientes e precisas. Alguns desses resultados são não lineares e necessitam de procedimentos iterativos durante o processo de solução, além de considerações sobre as distribuições espaciais e angulares dos fluxos neutrônicos.

3.2.6.1 MÉTODO DE PROBABILIDADE DE COLISÃO NODAL

A determinação das probabilidades de colisão efetivas depende das distribuições espaciais e angulares dos fluxos de nêutrons e das fontes. Assume-se uma forma para essas distribuições (forma linear, p.ex.), com alguns parâmetros livres. Estabelecido o processo de cálculo iterativo, são ajustados os parâmetros livres, objetivando o refinamento de resultados. Trata-se, portanto, de um processo não linear.

3.2.6.2 MÉTODO DE EXPANSÃO NODAL

Resultante da combinação de algumas características do método nodal e de princípios básicos do método de elementos finitos. Utiliza-se de uma expansão polinomial, como suposição para refinamento dos resultados dos coeficientes de acoplamento entre nodos imediatamente vizinhos, e da aplicação de procedimentos de ponderação residual, como restrição à dependência espacial da equação de balanço neutrônico. Seus resultados constituem-se em quantidades integradas no nodo, tais como fluxos médios no volume

e correntes médias nas interfaces. Necessitam de técnicas especiais de reconstrução de fluxo, considerando as heterogeneidades dentro do nodo, para que valores por ponto sejam fornecidos.

3.2.6.3 MÉTODO DE EXPANSÃO DE FLUXO

Resultante da combinação de algumas características do método de diferenças finitas de altas ordens e de princípios básicos do método de elementos finitos. Utiliza-se de uma expansão polinomial, objetivando estabelecer condições de continuidades em pontos médios das interfaces entre elementos imediatamente vizinhos da malha e para complementar as equações adicionais derivadas do emprego da técnica de resíduos ponderados. O método fornece por resultado valores de fluxo por pontos.

3.3 MÉTODOS USADOS EM DIFERENTES REATORES

Apresenta-se um panorama dos métodos comentados e suas aplicações em alguns tipos de reatores nucleares. A tendência mundial de utilização de reatores de potência do tipo moderados por água leve (LWR) justifica o maior esforço no desenvolvimento de métodos e técnicas diretamente aplicados a essa família.

3.3.1 MÉTODOS PARA REATORES MODERADOS POR ÁGUA LEVE (LWR)

Observando resultados publicados em literatura científica, parece justo dizer que os métodos de expansão nodal e de expansão de fluxo representam um avanço no que diz respeito à precisão e eficiência. Aplicáveis a problemas bi e tridimensionais, podem promover ferramentas de rotina para tomadas de decisões em aspectos de gerenciamento de combustível e simulações em tempo real. Investigações com intervalos de malha da ordem

de 10 cm mostram máximos desvios de potência média em montagens de combustível da ordem de 1% e de k_{eff} da ordem de 0,01%.

O método de elementos finitos se mostra satisfatório para aplicações em problemas tridimensionais, mas sem atingir o mesmo grau de eficiência dos métodos de expansão citados.

Os métodos de diferenças finitas de altas ordens e outras variações de métodos nodais (analíticos, p.ex.) se mostram promissores quando combinados com técnicas de otimização de procedimentos de solução.

As aplicações em reatores do tipo à água fervente (BWR) se mostram mais complicadas do que os do tipo à água pressurizada (PWR) devido aos efeitos de realimentação. Os resultados computacionais dependem fortemente dos efeitos termo hidráulicos do que das incertezas neutrônicas.

As simulações encontradas utilizavam urânio como elemento combustível.

3.3.2 MÉTODOS PARA REATORES DE ALTAS TEMPERATURAS (HTR)

Utiliza-se comumente o método de diferenças finitas de baixas ordens para cálculos em malhas finas. Para o caso de malhas da ordem de dois comprimentos de difusão (aproximadamente o comprimento lateral de um elemento combustível hexagonal), as aplicações de métodos nodais e de diferenças finitas se mostraram promissoras. Relatam-se algumas aplicações de métodos de probabilidades de colisões.

Pode-se dizer que maior obstáculo aos cálculos neutrônicos nessa família de reatores reside nos procedimentos de homogeneização, devido às estruturas duplamente heterogêneas de seus combustíveis (varetas ou esferas contendo partículas de combustível recobertas com camadas de materiais cerâmicos de contenção).

3.3.3 MÉTODOS PARA REATORES REGENERADORES RÁPIDOS (FBR)

Para essa família de reatores, especialmente para os refrigerados por metais líquidos (LMFBR), os métodos de diferenças finitas de baixas ordens (e de síntese de fluxo) têm se mostrado eficientes e conseqüentemente preferíveis. O método de expansão de fluxo se mostrou satisfatório em simulações em geometrias retangulares, indicando uma nova vertente investigativa em face da compatibilidade de seus resultados aos de simulações utilizando diferenças finitas de baixas ordens, com tamanhos de malha maiores.

3.4 SUMÁRIO DAS VANTAGENS E DESVANTAGENS ASSOCIADAS

Não se constitui em tarefa simples descrever sumariamente vantagens e desvantagens de um grupo de métodos, já que para isso se faz necessário conhecer profundamente cada um deles, o que foge ao escopo do presente trabalho. Porém, entende-se que esse sumário, apesar de não esgotar pareceres, possa de alguma forma contribuir aos interessados nesse nicho da Física de Reatores.

MÉTODO	VANTAGENS	DESVANTAGENS
Diferenças Finitas de Baixas Ordens	<ul style="list-style-type: none"> - Alta flexibilidade (tipo de reator, geometria, simetrias, etc.); - Teoria bem fundamentada; - Distribuição local de potência diretamente disponível. 	<ul style="list-style-type: none"> - Baixa precisão para malhas grossas; - Baixa eficiência para núcleos grandes.
Diferenças Finitas de Altas Ordens	<ul style="list-style-type: none"> - Deriva de teoria bem fundamentada; - Coeficientes de acoplamento ajustáveis. 	<ul style="list-style-type: none"> - Acoplamentos matriciais complicados; - Perda de base teórica; - Experiência numérica do usuário.
Elementos Finitos	<ul style="list-style-type: none"> - Flexibilidade geométrica; - Alta eficiência para grandes regiões homogêneas; - Base teórica satisfatória; - Distribuição local de potência diretamente disponível. 	<ul style="list-style-type: none"> - Matrizes de acoplamento pouco esparsas; - Soluções tridimensionais necessitam de processos iterativos, com perda de eficiência; - Inclusão de efeitos de realimentação reduz eficiência.
Nodais	<ul style="list-style-type: none"> - Formalmente exatos, não dependem da aproximação da difusão; - Solução de fácil obtenção. 	<ul style="list-style-type: none"> - Baixa precisão; - Não convergem para a solução exata com o refinamento da malha; - Base teórica fraca; - Distribuição local de potência não diretamente disponível.
Matriz Resposta	<ul style="list-style-type: none"> - Alta eficiência para família FBR; - Tratam facilmente heterogeneidades; - Formalmente exatos, não dependem da aproximação da difusão. 	<ul style="list-style-type: none"> - Inclusão de efeitos de realimentação reduz eficiência; - Impossibilidade de refinamentos para malhas grossas; - Dificuldades em tratar grande número de regiões.
Probabilidade de Colisão Nodal	<ul style="list-style-type: none"> - Solução de fácil obtenção; - Não depende das aproximações da teoria da difusão. 	<ul style="list-style-type: none"> - Precisão insuficiente para malhas grossas (especialmente para queimas); - Não converge para solução exata com refinamento da malha; - Fraca base teórica; - Distribuição local de potência não diretamente disponível.
Expansão Nodal	<ul style="list-style-type: none"> - Alta eficiência para malhas grossa; - Rápida convergência para solução exata, com emprego de polinômios de ordens superiores; - Aceita técnicas de aceleração. 	<ul style="list-style-type: none"> - Fraca base teórica, apesar dos bons resultados para família LWR; - Distribuição local de potência não diretamente disponível.
Expansão de Fluxo	<ul style="list-style-type: none"> - Alta eficiência para malhas grossa; - Rápida convergência para solução exata, com emprego de polinômios de ordens superiores; - Aceita técnicas de aceleração. 	<ul style="list-style-type: none"> - Fraca base teórica, exceto para expansões de baixa ordem, apesar dos bons resultados para famílias LWR e LMFBR.

4 O MÉTODO DA EXPANSÃO POLINOMIAL NODAL

No presente trabalho utiliza-se como referência principal o estudo realizado por FINNEMANN (1977), intitulado: “Interface current techniques for multidimensional reactor calculations”.

O método da expansão nodal (NEM) consiste em uma técnica conceitualmente derivada da classe dos Métodos Nodais, à qual foram combinadas características do Método de Elementos Finitos. Trata-se de um método consistente, de reconhecida eficiência para malhas grossas, baseado na forma integral das equações de difusão de nêutrons multi-grupo.

O NEM, como será apresentado, é formulado através da conversão da forma P1 da equação de difusão de nêutrons em um conjunto de equações unidimensionais de difusão para o fluxo médio, para cada uma das direções espaciais, denominadas por equações de balanço nodal.

As equações nodais são obtidas através da integração formal da equação de difusão em cada elemento de volume (nodo). Os coeficientes de acoplamento entre fluxos nodais e correntes médias transversais, são determinados através da solução de problemas auxiliares unidimensionais, para fluxos médios transversais, com a utilização de expansões polinomiais. Os coeficientes polinomiais são obtidos através da utilização de condições de contorno e de consistência, e da técnica de resíduos ponderados.

