



MÉTODO NODAL SEMI-ANALÍTICO PARA A SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES NODAIS DA DIFUSÃO INTEGRADAS TRANSVERSALMENTE

Rafael Luiz Maciel Rocha

Dissertação de Mestrado apresentada ao Programa de Pós-graduação em Engenharia Nuclear, COPPE, da Universidade Federal do Rio de Janeiro, como parte dos requisitos necessários à obtenção do título de Mestre em Engenharia Nuclear.

Orientadores: Fernando Carvalho da Silva

Aquilino Senra Martinez

Rio de Janeiro

Março de 2012

MÉTODO NODAL SEMI-ANALÍTICO PARA A SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES NODAIS
DA DIFUSÃO INTEGRADAS TRANSVERSALMENTE

Rafael Luiz Maciel Rocha

DISSERTAÇÃO SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DO INSTITUTO ALBERTO
LUIZ COIMBRA DE PÓS-GRADUAÇÃO E PESQUISA DE ENGENHARIA (COPPE)
DA UNIVERSIDADE FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS
REQUISITOS NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE MESTRE EM
CIÊNCIAS EM ENGENHARIA NUCLEAR.

Examinada por:

Prof. Fernando Carvalho da Silva, D.Sc.

Prof. Aquilino Senra Martinez, D.Sc.

Prof. Hermes Alves Filho, D.Sc.

Prof. Ricardo Carvalho de Barros, Ph.D.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

MARÇO DE 2012

Maciel Rocha, Rafael Luiz

Método Nodal Semi-Analítico para a Solução das Equações Nodais da Difusão Integradas Transversalmente/ Rafael Luiz Maciel Rocha. – Rio de Janeiro: UFRJ/COPPE, 2012.

X, 70 p.: il.; 29,7 cm.

Orientadores: Fernando Carvalho da Silva

Aquilino Senra Martinez

Dissertação (mestrado) – UFRJ/ COPPE/ Programa de Engenharia Nuclear, 2012.

Referências Bibliográficas: p. 69-70.

1. Métodos de Nodais de Malha Grossa. 2. Método de Expansão Nodal. 3. Equação da Difusão Integrada Transversalmente. I. Silva, Fernando Carvalho da, *et al.* II. Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE, Programa de Engenharia Nuclear. III. Título.

Dedicatória

Dedico esta dissertação a meus pais e à memória de Marcelo Pimenta Bello.

Agradecimentos

Agradeço a Deus por me dar saúde e garra, me permitindo encarar a difícil jornada da vida;

Agradeço de forma muito carinhosa e amorosa a meus pais, Célio Fernando Maciel Rocha e Deiser Xavier Rocha, pelo incondicional apoio em toda e qualquer fase de minha vida, sempre depositando confiança e amor para tornar mais leve o difícil caminhar nas estradas da vida;

Agradeço ao grande e eterno amigo Marcelo Pimenta Bello que, em vida, teve papel primordial na continuidade de meus estudos e êxito profissional durante e após a graduação;

Ao encorajador e amigo Professor Paulo Israel Trajtenberg que, em vida, nunca deixou de acreditar que, com garra e determinação, eu conseguiria atingir meus objetivos estudantis ao longo da vida;

Agradeço à minha amada namorada, Gabriela Gomes, que me apoia e se mostra paciente e encorajadora para meus estudos desde o momento em que nos conhecemos;

Agradeço aos professores do PEN/COPPE/UFRJ e, em especial, aos meus orientadores Professores Fernando Carvalho da Silva e Aquilino Senra Martinez, pelos valiosos ensinamentos possibilitados por uma vasta experiência e pela paciência e dedicação na orientação deste trabalho de dissertação;

Agradeço aos amigos conquistados para toda a vida Fabiano Prata, Daniela Maiolino, Wanderson Pereira, Samuel Queiroz e Daniel Scal pelo apoio e companheirismo demonstrados ao longo desse curso de mestrado;

Agradeço aos funcionários do PEN/COPPE/UFRJ pela exemplar dedicação aos alunos, pelo carinho e pela amizade cultivados com cada um ao longo desse curso.

Resumo da Dissertação apresentada à COPPE/UFRJ como parte dos requisitos necessários para a obtenção do grau de Mestre em Ciências (M.Sc.)

MÉTODO NODAL SEMI-ANALÍTICO PARA A SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES NODAIS DA DIFUSÃO INTEGRADAS TRANSVERSALMENTE

Rafael Luiz Maciel Rocha

Março/2012

Orientadores: Fernando Carvalho da Silva

Aquilino Senra Martinez

Programa: Engenharia Nuclear

Este trabalho usa o método nodal semi-analítico para resolver as equações nodais da difusão de nêutrons integradas transversalmente. Este método aproxima o termo de fonte desta equação (fissão e espalhamento) por uma expansão polinomial de quarta ordem, a qual usa as mesmas funções de base do Método de Expansão Nodal (NEM). Esta aproximação permite uma solução analítica (equação diferencial de segunda ordem não-homogênea) para o fluxo escalar médio nas superfícies do nodo. Os coeficientes da parte homogênea da solução são obtidos através da aplicação das condições de contorno, enquanto que os coeficientes da parte particular são obtidos através da condição de consistência para o termo independente e uma técnica de resíduos ponderados para os demais coeficientes. Os coeficientes da expansão, que aproxima o termo de fonte, são obtidos pela condição de consistência para o termo independente, aplicação das condições de contorno para os coeficientes de primeira e segunda ordens e três diferentes formas para os coeficientes de terceira e quarta ordem, que são: a aplicação das condições de contorno nas derivadas da expansão polinomial, uma técnica de resíduos ponderados e o uso dos coeficientes do NEM para obter todos os coeficientes dessa expansão. Após o cálculo de todos os coeficientes é implementado um esquema iterativo para os cálculos globais de dois tipos de núcleo de reator PWR e os resultados são comparados com os resultados gerados pelo NEM tradicional.

Abstract of dissertation presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Master of Science (M.Sc.)

SEMI-ANALYTIC NODAL METHOD FOR THE SOLUTION OF THE TRANSVERSE INTEGRATED DIFFUSION NODAL EQUATIONS

Rafael Luiz Maciel Rocha

March/2012

Advisors: Fernando Carvalho da Silva

Aquilino Senra Martinez

Department: Nuclear Engineering

This work uses the semi-analytic nodal method to solve the transverse-integrated nodal diffusion equations. This method approximates the source terms (fission and scattering) by a fourth-order polynomial expansion which uses the same base functions as the Nodal Expansion Method (NEM). This approximation allows an analytic solution (non-homogeneous second order differential equation) to node-surface average scalar fluxes. The coefficients of the homogeneous part of the solution are obtained by the application of the boundary conditions while the coefficients of the particular part are obtained by the consistency condition to the independent term and a weighted residual technique for the others coefficients. The coefficients of the expansion which approximates the source terms are obtained by the consistency condition to the independent term, application of the boundary conditions to the first and second order coefficients and three different ways to the third and fourth order terms which are: the application of the boundary conditions on the derivative of the polynomial expansion, a weighted residual technique and the use of the coefficients of NEM to obtain all the coefficients of this expansion. After the calculation of all coefficients, an iterative scheme is implemented for global calculations of two types of PWR core reactors and the results are compared with the results obtained by the traditional NEM.

ÍNDICE

1 Introdução	1
1.1 – Métodos de Malha Grossa	2
1.1.1 Métodos de Diferenças Finitas de Malha Grossa.....	3
1.1.2 Métodos de Elementos Finitos.....	5
1.1.3 Método Nodal Analítico.....	6
1.1.4 Método de Expansão Nodal (NEM)	7
1.2 Objetivo do Trabalho.....	7
2 Método de Expansão Nodal (NEM)	10
2.1 Equação de Balanço Nodal.....	10
2.2 Equação da Difusão de Nêutrons Integrada Transversalmente.....	13
2.3 Coeficientes da Fuga Transversal.....	15
2.4 Coeficientes Primários	17
2.5 Coeficientes Secundários	18
2.6 Correntes Parciais de Saída	20
2.7 Cálculo do Fluxo Médio Nodal	22
3 Esquema Iterativo do NEM	23
3.1 Varredura do NEM	24
3.2 Cálculo do Fator de Multiplicação	25
3.3 Critérios de Convergência.....	26
4 Método Nodal Semi-Analítico	27
4.1 Solução Analítica para a Equação da Difusão de Nêutrons Integrada Transversalmente segundo o Método Nodal Semi-Analítico	28

4.1.1 Cálculo dos coeficientes da solução de $\bar{\Psi}_{gu}^n(\mathbf{u})$	29
4.2 Coeficientes da expansão polinomial de $Q_{gu}^n(\mathbf{u})$	34
4.2.1 Coeficientes de graus zero, um e dois	34
4.2.2 Cálculo de Q_{3gu}^n e Q_{4gu}^n utilizando as Derivadas da expansão polinomial nas faces dos nodos.....	36
4.2.3 Aplicação da Técnica de Resíduos Ponderados para o cálculo de Q_{3gu}^n e Q_{4gu}^n	37
4.2.4 Utilização dos Coeficientes do NEM para o cálculo dos coeficientes de $Q_{gu}^n(\mathbf{u})$	40
4.3 Cálculo das Correntes Parciais de Saída.....	41
4.4 Cálculo do Fluxo Médio Nodal pelo Método Nodal Semi-Analítico	45
5 Esquema Iterativo do Método Nodal Semi-Analítico	47
5.1 Varredura do Método Nodal Semi-Analítico.....	47
6 Apresentação e Análise de Resultados	50
6.1 Reator PWR (IAEA)	50
6.1.1 Resultados gerados com o NEM para o Reator IAEA.....	53
6.1.2 Resultados para o Reator IAEA com a Aplicação das Derivadas no cálculo dos coeficientes de terceiro e quarto grau de $Q_{gu}^n(\mathbf{u})$	54
6.1.3 Resultados para o Reator IAEA com o uso da Técnica de Resíduos Ponderados no cálculo dos coeficientes de terceiro e quarto grau de $Q_{gu}^n(\mathbf{u})$..	55
6.1.4 Resultados para o IAEA utilizando os Coeficientes do NEM no cálculo dos coeficientes de $Q_{gu}^n(\mathbf{u})$	56
6.1.5 Análise dos resultados obtidos para o Reator IAEA.....	57
6.2 Reator LMW	59
6.2.1 Resultados gerados com o NEM para o LMW	60
6.2.2 Resultados para o LMW com a Aplicação das Derivadas no cálculo dos coeficientes de terceiro e quarto grau da expansão de $Q_{gu}^n(\mathbf{u})$	62

6.2.3 Resultados gerados para o LMW com a Aplicação da Técnica de Resíduos Ponderados no cálculo dos coeficientes de terceiro e quarto grau da expansão de $Q_{gu}^n(u)$	63
6.2.4 Resultados gerados para o LMW com o uso dos Coeficientes do NEM no cálculo dos coeficientes da expansão de $Q_{gu}^n(u)$	64
6.2.5 Análise dos resultados obtidos para o reator LMW	65
7 Conclusões e Sugestões para Estudos Futuros.....	67
8 Referências Bibliográficas.....	69

1 Introdução

A energia gerada no núcleo de um reator nuclear é fruto das reações de fissão em cadeia (Duderstadt, Hamilton, 1976), onde os nêutrons são de extrema importância, uma vez que eles são os responsáveis pela manutenção dessas reações. Neste sentido, para a operação de um reator nuclear de forma segura e eficiente, é primordial que a população de nêutrons e seu comportamento de migração no interior do núcleo do reator sejam monitorados de maneira confiável.