Dada a equação estacionária de balanço neutrônico multigrupo,

$$\vec{\nabla} \cdot D_g(\vec{r}) \vec{\nabla} \phi_g(\vec{r}) - \Sigma_{tg}(\vec{r}) \phi_g(\vec{r}) + \sum_{g'} [\Sigma_{gg'}(\vec{r}) + \frac{1}{\lambda} \chi_g \nu \Sigma_{fg'}(\vec{r})] \phi_{g'}(\vec{r}) = 0 \quad (4.1)$$

Considerando a Lei de Fick (Forma P1):

$$\vec{J}_g(\vec{r}) = -D_g(\vec{r}) \vec{\nabla} \phi_g(\vec{r}) \quad (4.2)$$

Aplicando (4.2) em (4.1)

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}(\vec{r}) + \Sigma_{tg}(\vec{r})\phi_g(\vec{r}) = \sum_{g'} [\Sigma_{gg'}(\vec{r}) + \frac{1}{\lambda}\chi_{g\nu}\Sigma_{fg'}(\vec{r})]\phi_{g'}(\vec{r}) \quad (4.3)$$

Para que essa equação seja considerada um “problema bem posto”, alguns requisitos devem ser satisfeitos:

- $\phi_g(\vec{r})$ deve ser contínuo em todo espaço (em todo e qualquer ponto espacial);
- As componentes de \vec{J} , em cada uma das direções consideradas, devem ser contínuas ao longo das superfícies de contorno;
- Ao longo do contorno do sistema a corrente neutrônica reentrante deve ser nula (garantia da aproximação de difusão).

Representação geométrica (NEM)

De posse das informações iniciais, o arranjo neutrônico modelado é seccionado em elementos volumétricos regulares (caixas, paralelepípedos, cuboides) denominados nodos, de dimensões (arestas) a_u ($u = x, y, z$).

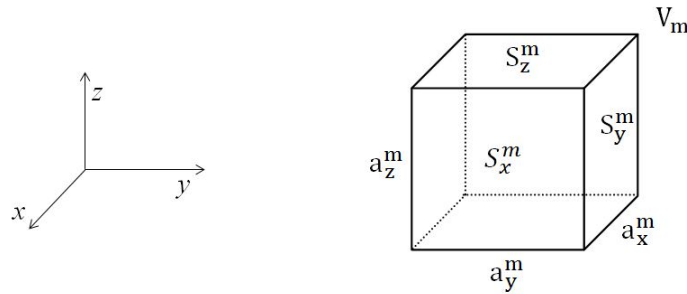


Figura 4.1: Representação esquemática de um nodo e suas faces.

$$V_m = a_u^m \cdot a_v^m \cdot a_w^m = a_x^m \cdot a_y^m \cdot a_z^m; \quad (4.4a)$$

$$S_u^m = a_w^m \cdot a_v^m, \quad \vec{u} = \vec{w} \times \vec{v}; \quad (4.4b)$$

$$\vec{u} \cdot \vec{v} = \vec{v} \cdot \vec{w} = \vec{w} \cdot \vec{u} = 0 \quad (4.4c)$$

Considerando-se que:

1. Dentro de cada nodo os parâmetros materiais são assumidos homoganeamente distribuídos;
2. A integração da EQ 4.3 no volume de cada nodo resultará em um conjunto de equações denominadas “equações de balanço nodal”;
3. Pode-se dizer então que o Método Nodal é uma técnica baseada na forma integral das equações de difusão, que transforma a forma *P1* em um conjunto de equações unidimensionais para o fluxo médio, em cada uma das direções consideradas, acopladas através de termos transversais.

Integrando a equação de difusão multigrupo em uma subregião homogênea do sistema neutrônico de interesse:

$$\int_{V_m} \vec{\nabla} \cdot \vec{J} dV + \int_{V_m} \Sigma_{tg} \phi_g dV = \sum_{g'=1}^G \int_{V_m} \Sigma_{gg'} \phi_{g'} dV + \sum_{g'=1}^G \int_{V_m} \frac{1}{\lambda} \chi_g \nu \Sigma_{fg'} \phi_{g'} dV \quad (4.5)$$

A partir de então, considerando-se uma subregião homogênea, definem-se as seções de choque $\Sigma_{Xg}^m(x, y, z)$ e o fluxo médio intranodal $\Phi_g^m(x, y, z)$,

$$\Phi_g^m \equiv \frac{\int_{V_m} \phi_g(x, y, z) dV}{\int_{V_m} dV} = \frac{1}{V_m} \int_{V_m} \phi_g(x, y, z) dV$$

Conservando as taxas de reação,

$$\int_{V_m} \Sigma_{Xg} \phi_g(x, y, z) dV = \Sigma_{Xg}^m \Phi_g^m V_m$$

Assim, reescrevendo a EQ 4.5, agora em termos do fluxo médio intranodal,

$$\int_{V_m} \vec{\nabla} \cdot \vec{J}(x, y, z) dV + \Sigma_{tg}^m \Phi_g^m V_m = \sum_{g'=1}^G [\Sigma_{gg'}^m + \frac{1}{\lambda} \chi_g^m \nu \Sigma_{fg'}] \Phi_{g'}^m V_m \quad (4.6)$$

Do Teorema da Divergência tem-se,

$$\int_V \vec{\nabla} \cdot \vec{J} dV = \int_{S_V} \vec{J} \cdot \hat{n}_s dS, \quad d\vec{S} = \hat{n}_s dS$$

Logo, define-se o termo de corrente:

$$= \sum_{u=x,y,z} \frac{1}{a_u^m} [(J_{gur}^{+m} - J_{gur}^{-m}) - (J_{gul}^{+m} - J_{gul}^{-m})] V_m$$

Onde, $s = l \Rightarrow u = 0$; $s = r \Rightarrow u = a$, na direção u , no nodo m .

Fazendo a substituição do termo de corrente na EQ 4.6, obtem-se a seguinte equação de balanço nodal

$$\sum_{u=x,y,z} \frac{1}{a_u^m} [(J_{gur}^{+m} - J_{gur}^{-m}) - (J_{gul}^{+m} - J_{gul}^{-m})] + \Sigma_{tg}^m \Phi_g^m = \sum_{g'=1}^G [\Sigma_{gg'}^m + \frac{1}{\lambda} \chi_g^m \nu \Sigma_{fg'}] \Phi_{g'}^m \quad (4.7)$$

A EQ 4.7 relaciona o fluxo médio no nodo m com as correntes parciais em cada direção, presentes em cada uma das faces desse mesmo nodo.

Através deste sistema de equações - três direções e G grupos de energia - expressa-se uma relação entre fluxos médios intranodais (integrados no volume) e correntes parciais médias nas interfaces (contornos dos nodos); ou seja, uma relação entre taxas de fuga de nêutrons e de suas diversas interações com o meio.

Dispondo-se das seguintes informações de contorno,

$$J_{gus}^{+m} - J_{gus}^{-m} \cong -D_{gus}^m \frac{d}{du} \psi_{gu}^m(u)|_{us}; \quad (4.8a)$$

$$2(J_{gus}^{+m} + J_{gus}^{-m}) \cong \psi_{gu}^m(u)|_{us}. \quad (4.8b)$$

No intuito de se estabelecer uma relação “mais consistente” entre termos de corrente, de característica unidirecional, e fluxos nodais, de características integrais, descreve-se uma variável auxiliar, de características tais que possa ser avaliada em qualquer ponto do nodo (dentro ou nas interfaces, inclusive), através da qual será postulada a expansão polinomial: “fluxo médio transversal” ψ_{gu}^m .

$$\psi_{gu}^m \equiv \frac{1}{A_u^m} \int_{A_u^m} \phi_g(x, y, z) dS_V. \quad (4.9)$$

A conexão entre o fluxo médio transversal e o fluxo médio no volume é definida como uma condição de consistência a ser atendida,

$$\Phi_g^m \equiv \frac{1}{a_u^m} \int_0^{a_u^m} \psi_{gu}^m(u) du. \quad (4.10)$$

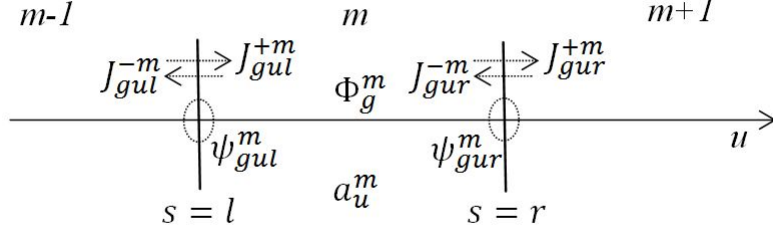


Figura 4.2: Representação esquemática das correntes parciais no nodo m .

4.1 EXPANSÃO DE SEGUNDA ORDEM - O NEM BÁSICO

Estabelecidas as relações entre termos principais e auxiliar, propõe-se a expansão polinomial de ordem quadrática ($N \leq 2$). Tal ordem justifica-se com base nas próprias condições (de contorno e de consistência) definidas anteriormente.

$$\psi_{gu}^{m(2)}(u) = C_{00,g}^m + \sum_{k=1}^{N=2} C_{uk,g}^m h_k\left(\frac{u}{a_u^m}\right) \quad (4.11)$$

onde $C_{uk,g}^m$ é o coeficiente de acoplamento do polinômio de ordem k na expansão e $C_{00,g}^m$ é o termo fundamental.

$$\psi_{gu}^{m(2)}(u) = C_{00,g}^m h_0\left(\frac{u}{a_u^m}\right) + C_{u1,g}^m h_1\left(\frac{u}{a_u^m}\right) + C_{u2,g}^m h_2\left(\frac{u}{a_u^m}\right) \quad (4.12)$$

A partir da EQ 4.12 e utilizando-se as condições de consistência e de contorno pré-estabelecidas, são definidos os polinômios e seus respectivos coeficientes.

$$C_{00,g}^m = \Phi_g^m; \quad h_0\left(\frac{u}{a_u^m}\right) = 1$$

$$C_{u1,g}^m = \frac{1}{2}(\psi_{gur}^m - \psi_{gul}^m); \quad h_1\left(\frac{u}{a_u^m}\right) = 2\left(\frac{u}{a_u^m}\right) - 1$$

$$C_{u2,g}^m = \Phi_g^m - \frac{1}{2}(\psi_{gur}^m + \psi_{gul}^m); \quad h_2\left(\frac{u}{a_u^m}\right) = 6\left(\frac{u}{a_u^m}\right)\left[1 - \left(\frac{u}{a_u^m}\right)\right] - 1$$

Onde estes compõem um conjunto de polinômios pertencentes à mesma família, ortogonais e linearmente independentes (LI), gerando componentes de uma base completa e suficiente para gerar o espaço funcional para a solução considerada.