Uma modelagem física que descreve bem a migração dos nêutrons, levando em consideração as probabilidades de ocorrência de diferentes reações com os diversos materiais no interior do reator, é feita com base na teoria da difusão de nêutrons (Duderstadt, Hamilton, 1976). Esse modelo é representado matematicamente pela equação da difusão, a qual descreve o balanço entre a produção e a perda de nêutrons em função das interações nêutron-nucleares no interior do núcleo do reator. Dentre essas interações estão as que promovem as reações de fissão, que irão liberar mais nêutrons, gerando as reações em cadeia, assim como aquelas que promovem as perdas de nêutrons que poderiam gerar fissões, como no caso das reações de captura radiativa e espalhamento, por exemplo.

No núcleo de um reator nuclear, a heterogeneidade da composição material é muito complexa. Por isso, resolver a equação da difusão de nêutrons de forma analítica torna-se impraticável. Com isso, busca-se a construção de um método de solução numérica, que possa reduzir a complexidade dos cálculos e que seja capaz de prever, de forma confiável, o comportamento do núcleo do reator. Além disso, espera-se que tal método se mostre eficiente a ponto de ser aplicado, tanto no projeto de construção do núcleo do reator, quanto nas estratégias de recarga de combustível e no acompanhamento da operação. Neste sentido, foram desenvolvidos diversos

métodos, nos quais os parâmetros nucleares do reator são homogeneizados através de cálculos para que o domínio do reator possa ser dividido em malhas de discretização espacial, nas quais tais parâmetros podem ser considerados uniformes. As limitações para a aplicabilidade desses métodos estão no tempo computacional gasto nos cálculos e na precisão dos resultados. Com isso, se torna primordial a busca pela homogeneização de parâmetros em malhas cada vez maiores, ou seja, com dimensões comparáveis às dimensões de um elemento combustível, por exemplo, e, além disso, a criação de métodos capazes de realizar os cálculos para estas grandes malhas de forma rápida e precisa. Muitos estudos vêm sendo desenvolvidos, aprimorando métodos existentes e criando novos métodos de solução da equação da difusão de nêutrons e, dentre eles, podem ser citados os métodos nodais (Finneman, et. al, 1977), os quais são amplamente estudados e aplicados nos cálculos de Física de Reatores.

1.1 – Métodos de Malha Grossa

Os métodos de malha grossa baseiam-se na discretização espacial do núcleo do reator em subdivisões de dimensões grandes (que podem ser da ordem de um elemento combustível, por exemplo), onde os parâmetros nucleares podem ser considerados uniformes. Isso torna possível a realização dos cálculos para o caso de um reator de dimensões reais. Porém, tal aplicação requer que esses métodos sejam precisos e eficientes computacionalmente, o que faz com que diversos deles sejam desenvolvidos e aprimorados. Dentre eles podem ser citados os métodos de diferenças finitas de malha grossa, método de elementos finitos, o método nodal analítico (ANM) e o método de expansão nodal (NEM).

1.1.1 Métodos de Diferenças Finitas de Malha Grossa

O método de diferenças finitas (Alvim, 2007) foi um dos primeiros a serem utilizados para a solução numérica da equação da difusão de nêutrons. Este método consiste em dividir o núcleo do reator em várias malhas finas e, a partir daí, resolver a equação da difusão discretizada para essas malhas através da aplicação da aproximação por diferenças finitas no operador diferencial. Isso acarreta, para o tratamento tridimensional da geometria do reator, na formação de uma matriz heptadiagonal para o sistema de equações gerado pela utilização deste método na solução da equação da difusão (Guimarães, et. all, 2008). Esse sistema pode ser resolvido iterativamente por técnicas bem difundidas de processo iterativo, incluindo diferentes métodos de aceleração como o método de Wielandt, Chebyshev, etc. (Alvim, 2007).

As vantagens do método de diferenças finitas são sua flexibilidade no que diz respeito aos variados tipos, geometrias e propriedades do reator e, além disso, sua teoria é bem fundamentada e conhecida. As soluções convergem para a solução exata do problema real, ou seja, com domínio contínuo (sem as discretizações espaciais), à medida que são definidas malhas cada vez menores. Com isso, é possível a obtenção de resultados com altíssima precisão, embora em elevado tempo computacional (Lima, et. all, 2005).

No entanto, para o caso de um reator com dimensões reais, as malhas precisariam ser muito pequenas (em relação ao tamanho do núcleo) para a obtenção de resultados aceitáveis. Isso inviabiliza a aplicação deste método no projeto de um reator real, uma vez que o tempo de processamento de cálculo seria muito grande em função do enorme número de malhas requerido para a discretização do domínio do reator.

A alta precisão dos resultados atingida com o método de diferenças finitas e sua teoria bem fundamentada tornam seu uso interessante em termos de estudo, podendo servir como referência para a comparação com resultados gerados pela aplicação de outros métodos com o mesmo propósito. Como exemplo desta utilidade, pode ser citado um trabalho realizado por Ono, S., no qual resultados obtidos com um método de elementos finitos são comparados com o código CITATION (Fowler, et. all, 1971), o qual utiliza o método de diferenças finitas (Ono, 1982).

Uma proposta alternativa para a aplicação da aproximação por diferenças finitas em cálculos de projeto de reatores seria o desenvolvimento de um método capaz de utilizar tal aproximação, fazendo uma discretização do reator em malhas maiores (da ordem de um elemento combustível, por exemplo). Nesse sentido, são desenvolvidos os métodos conhecidos como métodos de diferenças finitas de malha grossa. Nesses métodos, são utilizados esquemas de alta ordem para a obtenção da variação do fluxo de nêutrons nas malhas grossas (nodos), sendo que as características gerais do método de diferenças finitas original (malha fina) são mantidas sem que haja perda significativa de precisão nos resultados ou queda na eficiência com relação ao processo computacional (Guimarães, et. all, 2008).

Os métodos de diferenças finitas de malha grossa podem ser utilizados em conjunto com outros métodos, melhorando a eficiência dos mesmos. Um exemplo desta aplicação em conjunto é apresentado por Guimarães, et. all, onde o método de diferenças finitas de malha grossa é aplicado, utilizando como dados de partida o fluxo médio nos nodos, fator de multiplicação e correntes parciais médias nas faces dos nodos, gerados com um método de expansão nodal de alto nível (Guimarães, et. all, 2008). Os resultados gerados nesse trabalho foram satisfatórios, demonstrando sua aplicabilidade nos cálculos de projeto de reatores.

1.1.2 Métodos de Elementos Finitos

Nos métodos de elementos finitos, a discretização das equações diferenciais é feita através da divisão do domínio do problema em subdivisões conhecidas como elementos. Nestes elementos são formuladas funções polinomiais de interpolação em termos dos parâmetros associados aos pontos discretos ou nós dos contornos de cada um dos elementos para a aproximação dos fluxos (Ono, 1982). Essas funções polinomiais são identicamente nulas em todos os arredores do elemento em questão, com isso, os fluxos no interior dos elementos são aproximados por um somatório de polinômios.

A utilização dos métodos de elementos finitos, como técnica numérica computacional na solução de problemas de valor de contorno, é bem difundida em diversas áreas da Engenharia, dentre as quais podem ser destacadas: Mecânica Estrutural, Mecânica dos Fluidos, cálculos de transferência de calor, entre outras. Uma das vantagens do método de elementos finitos é que o mesmo apresenta relativa facilidade no tratamento de variadas geometrias (quadradas, triangulares, etc.), sendo estas irregulares ou não. Da mesma forma, trata materiais homogêneos e heterogêneos com quaisquer combinações de condições de contorno, podendo também utilizar aproximações de alta ordem. Tudo isso, mantendo uma precisão aceitável (Ono, 1982). Seu uso extensivo nessas diversas áreas com suas inerentes vantagens motivaram sua aplicação nos cálculos de Física de Reatores.

No entanto, da mesma forma que os métodos de diferenças finitas de malha fina, os métodos de elementos finitos tendem a produzir resultados menos precisos, à medida que as subdivisões do domínio (elementos) se tornam maiores. Dessa forma, sua aplicação no caso de um reator tridimensional e de dimensões reais pode se tornar muito dispendiosa no que diz respeito ao tempo computacional, uma vez que,

para manter uma precisão aceitável nos resultados, o número de elementos do problema torna-se muito grande.

1.1.3 Método Nodal Analítico

Os métodos nodais utilizam, para a discretização espacial do núcleo do reator, blocos tridimensionais com dimensões da ordem de um elemento combustível, o que permite a geração de resultados para uma geometria tridimensional, acarretando uma maior confiabilidade no processo de cálculo dos projetos do reator e no acompanhamento de sua operação. Nesses métodos, tais blocos tridimensionais são conhecidos como nodos (daí o nome método nodal), os quais estão representados na Figura 1.

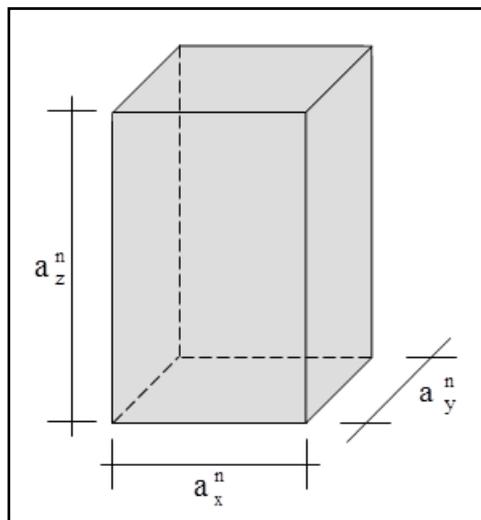


Figura 1 - Representação de um nodo e suas arestas ao longo dos eixos cartesianos.

Os métodos nodais analíticos são caracterizados por utilizarem soluções analíticas para equações presentes no processo de solução da equação da difusão de nêutrons integrada nas faces dos nodos transversais a cada direção espacial. Como

exemplo de método nodal analítico, pode ser citado o que é empregado no código QUANDRY (GREENMAN, et al., 1979), onde é feita uma aproximação quadrática para o termo de fuga presente na equação da difusão integrada transversalmente em cada face do nodo, possibilitando a referida solução analítica.

Pode ser citado também o Método Nodal com Função de Green (NGFM) (LAWRENCE et al., 1980), no qual a equação da difusão integrada transversalmente é resolvida a partir da aplicação de funções de Green nos operadores de difusão e remoção. Tal aplicação gera um sistema de equações integrais unidimensionais as quais fornecem a solução para o fluxo médio integrado numa área transversal a cada direção cartesiana e para as correntes parciais através das faces nodais.

1.1.4 Método de Expansão Nodal (NEM)

Um dos métodos nodais mais difundidos é o Método de Expansão Nodal, sigla em inglês NEM (Finneman, et. al, 1977). Este método numérico resolve a equação da difusão de nêutrons integrada numa área transversal de um nodo utilizando uma expansão polinomial de quarta ordem para aproximar o fluxo de nêutrons médio nessa área. A partir daí, são determinadas as correntes de nêutrons médias nas faces nodais e o fluxo médio nodal através de um processo iterativo.

1.2 Objetivo do Trabalho

Nesta dissertação, a Equação da Difusão de Nêutrons integrada transversalmente (caso estacionário) é resolvida utilizando-se o método nodal semi-Analítico, no qual o termo de fonte (fissão e espalhamento) desta equação é

aproximado por uma expansão polinomial de quarta ordem e o termo que representa a fuga transversal, por uma expansão polinomial quadrática (utilizando a mesma metodologia de cálculo do NEM para o cálculo de seus coeficientes). Com isso, esta equação pode ser resolvida analiticamente. Tal aproximação ocasiona o desacoplamento entre os grupos de energia na solução da equação da difusão integrada transversalmente, de maneira diferente do NEM em sua formulação original, a qual possui acoplamento entre os grupos na sua solução.