Inserindo a expansão EQ 4.12 nos termos das informações de contorno EQ 4.8a e EQ 4.8b, obtêm-se equações que permitem calcular as correntes que saem/fogem do nodo m em cada face, esquerda (l) e direita (r). Ou seja, das condições previamente estabelecidas (contorno, consistência e ortogonalidade), encontramos uma relação matricial da forma:

$$A \cdot J_{out} = B \cdot J_{in} + C$$

Que pode ser reescrita

$$J_{gul}^{-m} = A_{0gu}^m \Phi_g^m + A_{1gu}^m J_{gul}^{+m} + A_{2gu}^m J_{gur}^{-m}; \quad (4.13a)$$

$$J_{gur}^{+m} = A_{0gu}^m \Phi_g^m + A_{2gu}^m J_{gul}^{+m} + A_{1gu}^m J_{gur}^{-m} \quad (4.13b)$$

Retornando à EQ 4.7 e introduzindo as aproximações de correntes redefinidas anteriormente, obtém-se

$$\left(\sum_{u=x,y,z} 2 \frac{A_{0gu}^m}{a_u^m} + \Sigma_{tg}^m \right) \Phi_g^m - \sum_{g'=1}^G (\Sigma_{gg'}^m + \frac{1}{\lambda} \chi_g^m \nu \Sigma_{fg'}) \Phi_{g'}^m = \sum_{u=x,y,z} \frac{1}{a_u^m} [(1 - A_{1gu}^m - A_{2gu}^m) (J_{gul}^{+m} + J_{gur}^{-m})] \quad (4.14)$$

Até este ponto, foram obtidas soluções independentes para cada uma das direções. Porém, o artifício dessa suposta “separabilidade” incorre em erros, tanto mais severos, quanto maiores forem as dimensões do nodo. Justifica-se então melhorar a precisão do método, ampliando a ordem da expansão.

4.2 EXPANSÕES DE ORDENS SUPERIORES

A expansão para o fluxo médio transversal para ordens superiores será reescrita da seguinte forma:

$$\psi_{gu}^{m(N)}(u) \cong \psi_{gu}^{m(2)}(u) + \sum_{n=3}^N C_{un,g}^m h_n \left(\frac{u}{a_u^m} \right)$$

Os coeficientes associados aos termos de ordens superiores ($N \geq 3$) podem ser determinados “impondo-se” que a expansão seja solução da *Equação da Difusão* unidimensional na forma do fluxo médio transversal e que, da mesma forma, os polinômios de ordens superiores gerem uma base funcional de solução; ou seja, guardem a propriedade de ortogonalidade entre si (LI).

Os polinômios podem ser escritos:

$$h_0(v) = 1;$$

$$h_1(v) = 2v - 1 \Leftrightarrow h_1(v) = v - \frac{1}{2};$$

$$h_2(v) = 6v(1 - v) - 1 \Leftrightarrow h_2(v) = v(1 - v) - \frac{1}{6};$$

$$h_3(v) = 6v(1 - v)(2v - 1) \Leftrightarrow h_3(v) = v(1 - v) \left(v - \frac{1}{2} \right);$$

$$h_4(v) = 6v(1 - v)(5v^2 - 5v + 1) \Leftrightarrow h_4(v) = v(1 - v) \left(v^2 - v + \frac{1}{5} \right);$$

$$h_5(v) = 6v(1 - v)(2v - 1)(6v^2 - 6v + 1) \Leftrightarrow h_5(v) = v(1 - v) \left(v - \frac{1}{2} \right) \left(v^2 - v + \frac{1}{6} \right).$$

Onde a primeira definição em cada linha refere-se à forma dos polinômios conforme Finemann e a segunda à forma normalizada.

Por gerar uma nova base funcional, os termos de ordens superiores devem guardar o princípio de ortogonalidade entre si (LI), observando dependência com o espaço funcional da solução para a formulação básica. Ou seja, os polinômios de ordens superiores são linearmente dependentes (LD) dos polinômios da formulação básica.

Considerando a limitação da formulação básica do NEM em admitir suposta separabilidade matemática das dimensões espaciais, busca-se, a partir de análises do comportamento da equação de balanço EQ 4.1 nas direções transversais à varredura do nodo, um

precedimento semelhante ao empregado anteriormente.

Integrando a EQ 4.1 na seção transversal à direção u , no intervalo 0 a a_u^m e assumindo parâmetros homogêneos nos nodos,

$$-D_g^m \frac{\partial^2}{\partial u^2} \psi_{gu}^{m(2)}(u) + \Sigma_{tg}^m \psi_{gu}^{m(2)}(u) = \sum_{g'=1}^G (\Sigma_{gg'}^m + \frac{1}{\lambda} \chi_g^m \nu \Sigma_{fg'}^m) \psi_{g'u}^{m(2)}(u) - L_{gu}^m(u). \quad (4.15)$$

Onde,

$$L_{gu}^m(u) = -\frac{1}{A_u^m} \int_{A_u^m} D_g^m \left(\frac{\partial^2}{\partial v^2} + \frac{\partial^2}{\partial w^2} \right) \phi_g(\vec{r}) dA.$$

Que representa o termo de interdependência das direções, denominado *Fuga Média Transversal*, o qual pode ser igualmente aproximado por uma expansão polinomial da mesma forma que foi realizada anteriormente para o fluxo médio transversal.

$$L_{gu}^m(u) \cong f_{0gu}^m h_0\left(\frac{u}{a_u^m}\right) + f_{1gu}^m h_1\left(\frac{u}{a_u^m}\right) + f_{2gu}^m h_2\left(\frac{u}{a_u^m}\right),$$

Onde, associando ao desenvolvimento realizado para o fluxo médio transversal:

$$f_{0gu}^m = \bar{L}_{gu}^m;$$

$$f_{1gu}^m = \frac{1}{2} (L_{gur}^m - L_{gul}^m);$$

$$f_{2gu}^m = \bar{L}_{gu}^m - \frac{1}{2} (L_{gur}^m + L_{gul}^m)$$

O termo \bar{L}_{gu}^m , denominado “fuga transversal média”, expressa a fuga média para as direções transversais a u . Matematicamente parece razoável escrevê-lo:

$$\bar{L}_{gu}^m = \sum_{k=v,w} \frac{1}{a_u^m} (J_{out,k}^m - J_{in,k}^m) = \sum_{k=v,w} \frac{1}{a_u^m} [(J_{gkl}^{-m} + J_{gkr}^{+m}) - (J_{gkl}^{+m} + J_{gkr}^{-m})]$$

Das seguintes condições de continuidade nas fronteiras entre nodos,

$$L_{gur}^{m-1} = L_{gul}^m$$

$$D_g^{m-1} \frac{\partial}{\partial u} L_{gur}^{m-1} = D_g^m \frac{\partial}{\partial u} L_{gul}^m$$

se $a_u^{m-1} = a_u^m, \forall m > 0$

$$L_{gul}^m = (D_g^{m-1} \bar{L}_{gu}^{m-1} + D_g^m \bar{L}_{gu}^m) / (D_g^{m-1} + D_g^m)$$

$$L_{gur}^m = (D_g^m \bar{L}_{gu}^m + D_g^{m+1} \bar{L}_{gu}^{m+1}) / (D_g^m + D_g^{m+1})$$

Coefficientes de ordens superiores

Com vistas à determinação dos coeficientes de ordens superiores, será utilizada a técnica de resíduos ponderados aplicada à equação de balanço do fluxo médio transversal.

$$\int_0^{a_u^m} w_i(u) \cdot \left[-D_g^m \frac{\partial^2}{\partial u^2} \psi_{gu}^m(u) + \Sigma_{tg}^m \psi_{gu}^m(u) - \sum_{g'=1}^G (\Sigma_{gg'}^m + \frac{1}{\lambda} \chi_g^m \nu \Sigma_{fg'}^m) \psi_{g'u}^m(u) + L_{gu}^m(u) \right] du = 0$$

Foram investigadas as utilizações dos pesos Galerkin e Momento, para a determinação dos coeficientes. Exemplifica-se, a seguir, as equações obtidas para os coeficientes $C_{u3,g}$ e $C_{u4,g}$, a partir da aplicação da técnica de resíduos ponderados utilizando peso momento.

$$\begin{aligned} & -\frac{1}{2} \frac{D_g^g}{(a_u^m)^2} C_{u3,g}^m + \Sigma_{tg}^m \left(\frac{1}{12} C_{u1,g}^m - \frac{1}{120} C_{u3,g}^m \right) + \\ & - \sum_{g'=1}^G (\Sigma_{gg'}^m + \frac{1}{\lambda} \chi_g^m \nu \Sigma_{fg'}^m) \left(\frac{1}{12} C_{u1,g'}^m - \frac{1}{120} C_{u3,g'}^m \right) + \frac{1}{12} f_{1gu}^m = 0 \\ & -\frac{1}{15} \frac{D_g^g}{(a_u^m)^2} C_{u4,g}^m + \Sigma_{tg}^m \left(\frac{1}{180} C_{u2,g}^m - \frac{1}{2100} C_{u4,g}^m \right) + \\ & - \sum_{g'=1}^G (\Sigma_{gg'}^m + \frac{1}{\lambda} \chi_g^m \nu \Sigma_{fg'}^m) \left(\frac{1}{180} C_{u2,g'}^m - \frac{1}{2100} C_{u4,g'}^m \right) + \frac{1}{180} f_{2gu}^m = 0 \end{aligned}$$

Cálculo da Distribuição Estacionária do Fluxo

Considerando a expansão de quinta ordem,

$$\psi_{gu}^{m(5)}(u) \cong \psi_{gu}^{m(2)}(u) + \sum_{n=3}^5 C_{un,g}^m h_n \left(\frac{u}{a_u^m} \right)$$

Fazendo uso da expressão (4.8a) e das condições previamente estabelecidas (contorno,

consistência, ortogonalidade e ponderação residual), encontramos uma relação matricial da forma:

$$A \cdot J_{out} = B \cdot J_{in} + C$$

Reescrita na forma

$$J_{gur}^{+m} = A_{0gu}^m \Phi_g^m + A_{1gu}^m J_{gur}^{-m} + A_{2gu}^m J_{gul}^{+m} - A_{3gu}^m C_{u3,g}^m + A_{4gu}^m C_{u4g}^m; \quad (4.16a)$$

$$J_{gul}^{-m} = A_{0gu}^m \Phi_g^m + A_{2gu}^m J_{gur}^{-m} + A_{1gu}^m J_{gul}^{+m} + A_{3gu}^m C_{u3,g}^m + A_{4gu}^m C_{u4g}^m. \quad (4.16b)$$

Onde,

$$A_{0gu}^m = \frac{6\Delta}{(1+12\Delta)};$$

$$A_{1gu}^m = \frac{(1-48\Delta^2)}{(1+16\Delta+48\Delta^2)};$$

$$A_{2gu}^m = \frac{-8\Delta}{(1+16\Delta+48\Delta^2)};$$

$$A_{3gu}^m = \frac{1}{2} \left[\frac{\Delta}{(1+4\Delta)} \right];$$

$$A_{4gu}^m = \frac{1}{5} \left[\frac{\Delta}{(1+12\Delta)} \right] \equiv \frac{1}{30} A_{0gu}^m;$$

$$\Delta = D_g^m / a_u^m.$$

A Equação de Balanço Nodal pode ser reescrita:

$$\left(\sum_{u=x,y,z} 2 \frac{A_{0gu}^m}{a_u^m} + \Sigma_{tg}^m \right) \Phi_g^m - \sum_{g'=1}^G (\Sigma_{gg'}^m + \frac{1}{\lambda} \chi_g^m \nu \Sigma_{fg'}) \Phi_{g'}^m = \sum_{u=x,y,z} \frac{1}{a_u^m} [(1 - A_{1gu}^m - A_{2gu}^m)(J_{gul}^{+m} + J_{gur}^{-m}) - 2A_{4gu}^m C_{u4,g}^m] \quad (4.17)$$

A presença dos termos de ordens superiores, conforme esperado, incorpora-se exclusivamente ao termo de fuga. A consistência da solução fundamental é ratificada.

Observou-se que as expansões ímpares de ordens superiores estudadas não contribuíram na forma da equação de balanço final, permanecendo essa mesma equação atualizada apenas pelas contribuições das ordens pares imediatamente anteriores.

5 BENCHMARK IAEA-3D

Com o objetivo de validar a teoria desenvolvida, utilizou-se o caso referência (benchmark) clássico tridimensional proposto pela Agência Internacional de Energia Atômica. Trata-se de um reator comercial do tipo à água pressurizada (PWR), de núcleo com dimensões aproximadas de 170 cm de raio e 380 cm de altura, composto por cinco regiões distintas, apresentando simetria do tipo 1/8, tendo seções transversal e longitudinal apresentadas nas FIG. 5.1 e 5.2 respectivamente, parâmetros nucleares apresentados na TAB. 5.1, tendo vácuo por condição de contorno (condição de corrente entrante nula) e condição reflexiva para simetrias (corrente líquida nula). Foi utilizado o valor de 20 cm para as dimensões dos intervalos de malha grossa nas três direções.

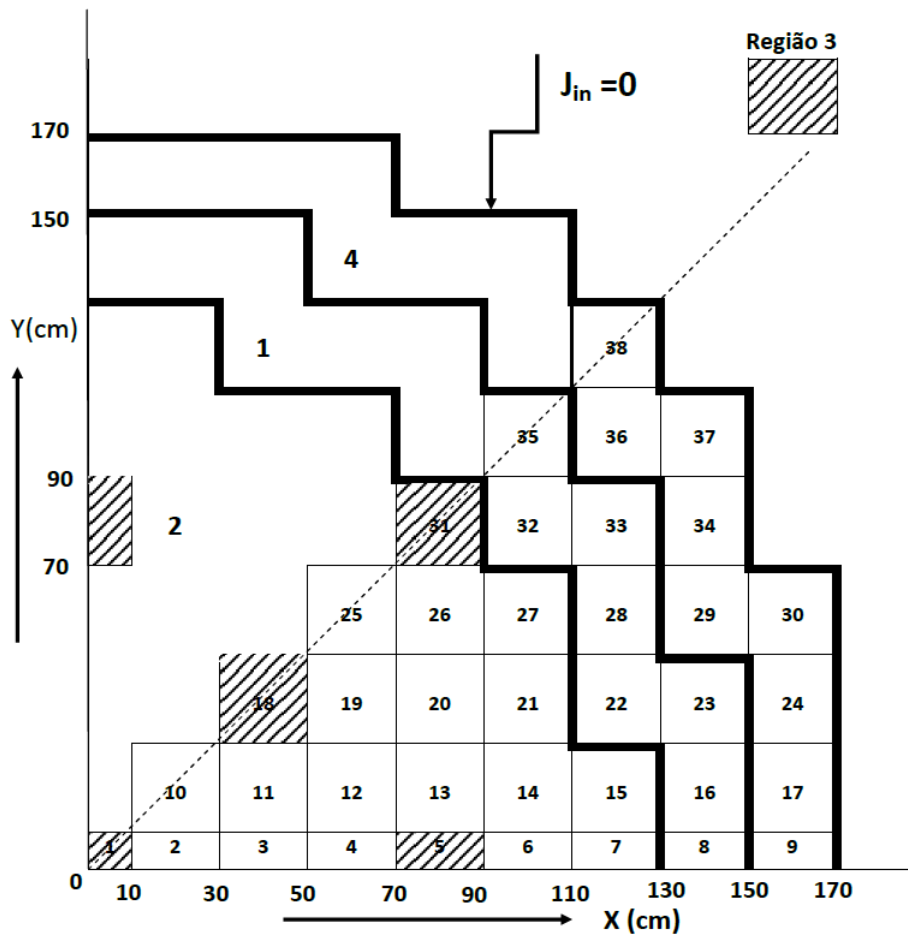


Figura 5.1: Seção transversal, $z = 190$ cm (ANL-7416, 1977).

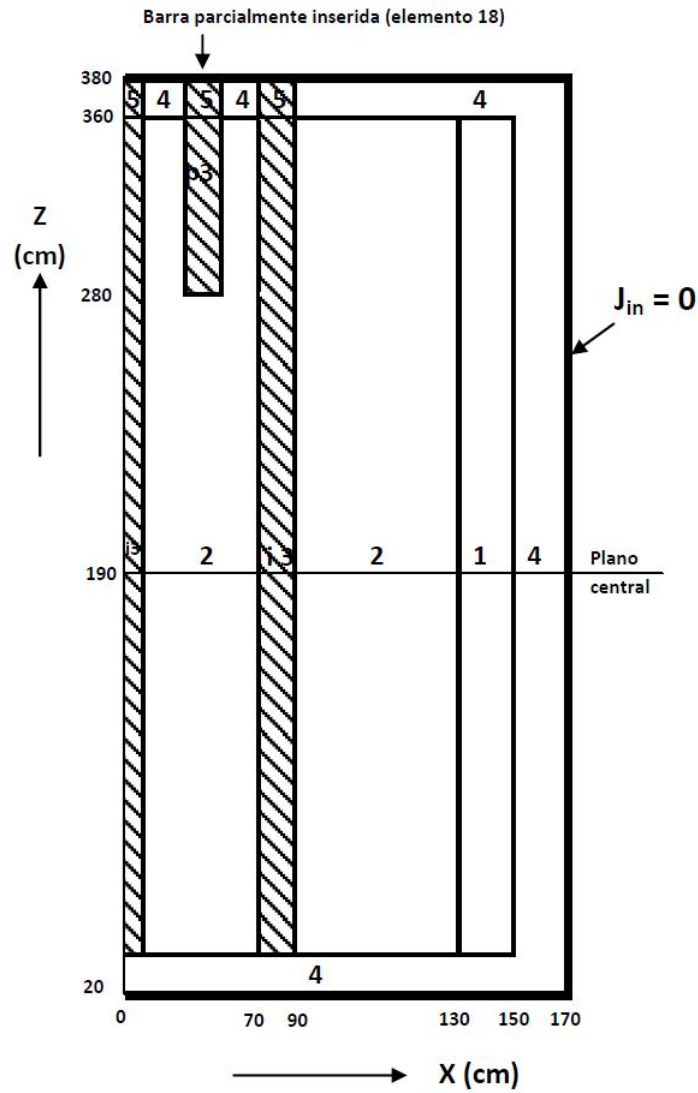


Figura 5.2: Seção longitudinal, $y = 0$ (ANL-7416, 1977).

Tabela 5.1: Dados Nucleares (ANL-7416, 1977).

Region	D_1	D_2	$\Sigma_{1 \rightarrow 2}$	Σ_{a1}	Σ_{a2}	$\nu \Sigma_{f2}$	Material
1	1.5	0.4	0.02	0.01	0.08	0.135	Fuel 1
2	1.5	0.4	0.02	0.01	0.085	0.135	Fuel 2
3	1.5	0.4	0.02	0.01	0.13	0.135	Fuel 2 + Rod
4	2.0	0.3	0.04	0	0.01	0	Reflector
5	2.0	0.3	0.04	0	0.055	0	Ref. + Rod

6 SIMULAÇÕES COMPUTACIONAIS

6.1 NEM3D-1A

Com a finalidade de testar a validade do estudo proposto, foram realizadas modificações no programa NEM3D (PAIXÃO, 2016), resultando na versão NEM3D-1A.

O programa NEM3D foi desenvolvido para simulação de casos estacionários tridimensionais a dois grupos de energia. Foi escrito em linguagem FORTRAN, por ser considerada ideal para problemas de natureza científica, devido a sua capacidade em processar operações matemáticas, por oferecer rotinas para cálculos de funções e possibilidades de manipulações de bancos de dados. De característica modular, o NEM3D apresenta por principais características: versatilidade de modificações, facilidade de verificações de erros e acompanhamento de passagem de parâmetros entre suas subrotinas. As subrotinas foram desenvolvidas com finalidades específicas, dentro da estrutura operacional necessária à execução do cálculo utilizando o método da expansão polinomial nodal.