O cálculo dos coeficientes da expansão utilizada no método nodal semi-analítico é realizado através da utilização de uma condição de consistência para o cálculo do coeficiente de grau zero e a aplicação das condições de contorno nas faces nodais para o cálculo dos coeficientes de primeiro e segundo graus. Para os coeficientes de terceiro e quarto graus, serão testados três diferentes métodos de cálculo. O primeiro consiste em derivar a expansão polinomial de quarta ordem utilizada no método nodal semi-analítico e, em seguida, a aplicação das condições de contorno nessa derivada. O segundo consiste na utilização de uma técnica de resíduos ponderados e a terceira faz o uso dos coeficientes obtidos com o NEM para a determinação dos coeficientes da expansão polinomial do método nodal semi-analítico.

A divisão em capítulos deste trabalho de dissertação resume-se na forma apresentada a seguir.

No capítulo 2 é descrito o método de expansão nodal (NEM) e os passos básicos de seu desenvolvimento. No capítulo 3 descreve-se, de maneira sucinta, o esquema iterativo utilizado para a realização dos cálculos do NEM, assim como o cálculo do fator de multiplicação efetivo (K_{eff}) e os critérios de convergência, utilizados tanto para o K_{eff} quanto para o fluxo nodal médio.

No capítulo 4 é descrito o método nodal semi-analítico (proposto nesta dissertação) e a equação da difusão integrada transversalmente é solucionada, incluindo os três diferentes métodos de cálculo dos coeficientes de terceiro e quarto graus da expansão polinomial utilizada para aproximar os termos de fonte (fissão e espalhamento) em seu lado direito. Em seguida, no capítulo 5, o esquema iterativo do método nodal semi-analítico é descrito para as três propostas de cálculo dos coeficientes da expansão. No capítulo 6 são apresentados e analisados os resultados obtidos com a utilização do método nodal semi-analítico, tanto para o Keff quanto para a distribuição de potência para cada uma das três propostas de cálculo utilizadas. Ainda no capítulo 6 os resultados são comparados com aqueles obtidos pelo NEM. A conclusão da dissertação é feita no capítulo 7, onde também são apresentadas sugestões para futuros trabalhos.

2 Método de Expansão Nodal (NEM)

No método de expansão nodal (NEM), o fluxo médio de nêutrons no nodo é determinado através de uma relação com as correntes líquidas de nêutrons médias nas faces dos nodos. Essas correntes são obtidas através da determinação das correntes parciais de entrada e saída nessas faces, as quais são calculadas a partir da solução da equação da difusão de nêutrons integrada transversalmente. A equação que relaciona as correntes líquidas de nêutrons médias nas faces dos nodos com o fluxo médio nodal é conhecida como equação de balanço nodal.

2.1 Equação de Balanço Nodal

O NEM parte da equação da continuidade de nêutrons e a Lei de Fick, as quais podem ser representadas de maneira genérica para o caso estacionário (da Silva, Martinez, 2003), respectivamente pelas equações a seguir.

$$\vec{\nabla} \cdot \vec{J}_g(x, y, z) + \Sigma_{Rg}(x, y, z)\phi_g(x, y, z) = \frac{1}{k_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^G \nu \Sigma_{fg'}(x, y, z)\phi_{g'}(x, y, z) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{gg'}(x, y, z)\phi_{g'}(x, y, z) \quad (2.1.1)$$

e

$$J_{gu}(u) = -D_g(u) \frac{\partial \phi_g(u)}{\partial u} \quad ; g = 1 : G \quad (2.1.2)$$

Nesta dissertação, são usados dois grupos de energia ($G = 2$) e, portanto, nas próximas equações isto está explícito.

Sendo o núcleo do reator dividido em nodos de volumes bem definidos (V_n), nos quais os parâmetros nucleares são uniformes, pode ser realizada a integração da equação da continuidade de nêutrons no volume de um nodo, tendo como resultado a equação de balanço nodal, qual seja,

$$\sum_{u=x,y,z} \frac{1}{a_u^n} (\bar{J}_{gur}^n - \bar{J}_{gul}^n) + \bar{\Sigma}_{Rg}^n \bar{\phi}_g^n = \frac{1}{k_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 \nu \bar{\Sigma}_{fg'}^n \bar{\phi}_{g'}^n + \sum_{g'=1}^2 \bar{\Sigma}_{gg'}^n \bar{\phi}_{g'}^n \quad (2.1.3)$$

onde u representa as direções cartesianas x , y e z e os termos \bar{J}_{gul}^n e \bar{J}_{gur}^n representam as correntes líquidas de nêutrons médias numa face transversal à direção u , onde o índice l faz referência às faces esquerda, inferior ou da frontal de um nodo e o índice r refere-se às faces à direita, acima e de fundo do nodo.

O termo $\bar{\phi}_g^n$ presente na equação de balanço nodal representa o fluxo médio no volume de um nodo e é definido pela seguinte equação

$$\bar{\phi}_g^n \equiv \frac{1}{V_n} \int_{V_n} \phi_g(x, y, z) dV, \quad (2.1.4)$$

sendo o volume de um nodo definido por

$$V_n \equiv a_x^n a_y^n a_z^n. \quad (2.1.5)$$

Os termos relativos às seções de choque de remoção, fissão e espalhamento na equação de balanço nodal, são assim definidos:

$$\bar{\Sigma}_{Rg}^n \equiv \frac{1}{V_n \bar{\phi}_g^n} \int_{V_n} \Sigma_{Rg}(x, y, z) \phi_g^n(x, y, z) dV \quad (2.1.6)$$

$$\bar{\Sigma}_{g \neq g'}^n \bar{\phi}_g^n \equiv \frac{1}{V_n} \int_{V_n} \Sigma_{g \neq g'}^n(x, y, z) \phi(x, y, z) dV \quad (2.1.7)$$

$$v \bar{\Sigma}_{fg}^n = \frac{1}{V_n \bar{\phi}_g^n} \int_{V_n} v \Sigma_{fg}^n(x, y, z) \phi_g^n(x, y, z) dV \quad (2.1.8)$$