A versão NEM3D-1A foi adaptada de modo a simular de maneira mais objetiva o caso referência proposto, oferecendo um formato de apresentação de resultados mais amigável ao usuário. Pela qualidade dos resultados obtidos, puderam ser dispensados recursos de aceleração e critérios de convergência outros que não apenas o do autovalor (k_{eff}).

6.2 PROCESSO ITERATIVO

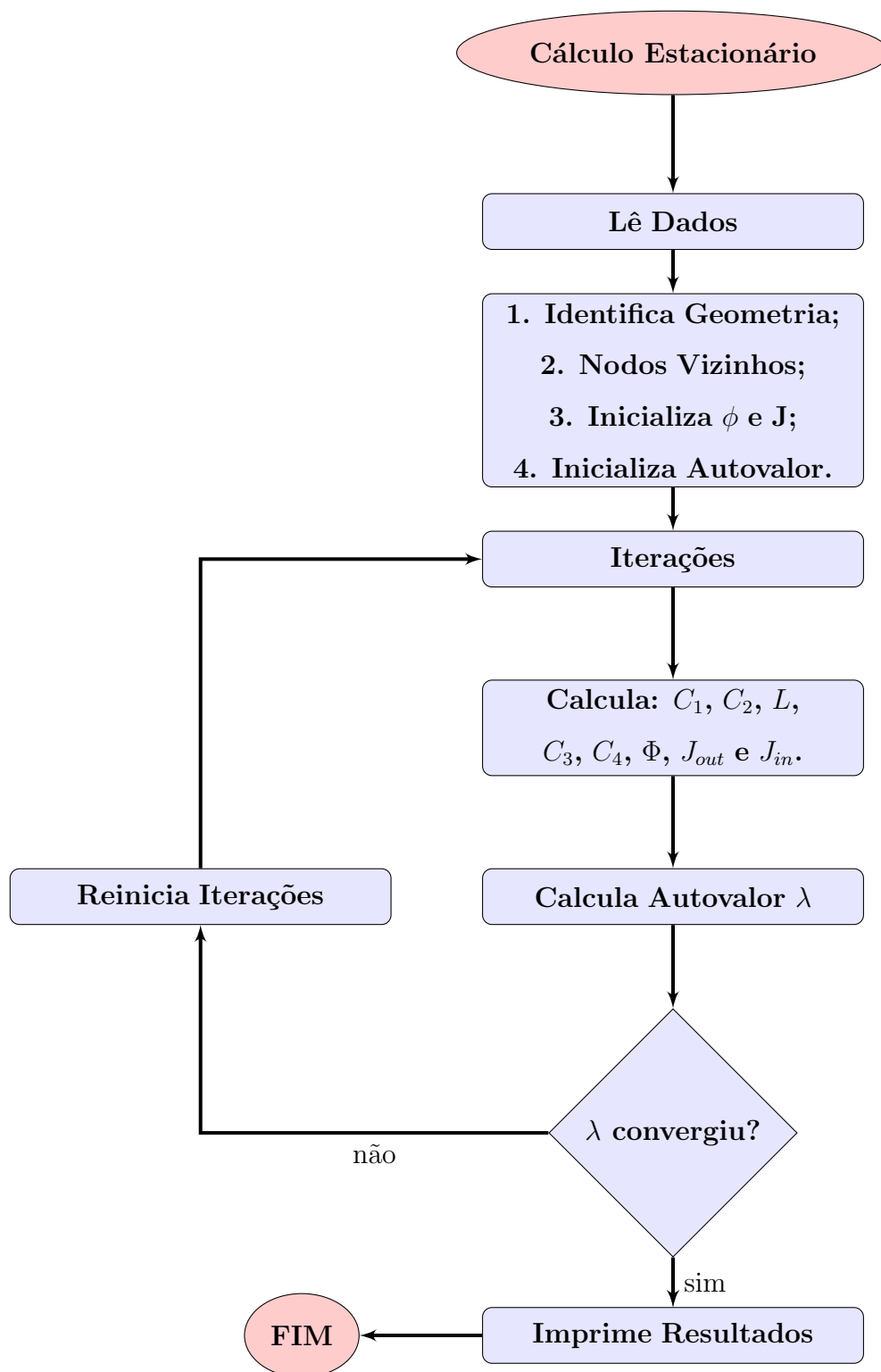
Considerando uma expansão de 4ª ordem, o processo iterativo pode ser descrito basicamente como:

1. A partir dos valores conhecidos de fluxos e correntes, calculam-se: C_1 , C_2 , L , C_3 e C_4 , para cada direção;
2. Calculam-se os fluxos: $A \cdot \Phi = B \cdot J_{in} + B_1 \cdot C_4$;
3. Calculam-se as novas correntes de saída: $J_{out} = D \cdot \Phi + E \cdot J_{in} + E_1 \cdot C_3 + E_2 \cdot C_4$;

4. Atualizam-se as novas correntes de entrada: $J_{in} = P \cdot J_{out}$;
5. Calcula-se o novo resultado para o autovalor e compara-se ao anterior. Se não convergiu dentro da tolerância esperada, retorna-se ao passo 1. Caso contrário, calcula-se a distribuição de potência em cada nodo e encerra-se o processo.

Este processo será reescrito na forma de um fluxograma apresentado no item a seguir.

6.2.1 FLUXOGRAMA



6.2.2 CRITÉRIOS DE CONVERGÊNCIA

1. Para autovalor (λ^*):

$$\epsilon_\lambda \geq \frac{|\lambda^{(n)} - \lambda^{(n-1)}|}{\lambda^{(n-1)}}$$

Onde, n - refere-se à iteração externa.

2. Para distribuição de fluxo (Φ):

$$\epsilon_p \geq \max_m \frac{|\Phi_g^{m(n)} - \Phi_g^{m(n-1)}|}{\Phi_g^{m(n-1)}}$$

Onde, m - refere-se ao nodo

n - refere-se à iteração externa

g - refere-se ao grupo em energia

$$* \lambda^{(n)} = \frac{F^{(n)}}{F^{(n-1)}} \lambda^{(n-1)}$$

$$F^{(n)} = \sum_{m=1}^M V^m \sum_{g=1}^G \nu_{\Sigma_{fg}}^m \Phi_g^m$$

6.3 RESULTADOS E COMPARAÇÕES

São apresentados resultados de simulações do programa NEM3D-1A e comparações aos valores fornecidos pelo caso referência (BENCHMARK IAEA-3D).

Nas simulações, foram utilizados os seguintes recursos computacionais:

Compilador: FORTRAN Power Station 4.0 (1995) 32bits, MicroSoft.

Computador: Dell optiplex 790, windows 7 - 32 bits

6.3.1 BENCHMARK IAEA-3D

Os valores considerados como referência da simulação do caso BENCHMARK IAEA 3D, foram gerados através da extrapolação dos resultados fornecidos pelo programa computacional VENTURE, que utiliza o método de diferenças finitas de baixas ordens, e são apresentados sob a forma de dois conjuntos: autovalor (k_{eff}) e distribuição radial (x, y) de potência nos nodos, integrada axialmente.

$$k_{eff} = 1,02903$$

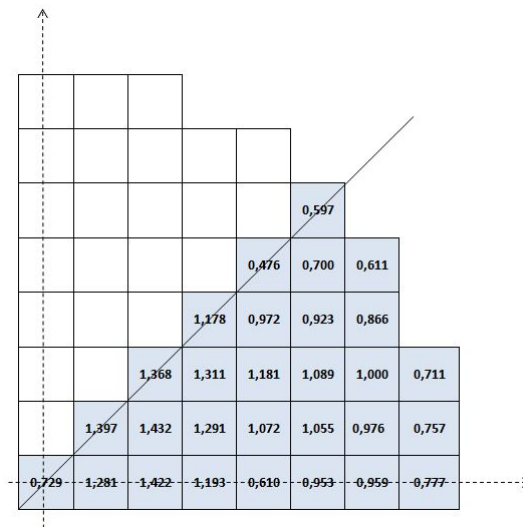


Figura 6.1: Distribuição radial média de potência, integrada axialmente, de referência

6.3.2 RESULTADOS NEM3D-1A

Apresentam-se resultados do programa NEM3D-1A para simulações utilizando distintos valores de parâmetros de malha, destacando-se maior, em vermelho, e menor, em verde, valores de desvio relativo da distribuição radial média de potência.

$$(A) a_x^m = a_y^m = a_z^m = 10cm$$

$$k_{eff} = 1,02909(0,00583\%) - t_{CPU} = 22,11s$$

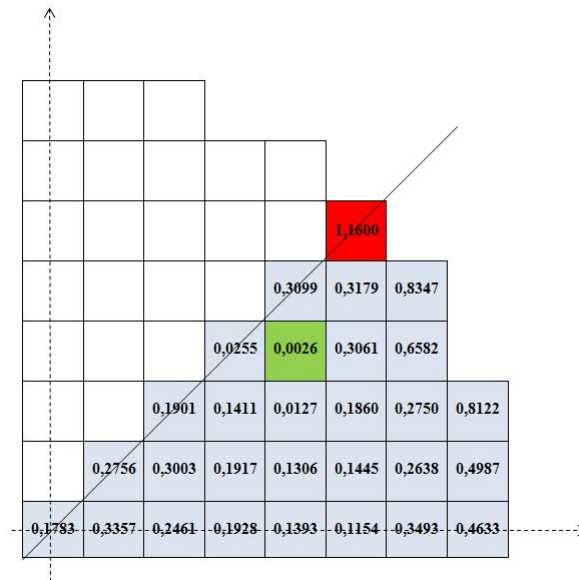


Figura 6.2: Distribuição de desvios de resultados de NEM3D-1A – 10cm x 10cm x 10cm

$$(B) a_x^m = a_y^m = 10cm, a_z^m = 20cm$$

$$k_{eff} = 1,02907(0,00389\%) - t_{CPU} = 5,79s$$

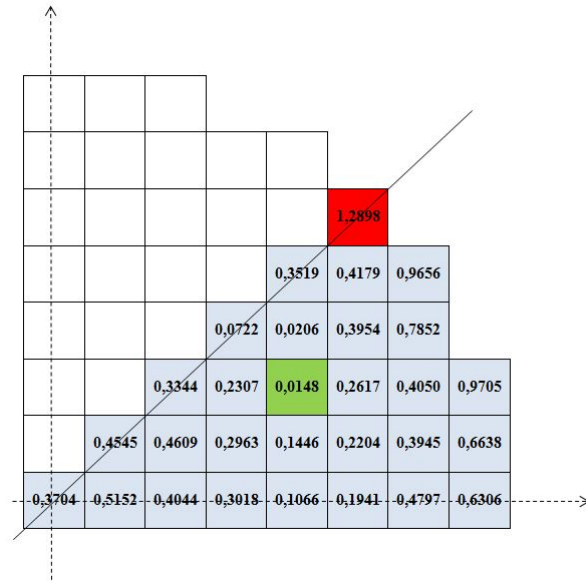


Figura 6.3: Distribuição de desvios de resultados de NEM3D-1A – 10cm x 10cm x 20cm

$$(C) a_x^m = a_y^m = 20cm, a_z^m = 2,5cm$$

$$k_{eff} = 1,02885(0,01749\%) - t_{CPU} = 13,61s$$

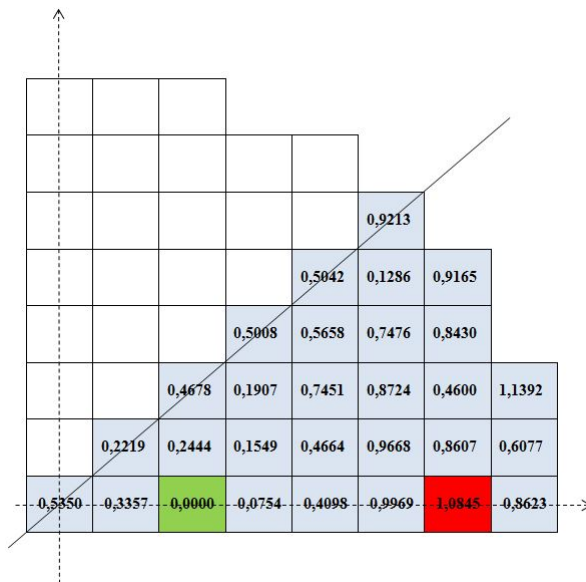


Figura 6.4: Distribuição de desvios de resultados de NEM3D-1A – 20cm x 20cm x 2,5cm

$$(D) a_x^m = a_y^m = 20cm, a_z^m = 5cm$$

$$k_{eff} = 1,02895(0,00777\%) - t_{CPU} = 5,10s$$

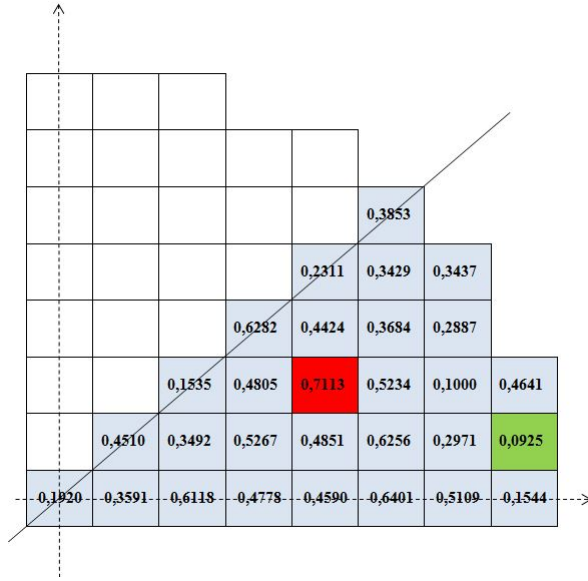


Figura 6.5: Distribuição de desvios de resultados de NEM3D-1A – 20cm x 20cm x 5cm

$$(E) a_x^m = a_y^m = 20cm, a_z^m = 10cm$$

$$k_{eff} = 1,02901(0,00194\%) - t_{CPU} = 3,30s$$

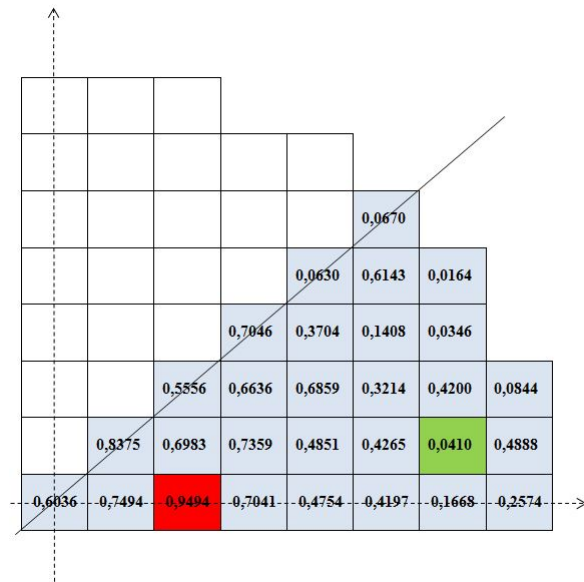


Figura 6.6: Distribuição de desvios de resultados de NEM3D-1A – 20cm x 20cm x 10cm

$$(F) a_x^m = a_y^m = a_z^m = 20cm$$

$$k_{eff} = 1,02901(0,00194\%) - t_{CPU} = 2,21s$$

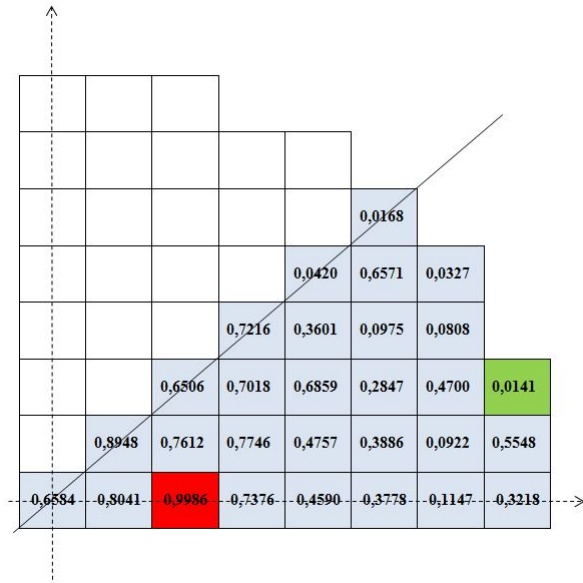


Figura 6.7: Distribuição de desvios de resultados de NEM3D-1A – 20cm x 20cm x 20cm

7 COMPARAÇÕES COM OUTROS PROGRAMAS

Apresentam-se resultados de simulações do BENCHMARK IAEA-3D fornecidos por diversos programas computacionais desenvolvidos a partir de diferentes métodos de cálculo, no intuito de verificar a qualidade do trabalho proposto, bem como um breve comentário sobre cada um deles.

7.1 PROGRAMAS COMPUTACIONAIS

VENTURE: Desenvolvido na Divisão de Reatores do Laboratório Nacional de Oak Ridge (ORNL) para cálculo da solução estacionária das equações de difusão de nêutrons na forma multigrupo, em até três dimensões, através do método de diferenças finitas de baixa ordem, com parâmetros centrados na malha. Utiliza técnicas de aceleração de convergência - 1975.

VANCER: Desenvolvido na Divisão de Reatores do ORNL a partir do programa VENTURE, utiliza o método de elementos finitos para a solução estacionária das equações de difusão de nêutrons na forma multigrupo, em duas ou três dimensões, considerando expansões lineares - 1978.

FEM 3D: Desenvolvido no Departamento de Tecnologia do Reator da Comissão de Energia Atômica da Dinamarca, utiliza o método de elementos finitos para a solução estacionária das equações de difusão de nêutrons na forma multigrupo, em duas ou três dimensões, utilizando fórmulas gerais de Lagrange para derivação dos elementos - 1975.

IQSBOX: Desenvolvido na Kraftwerk Union S.A., utiliza o método de expansão polinomial nodal combinado com técnicas de resíduos ponderados e de aceleração de convergência para as soluções estacionária e dependente do tempo das equações de difusão de nêutrons multidimensionais, para reatores do tipo moderados à água leve - 1975.

Brian Christensen: Tese de Doutorado desenvolvida na Comissão de Energia Atômica da Dinamarca, que utiliza o método da expansão polinomial nodal combinado com técnicas de resíduos ponderados e de aceleração de convergência para as soluções estacionária e

dependente do tempo das equações de difusão de nêutrons na forma multigrupo, em duas ou três dimensões - 1985.

ARROTA: Financiado pelo Instituto de Pesquisa de Energia Elétrica (EPRI), utiliza o método nodal analítico e técnicas de aceleração de convergência para as soluções estacionária e dependente do tempo das equações de difusão de nêutrons na forma multigrupo multidimensionais – 1985.

NESTLE: Desenvolvido na Universidade Estadual da Carolina do Norte (NCSSU), utiliza o método de expansão polinomial nodal, ou o de diferenças finitas, combinado a técnicas de refinamento de cálculo, para as soluções estacionária e dependente do tempo das equações de difusão de nêutrons na forma multigrupo multidimensionais, para variados tipos de reatores – 1994.

PARCS: Desenvolvido na Universidade de Purdue, utiliza os métodos de expansão polinomial nodal, nodal analítico e de diferenças finitas de altas ordens, combinado a técnicas de refinamento de cálculo, para as soluções estacionária e dependente do tempo das equações de difusão de nêutrons na forma multigrupo multidimensionais, para variados tipos de reatores – 1998.

7.2 RESULTADOS COMPARATIVOS

Apresentam-se resultados fornecidos pelos programas apresentados, publicados em literatura científica, sobre a simulação do caso referência BENCHMARK IAEA-3D.