É importante lembrar que a corrente líquida de nêutrons na face de um nodo pode ser dada em termos das correntes parciais (\bar{J}_{gus}^{+n} e \bar{J}_{gus}^{-n}). Então para a direção u segue que:

$$\bar{J}_{gus}^n = \bar{J}_{gus}^{+n} - \bar{J}_{gus}^{-n} \quad ; s = l, r \text{ e } u = x, y, z, \quad (2.1.9)$$

onde as correntes parciais de nêutrons médias nas faces transversais à direção u são dadas por

$$\bar{J}_{gus}^n \equiv \frac{1}{a_v^n a_w^n} \int_0^{a_v^n} \int_0^{a_w^n} J_{gu}^n(u_s^n, v, w) dv dw. \quad (2.1.10)$$

Pode-se perceber que a equação de balanço nodal engloba, para cada grupo de energia, sete incógnitas a serem determinadas, que são: o fluxo médio nodal ($\bar{\phi}_g^n$) e as correntes líquidas médias nas faces dos nodos (\bar{J}_{gus}^n) para as direções x, y e z. No NEM, busca-se a determinação das correntes parciais médias nas faces para se poder efetuar o cálculo das correntes líquidas. Com isso, pode-se então efetuar o cálculo do fluxo médio nodal através da equação de balanço nodal.

2.2 Equação da Difusão de Nêutrons Integrada Transversalmente

Integrando-se a equação (2.1.2) numa área transversal á direção u , para um nodo qualquer, obtém-se

$$\bar{J}_{gu}^n(u) = -\bar{D}_g^n \frac{d\bar{\psi}_{gu}^n(u)}{du} \Big|_{u=u_S^n}, \quad (2.2.1)$$

onde $\bar{\psi}_{gu}^n(u)$, o fluxo de nêutrons médio numa área transversal à direção u é definido como:

$$\bar{\psi}_{gu}^n(u) \equiv \frac{1}{a_v^n a_w^n} \int_0^{a_v^n} \int_0^{a_w^n} \phi_g(u, v, w) dv dw. \quad (2.2.2)$$

É possível, substituindo a Lei de Fick na equação (2.1.1) e integrando o resultado numa área transversal à direção u (x , y ou z), obter a equação para $\bar{\psi}_{gu}^n(u)$, que é chamada de equação da difusão de nêutrons integrada transversalmente, qual seja,

$$\begin{aligned} -\bar{D}_g^n \frac{d^2}{du^2} \bar{\psi}_{gu}^n(u) + \Sigma_{Rg}^n \bar{\psi}_{gu}^n(u) &= \frac{1}{k_{\text{eff}}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 \nu \Sigma_{fg'}^n \bar{\psi}_{g'u}^n(u) + \\ &+ \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^2 \Sigma_{gg'}^n \bar{\psi}_{g'u}^n(u) - L_{gu}^n(u), \end{aligned} \quad (2.2.3)$$

onde o termo $L_{gu}^n(u)$ representa a fuga transversal de nêutrons com relação à direção u e é definido por:

$$L_{gu}^n(u) \equiv \frac{1}{a_v^n a_w^n} \int_0^{a_v^n} \int_0^{a_w^n} \left\{ -\frac{\partial}{\partial v} \left(D_g^n(u, v, w) \frac{\partial}{\partial v} \phi_g(u, v, w) \right) \right\} dv dw +$$

$$+ \frac{1}{a_v^n a_w^n} \int_0^{a_v^n} \int_0^{a_w^n} \left\{ - \frac{\partial}{\partial w} \left(D_g^n(u, v, w) \frac{\partial}{\partial w} \phi_g(u, v, w) \right) \right\} dv dw \quad (2.2.4)$$

Resolvendo-se a equação da difusão integrada transversalmente, determina-se o fluxo médio em uma dada face de um nodo. Com isso, pode-se obter uma relação direta com as correntes parciais na face em questão e, a partir dessa relação utilizar essas correntes na equação de balanço nodal para a determinação do fluxo médio nodal.

No NEM, aproxima-se a função $\bar{\psi}_{gu}^n(u)$ por uma expansão polinomial do quarto grau, cujos polinômios são conhecidos como funções de base do NEM e são dados por

$$h_0(\zeta) = 1 \quad (2.2.5)$$

$$h_1(\zeta) = 2\zeta - 1 \quad (2.2.6)$$

$$h_2(\zeta) = 6\zeta(1 - \zeta) - 1 \quad (2.2.7)$$

$$h_3(\zeta) = 6\zeta(1 - \zeta)(2\zeta - 1) \quad (2.2.8)$$

$$h_4(\zeta) = 6\zeta(1 - \zeta)(5\zeta^2 - 5\zeta + 1) \quad (2.2.9)$$

onde ζ é definido como $\frac{u}{a_u^n}$.

Os polinômios de base do NEM possuem a seguinte propriedade:

$$\int_0^1 h_k(\zeta) d\zeta = 0 ; \text{ se } k > 0. \quad (2.2.10)$$

Pode-se representar a expansão polinomial que define o fluxo médio numa face de um nodo utilizada no NEM na seguinte forma:

$$\bar{\Psi}_{gu}^n(u) = \sum_{k=0}^4 c_{kgu}^n h_k(u/a_u^n) \quad ; \text{ para } u = x, y, z, \quad (2.2.11)$$

na qual os coeficientes c_{kgu}^n são divididos em primários e secundários, sendo os primários os coeficientes de graus zero, um e dois e os secundários os de graus três e quatro.

2.3 Coeficientes da Fuga Transversal

No NEM, o termo relativo à fuga transversal, presente na equação da difusão de nêutrons integrada transversalmente, é aproximado por uma expansão polinomial de segunda ordem, a qual utiliza os polinômios de base (graus zero, um e dois), assim como na aproximação para o fluxo médio na face de um nodo. Os coeficientes da expansão, que representa a fuga transversal, são obtidos através de uma condição de consistência para o grau zero e as condições de contorno nas faces para os graus um e dois.