7.3 O AUTOVALOR (k_{eff})

Apresenta-se tabela comparativa dos resultados de autovalor e desvio relativo associado.

Tabela 7.1: Comparações de resultados de k_{eff}

PROGRAMA	$a_x \cdot a_y \cdot a_z$ (cm^3)	k_{eff}	$\Delta k_{eff}(\%)$
VENTURE	Extrapolação	1,02903	-
VENTURE	10 x 10 x 10	1,02864	0,03790
VANCER	10 x 10 x 10	1,02949	0,04470
FEM-3D	10 x 10 x 10	1,02920	0,01652
IQSBOX	20 x 20 x 20	1,02911	0,00777
NEM3D-1A	20 x 20 x 20	1,02901	0,00194
Christensen	20 x 20 x 20	1,02896	0,00680
ARROTA	20 x 20 x 20	1,02899	0,00389
NESTLE	20 x 20 x 20	1,02899	0,00389
PARCS	20 x 20 x 20	1,029096	0,00641

7.4 DESVIOS MÁXIMOS E MÍNIMOS DE DISTRIBUIÇÃO DE POTÊNCIA

Apresenta-se tabela comparativa dos desvios máximo e mínimo dos resultados da distribuição radial de potência nos nodos, integrada axialmente, fornecidos pelos programas apresentados, tomando como base a distribuição apresentada no item 6.3.1.

Tabela 7.2: Desvios máximos e mínimos para a distribuição de potência radial.

PROGRAMA	DESVIO MÁX.		DESVIO MIN.	
	$\Delta P_{x,y}(\%)$	(x, y) cm	$\Delta P_{x,y}(\%)$	(x, y)
VENTURE	13,6	(140; 40)	0,24	(100; 20)
VANCER	9,93	(120; 80)	0,38	(100; 40)
FEM-3D	4,11	(140; 40)	0,11	(100; 20)
IQSBOX	0,56	(140; 40)	0,00	(100;0), (60, 80; 20), (60, 80; 40), (80, 120; 60), (120;80)
NEM3D-1A	1,00	(40; 0)	0,01	(140; 40)
Christensen	1,88	(140; 20)	0,02	(80; 20)
ARROTA	0,98	(120; 80)	0,00	(80; 0), (60; 40), (60, 80; 60), (80; 80)
NESTLE	1,17	(120; 100)	0,00	(80; 0)
PARCS	0,79	(120; 100)	0,02	(100; 40)

8 CONCLUSÕES E SUGESTÕES

8.1 CONCLUSÕES

Conforme os resultados apresentados, conclui-se que o trabalho proposto obteve êxito e que o método da expansão polinomial nodal (NEM) é uma ferramenta de importância para cálculos de malha grossa em reatores do tipo moderados com água leve (LWR). As características do método permitem programação estruturada e implementação em computadores do tipo pessoal.

Apesar da modularidade e versatilidade estrutural de NEM3D-1A, trata-se de uma programação de difícil visualização no que concerne ao empilhamento e identificação dos nodos, associação das propriedades materiais e das variáveis a serem calculadas em cada um deles. Para isso, se faz necessário conhecimento detalhado do método e compreensão de cada etapa da programação.

A observação das distribuições de desvios dos resultados de potência média radial nodal fornecidos pelos diversos programas, sugere indicar que a tendência não alinhada dos resultados do NEM3D-1A possa ser devido a não utilização de critério de convergência para os fluxos ou de técnica de refinamento para essas variáveis.

De forma geral, os testes realizados com o programa NEM3D-1A indicaram estabilidade e convergência do método para a solução esperada.

8.2 SUGESTÕES

Prevendo-se a continuidade dos estudos utilizando métodos de malha grossa, em particular o método da expansão polinomial nodal, sugere-se:

- Incorporação de critérios de convergência de fluxo e de técnicas de aceleração de convergência;
- Verificação da possibilidade de emprego do método em malhas finas;

- Expansão do programa NEM3D a forma multigrupo;
- Incorporação do cálculo bidimensional multigrupo ao programa;
- Incorporação de dependência temporal e efeitos de realimentação;
- Estudo de técnicas necessárias à reconstrução de fluxos pino a pino;
- Desenvolvimento do NEM adjunto.

9 REFERÊNCIAS BIBLIOGRÁFICAS

- ARGONE NATIONAL LABORATORY-7416 Supplement 2. **Mathematics and Computers, ARGONNE CODE CENTER: BENCHMARK PROBLEM BOOK**. 1977. (Revised), p.277-436.
- AZMY, Y. and SARTORI, E. **Nuclear Computational Science – A Century in Review**. Springer, 2010.
- CHRISTENSEN, Brian. **Three-Dimensional Static and Dynamic Reactor Calculations by the Nodal Expansion Method**. 1985. 206p. Ph.D. Thesis, RISØ National Laboratory, Denmark, 1985.
- CLARK Jr, M. and HANSEN, K. F. **Numerical Methods for Reactor Analysis**, Academic Press, New York, 1964
- DORNING, J. J. **Modern Coarse Methods – A Development of the 10's Proc. Conf. Computational Methods in Nuclear Engineering**. Williamsburg, Virginia, 23-25 April. American Nuclear Society.
- DOS SANTOS, Jairo Fernando Junqueira. **Uma Solução das Equações de Difusão Dependentes do Tempo Utilizando o Método de Expansão Polinomial Nodal**. Dissertação (Mestrado em Engenharia Nuclear) - Instituto Militar de Engenharia, Rio de Janeiro, 1991.
- DOWNAR, T. J., LEE, D. XU, W., KOZLOWSKI, T. **PARCS: Purdue Advanced Reactor Core Simulator**. International Conference on the New Frontiers of Nuclear Technology: Reactor Physics, Safety and High-Performance Computing, PHYSOR 2002, Seoul, Korea, 2002.
- DUDERSTADT, J. J., HAMILTON, L. J. **Nuclear Reactor Analysis**, John Wiley & Sons, 1976.
- EISENHART, L. D., EICH, W. J., and MOSTELLER, R.D. **Static Three-Dimensional ARROTA Benchmarking**. Trans. Am. Nucl. Soc., 50, 540, November 1985.
- FINNEMANN, H. **A Consistent Nodal Method for the Analysis of Space-Time Effects in Large LWR's**. MRR 145, p. 131, Proceedings of the Joint NEACRP/CSNI Specialists' Meeting on New Developments in Three-Dimensional Neutron Kinetics and Reviews of Kinetics Benchmark Calculations, Garching, Germany, 22nd-24th January 1975.
- FINNEMANN, H., BENNEWITZ, F., WAGNER, M. R. **Interface Current Techniques for Multidimensional Reactor Calculations**. Atomkenergie, Vol. 30, No. 2, p.123, 1977.

- GRANDIN, H., **Fundamentals of the Finite Element Method**, Waveland Press, 1991.
- HENRY, A. F. **Nuclear-Reactor Analysis**. The M.I.T. Press, 1975.
- KAPLAN, S. **Synthesis Methods in Reactor Analysis**. Advan. Nucl. Sci. Technology 3, 233, 1965
- LAWRENCE, R. D. **Progress in Nodal Methods for the Solution of the Neutron Diffusion and Transport Equations**. Prog. Nucl. Energy, 17, 271, 1986.
- MISFELDT, I. **Solution of the multigroup neutron diffusion equation by finite element method**. RISØ-M-1809, 1975.
- MOSTELLER, R. D. **Validation of NESTLE Against Static Reactor Benchmark Problems**. Trans. Am. Nucl. Soc., 73, 310, November 1995.
- PAIXÃO S. B. **Método da Expansão Polinomial Nodal – Notas pessoais**. SE7/IME (2016).
- PAIXÃO, S. B. **Métodos de Cálculo Multidimensionais**. In VI CGEN – Congresso Geral de Energia Nuclear Rio de Janeiro, RJ, 1996.
- SMITH, K. S. **An Analytic Nodal Method for Solving the Two-Group, Multidimensional, Static and Transient Neutron Diffusion Equations**. N. E. and M. Sc. Thesis, Massachusetts Institute of Technology, March 1979.
- TURINSKY, P. J., AL-CHALABI, R. M. K., ENGRAND, P., SARSOUR, H. N., FAURE, F. X., GUO, W. **NESTLE: A Few-Group Neutron Diffusion Equation Solver Utilizing the Nodal Expansion Method for Eigenvalue, Adjoint, Fixed Source Steady-State and Transient Problems**. EGG-NRE-11406, EG&G Idaho, 1994.
- VONDY, D. R. FOWLER, T. B., CUNNINGHAM, G. W. **VENTURE: A Code Block for Solving Multigroup Neutronics Problems Applying the Finite-Difference Diffusion-Theory Approximation to Neutron Transport**. ORNL-5062, October 1975.
- VONDY, D. R., FOWLER, T. B. **Test of the Diffusion Theory Difference in Slab Geometry (Computer Code VANCER)**. ORNL-5381, Jun. 1978.

10 APÊNDICES

10.1 APÊNDICE 1: MÉTODO DOS RESÍDUOS PONDERADOS

Constitui-se em formulação para a obtenção de soluções aproximadas, mas suficientemente precisas, de um problema de valor de contorno (PVC). Matematicamente, de uma forma geral, pode ser entendida como a integração ponderada da própria equação diferencial representativa do problema.

O Método dos Resíduos Ponderados estabelece uma condição natural para a obtenção de soluções aproximadas de vários problemas de engenharia, utilizando diretamente a equação diferencial (forma forte) do problema a ser resolvido.

Sua aplicação, no início, manteve-se restrita a problemas relativamente simples em virtude da dificuldade de se obter funções aproximadas em todo o domínio. No entanto, essa dificuldade passou a ser superada com técnicas de geração da aproximação mediante divisão do domínio de integração.

Para conceituar melhor o método, considere a equação diferencial representativa do balanço nodal:

$$-D_g^m \frac{d^2 \psi_{gu}^m}{du^2} + \Sigma_{tg}^m \psi_{gu}^m = \Sigma_{g'=1}^G \left[\left(\Sigma_{g'g}^m + \frac{1}{\lambda} \chi_g^m \nu \Sigma_{fg'}^m \right) \psi_{g'u}^m \right] - L_{gu}^m(u)$$

Que pode ser reescrita na forma compacta

$$A(\psi_{gu}^m(u)) = f$$

Onde, $f = -L_{gu}^m(u)$

A representa um operador diferencial que atua sobre a variável $\psi_{gu}^m(u)$ (nossa solução “exata”), a componente homogênea da solução, responsável também por gerar todas as inter-relações necessárias entre as variáveis fundamentais do problema (Φ_g^m e $J_{gus}^{\pm m}$).

No estudo proposto, foi definido que o fluxo médio transversal poderia ser representado por uma solução aproximativa, traduzida em expansão de funções polinomiais completas pertencentes a uma mesma família:

$$\psi_{gu}^m(u) \cong \psi_{gu}^{m(N)}(u) = \Phi_g^m + C_{un,g}^m \cdot h_n(u), n = 1, \dots, N$$

Uma vez que a aproximação $\psi_{gu}^{m(N)}$ não é a solução exata (ψ_{gu}^m) pode-se definir o “resíduo” da aproximação como:

$$A(\psi_{gu}^{m(N)}(u)) \neq f \Rightarrow R(u) = A(\psi_{gu}^{m(N)}(u)) - f \neq 0$$

O Método dos Resíduos Ponderados estabelece que os coeficientes $C_{un,g}^m$, que constam na função aproximativa, sejam determinados mediante a condição de anulação do resíduo em forma ponderada no domínio da solução. Essa condição pode ser expressa:

$$\int_{\Omega} w(\Omega) \cdot R(\Omega) d\Omega = 0$$

Onde $w(\Omega)$ é uma função homogênea nas condições de contorno essenciais em todo o domínio Ω do problema.

Logo, essa mesma integral pode ser reescrita:

$$\int_0^1 w(v) \cdot R(v) dv = 0 \Rightarrow \int_0^1 w(v) \cdot [A(\psi_{gv}^{m(N)}(v)) + L_{gv}^m(v)] dv = 0$$

Que permitirá encontrar os coeficientes associados à expansão aproximativa $\psi_{gv}^{m(N)}(v)$, devidamente gerada de modos a minimizar as distorções (resíduos) da componente não homogênea da solução.

Existem quatro principais categorias das funções de peso utilizadas como ponderadores:

- Método dos Subdomínios;
- Método da Colocação;
- Método dos Mínimos Quadrados;
- Método de Galerkin.

No presente trabalho foram utilizados os pesos Galerkin e Momento, os quais serão abordados.

10.1.1 MÉTODO DE GALERKIN

O Método de Galerkin tornou-se um dos mais conhecidos e potentes dos Métodos de Resíduos Ponderados em virtude do advento e rápido desenvolvimento dos computadores e de sua utilização na geração do Método dos Elementos Finitos, que introduziu uma forma engenhosa de construção de funções de aproximação.

Basicamente, o Método de Galerkin propõe que as funções peso $w(v)$ sejam escolhidas as mesmas que as funções de base da solução aproximativa $h_n(v)$.

10.1.2 MÉTODO DOS MOMENTOS

Entende-se como uma variação do Método de Galerkin, onde $w_n(v) = h_{n-2}(v)$.

10.2 APÊNDICE 2: FUNÇÕES DE BASE E SUAS RELAÇÕES

Apresentam-se as funções polinomiais utilizadas no presente estudo, suas representações gráficas, bem como os resultados dos testes de ortogonalidade entre essas funções e segundas derivadas.

$$h_0(v) = 1;$$

$$h_1(v) = v - \frac{1}{2};$$

$$h_2(v) = v(1 - v) - \frac{1}{6};$$

$$h_3(v) = v(1 - v) \left(v - \frac{1}{2} \right);$$

$$h_4(v) = v(1 - v) \left(v^2 - v + \frac{1}{5} \right);$$

$$h_5(v) = v(1 - v) \left(v - \frac{1}{2} \right) \left(v^2 - v + \frac{1}{6} \right).$$

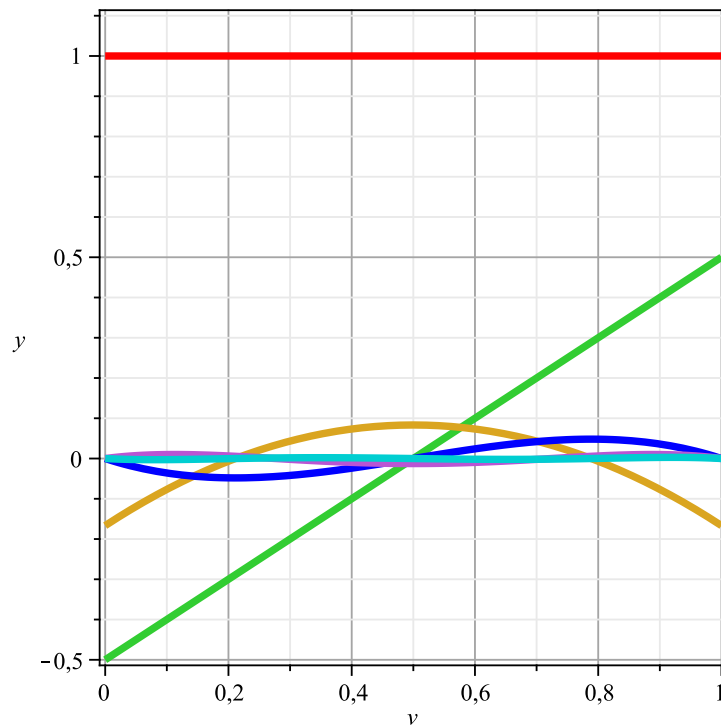


Figura 10.1: Polinômios - Função de forma.

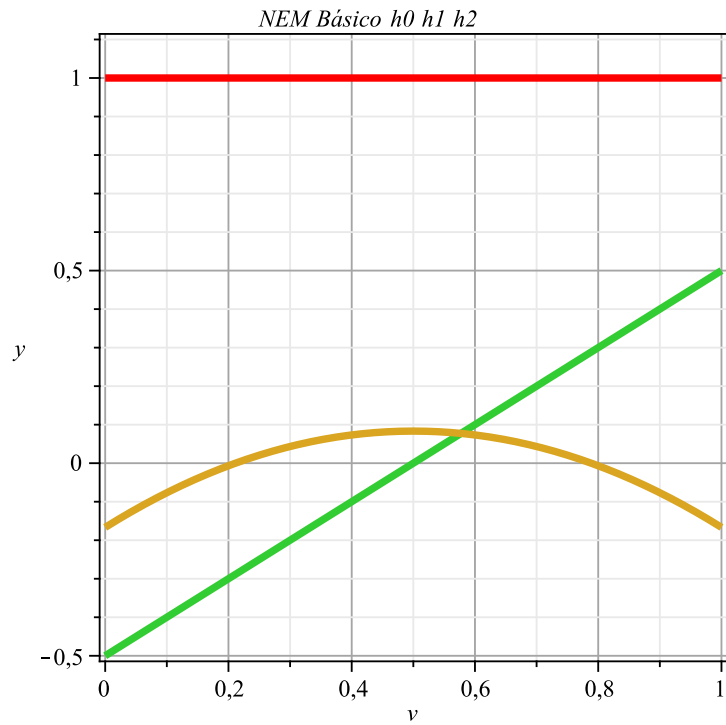


Figura 10.2: Polinômios básicos - Função de forma.

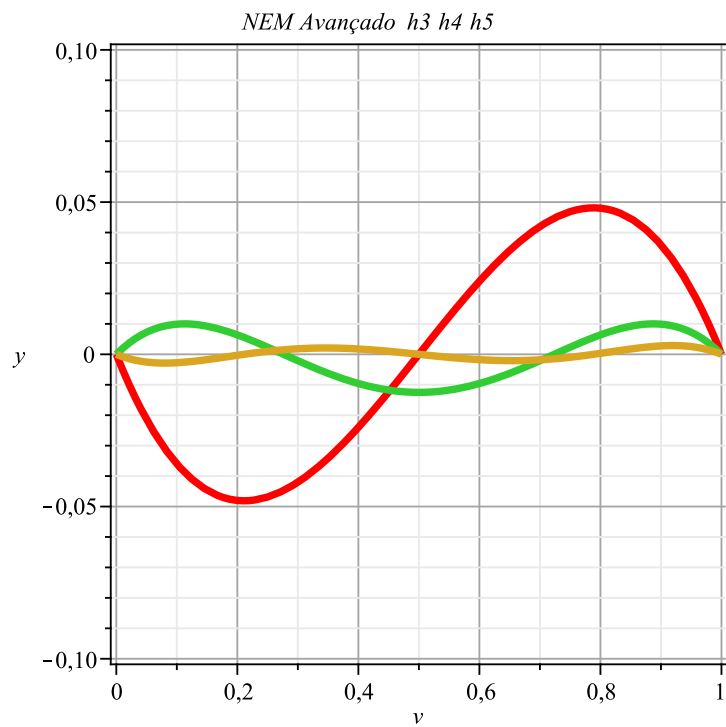


Figura 10.3: Polinômios de ordens superiores - Função de forma.

$$\int_0^1 h_N(v) \cdot h_M(v) dv$$

M \ N	0	1	2	3	4	5
0	1	0	0	0	0	0
1	0	1/12	0	1/120	0	1/5040
2	0	0	1/180	0	-1/2100	0
3	0	1/120	0	1/840	0	0
4	0	0	-1/2100	0	1/15750	0
5	0	1/5040	0	0	0	1/332640

Figura 10.4: Ortogonalidade entre polônômios.

$$\int_0^1 h_N(v) \cdot h'_M(v) dv$$

M \ N	0	1	2	3	4	5
0	0	0	-2	0	-2/5	0
1	0	0	0	-1/2	0	-1/12
2	0	0	0	0	1/15	0
3	0	0	0	-1/20	0	-1/840
4	0	0	0	0	-1/175	0
5	0	0	0	-1/840	0	-1/1680

Figura 10.5: Ortogonalidade entre polinômios e segundas derivadas.