A condição de consistência utilizada para o cálculo do coeficiente de grau zero é representada pela equação seguinte.

$$\frac{1}{a_u^n} \int_0^{a_u^n} L_{gu}^n(u) du \equiv \bar{L}_{gu}^n \quad (2.3.1)$$

onde o termo \bar{L}_{gu}^n representa a fuga transversal média a direção u .

A expressão que define a aproximação do termo de fuga transversal através da expansão polinomial de segunda ordem é assim representada:

$$L_{gu}^n(u) = \sum_{k=0}^2 \alpha_{kgu}^n h_k(u/a_u^n) \equiv L_{gus}^n, \text{ para } u = x, y, z. \quad (2.3.2)$$

Utilizando a propriedade dos polinômios de base do NEM (descrita na equação (2.2.10)) na equação (2.3.2), tem-se que

$$\alpha_{0gu}^n = \bar{L}_{gu}^n. \quad (2.3.3)$$

Aplicando as condições de contorno das faces, esquerda e direita, na equação (2.3.2) são obtidos os seguintes valores para os coeficientes relativos aos polinômios de primeiro e segundo graus:

$$\alpha_{1gu}^n = \frac{1}{2}(L_{gur}^n - L_{gul}^n) \quad (2.3.4)$$

e

$$\alpha_{2gu}^n = \bar{L}_{gu}^n - \frac{1}{2}(L_{gur}^n + L_{gul}^n), \quad (2.3.5)$$

onde

$$L_{gus}^n \equiv L_{gu}^n(u_s^n), \text{ para } s = l, r. \quad (2.3.6)$$

Para o cálculo dos termos L_{gus}^n são impostas as condições de continuidade tanto à função $L_{gu}^n(u)$ quanto à sua derivada, na interface entre dois nodos adjacentes (indicados por m e n), da seguinte forma:

$$L_{gul}^n = L_{gur}^m \quad (2.3.7)$$

e

$$\frac{d}{du} L_{gu}^n(u) \Big|_{u=u_l^n} = \frac{d}{du} L_{gu}^m(u) \Big|_{u=u_r^m}. \quad (2.3.8)$$

As derivadas presentes na equação (2.3.8) podem ser aproximadas numericamente usando o Método de Euler Avançado, aproximando o valor no centro do nodo pelo valor médio. Isto é

$$\frac{\bar{L}_{gu}^n - L_{gul}^n}{a_u^n / 2} = \frac{L_{gur}^m - \bar{L}_{gu}^m}{a_u^m / 2}. \quad (2.3.9)$$

Utilizando a condição de continuidade, expressa na equação (2.3.7), na equação (2.3.9) é obtida a seguinte expressão.

$$L_{gur}^m = \frac{a_u^n \bar{L}_{gu}^m + a_u^m \bar{L}_{gu}^n}{a_u^n + a_u^m} \quad (2.3.10)$$

Para o cálculo das fugas transversais médias, \bar{L}_{gu}^n , a equação (2.2.4) é substituída na equação (2.3.1) e utilizando a equação (2.2.1). Então, fazendo o uso da definição de $\bar{J}_{gus}^{\pm n}$, dada pela equação (2.1.9), tem-se que:

$$\bar{L}_{gu}^n = \sum_{u=v,w} \frac{1}{a_u^n} \{ [\bar{J}_{gur}^{+n} - \bar{J}_{gur}^{-n}] - [\bar{J}_{gul}^{+n} - \bar{J}_{gul}^{-n}] \}, \quad (2.3.11)$$

completando assim, o cálculo de todas as incógnitas necessárias para a determinação do termo de fuga transversal.

2.4 Coeficientes Primários

Para o cálculo do coeficiente de grau zero na equação (2.2.11) é usada a condição de consistência, que se representa por:

$$\frac{1}{a_u^n} \int_0^{a_u^n} \bar{\Psi}_{gu}^n(u) du \equiv \bar{\Phi}_g^n. \quad (2.4.1)$$

Aplicando a propriedade descrita na equação (2.2.10) na equação (2.2.11), tem-se que o coeficiente de grau zero é dado por:

$$c_{0gu}^n = \bar{\phi}_g^n ; \forall u = x, y, z \quad (2.4.2)$$

Com isso, a expressão para a função $\bar{\psi}_{gu}^n(u_s^n)$ pode ser reescrita da seguinte forma:

$$\bar{\psi}_{gu}^n(u_s^n) = \bar{\phi}_g^n + \sum_{k=1}^4 c_{kgu}^n h_k(u/a_u^n) \quad (2.4.3)$$

Os coeficientes do primeiro e segundo graus são obtidos através da aplicação das condições de contorno nas faces dos nodos e utilizando a aproximação da difusão para o fluxo médio na face desse nodo. Ou seja,

$$\bar{\psi}_{gu}^n(u_s^n) = 2 \frac{(\bar{J}_{gus}^{+n} + \bar{J}_{gus}^{-n})}{f_{gus}^n}, \quad (2.4.4)$$

onde f_{gus}^n representa o fator de descontinuidade na face s do nodo em questão.

A aplicação das condições de contorno nas faces gera um sistema de equações que resulta nas seguintes expressões, que determinam os coeficientes de graus 1 e 2.

$$c_{1gu}^n = (\bar{J}_{gur}^{+n} + \bar{J}_{gur}^{-n})/f_{gur}^n - (\bar{J}_{gul}^{+n} + \bar{J}_{gul}^{-n})/f_{gul}^n \quad (2.4.5)$$

$$c_{2gu}^n = \bar{\phi}_g^n - (\bar{J}_{gur}^{+n} + \bar{J}_{gur}^{-n})/f_{gur}^n - (\bar{J}_{gul}^{+n} + \bar{J}_{gul}^{-n})/f_{gul}^n \quad (2.4.6)$$

Encontradas as expressões para os coeficientes primários, resta então calcular os coeficientes secundários para a obtenção da solução para a expansão polinomial do NEM.

2.5 Coeficientes Secundários

Para a obtenção dos coeficientes secundários é utilizada a técnica de resíduos ponderados aplicada à equação da difusão integrada transversalmente, como se representa na equação a seguir,

$$\frac{1}{a_u^n} \int_0^{a_u^n} \left\{ -\bar{D}_g^n \frac{d^2 \bar{\Psi}_{gu}^n(u)}{du^2} + \sum_{Rg}^n \bar{\Psi}_{gu}^n(u) - \frac{1}{k_{\text{eff}}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 \nu \bar{\Sigma}_{fg'}^n \bar{\Psi}_{g'u}^n(u) - \right. \\ \left. - \sum_{g'=1}^2 \sum_{\substack{gg' \\ g \neq g'}}^n \bar{\Psi}_{g'u}^n(u) + L_{gu}^n(u) \right\} \omega_i(u/a_u^n) du = 0, \quad (2.5.1)$$

onde as funções peso $\omega_i(u)$, por uma questão de eficiência e precisão são os polinômios de base do NEM do primeiro e segundo grau, ou seja, $i = 1$ e 2 .

Substituindo a equação (2.4.3) na equação (2.5.1) e usando as seguintes relações:

$$\int_0^1 h_1(\zeta) \frac{d^2 h_k(\zeta)}{d\zeta^2} d\zeta = \begin{cases} -12 & \text{se } k = 3 \\ 0 & \text{se } k \neq 3 \end{cases} \quad (2.5.2)$$

$$\int_0^1 h_2(\zeta) \frac{d^2 h_k(\zeta)}{d\zeta^2} d\zeta = \begin{cases} 12 & \text{se } k = 4 \\ 0 & \text{se } k \neq 4 \end{cases} \quad (2.5.3)$$

$$\int_0^1 h_1(\zeta) h_k(\zeta) d\zeta = \begin{cases} 1/3 & \text{se } k = 1 \\ 0 & \text{se } k = 2 \\ 1/5 & \text{se } k = 3 \\ 0 & \text{se } k = 4 \end{cases} \quad (2.5.4)$$

$$\int_0^1 h_2(\zeta) h_k(\zeta) d\zeta = \begin{cases} 0 & \text{se } k = 1 \\ 1/5 & \text{se } k = 2 \\ 0 & \text{se } k = 3 \\ -3/35 & \text{se } k = 4 \end{cases}, \quad (2.5.5)$$

obtêm-se os seguintes sistemas de equações dos quais obtêm-se os coeficientes de terceiro e quarto graus:

$$\begin{aligned}
& \left\{ \frac{12}{(a_u^n)^2} \bar{D}_g^n + \frac{1}{5} \bar{\Sigma}_{Rg}^n \right\} c_{3gu}^n - \frac{1}{5} \sum_{g'=1}^2 \left\{ \frac{1}{keff} \chi_g v \bar{\Sigma}_{fg'}^n + \bar{\Sigma}_{gg'}^n \right\} c_{3g'u}^n = \\
& = \frac{1}{3} \alpha_{1gu}^n - \frac{1}{3} \left\{ \bar{\Sigma}_{Rg}^n c_{1gu}^n - \sum_{g'=1}^2 \left[\frac{1}{keff} \chi_g v \bar{\Sigma}_{fg'}^n + \bar{\Sigma}_{gg'}^n \right] c_{1g'u}^n \right\} \quad (2.5.6)
\end{aligned}$$

e

$$\begin{aligned}
& \left\{ \frac{12}{(a_u^n)^2} \bar{D}_g^n + \frac{3}{35} \bar{\Sigma}_{Rg}^n \right\} c_{4gu}^n - \frac{3}{35} \sum_{g'=1}^2 \left\{ \frac{1}{keff} \chi_g v \bar{\Sigma}_{fg'}^n + \bar{\Sigma}_{gg'}^n \right\} c_{4g'u}^n = \\
& = \frac{1}{5} \alpha_{2gu}^n - \frac{1}{5} \left\{ \bar{\Sigma}_{Rg}^n c_{2gu}^n - \sum_{g'=1}^2 \left[\frac{1}{keff} \chi_g v \bar{\Sigma}_{fg'}^n + \bar{\Sigma}_{gg'}^n \right] c_{2g'u}^n \right\} \quad (2.5.7)
\end{aligned}$$

2.6 Correntes Parciais de Saída

Para a solução da equação de balanço nodal, é necessário que se determinem as correntes parciais de saída nas faces dos nodos para, então, serem obtidos os fluxos médios nodais. Uma vez determinados os coeficientes da expansão polinomial para a função $\bar{\psi}_{gu}^n(u)$, podem ser calculadas as correntes parciais de saída nas faces dos nodos, as quais se relacionam com a função $\bar{\psi}_{gu}^n(u)$ através da Lei de Fick, como mostrado na equação (2.2.1).

Fazendo a substituição das equações (2.1.9) e (2.2.11) na equação (2.2.1) e utilizando os valores de u_s^n para a face direita e esquerda de um nodo n , são obtidas as seguintes equações para as correntes:

$$\bar{J}_{gul}^{+n} - \bar{J}_{gul}^{-n} = -\bar{D}_g^n \{ 2c_{1gu}^n + 6c_{2gu}^n - 6c_{3gu}^n + 6c_{4gu}^n \} \quad (2.6.1)$$

e

$$\bar{J}_{gur}^{+n} - \bar{J}_{gur}^{-n} = -\bar{D}_g^n \{ 2c_{1gu}^n - 6c_{2gu}^n - 6c_{3gu}^n - 6c_{4gu}^n \}. \quad (2.6.2)$$

Fazendo o uso das expressões que determinam os coeficientes primários, ou seja, equações (2.4.5) e (2.4.6) nas equações (2.6.1) e (2.6.2), é obtido um sistema de equações para a determinação das correntes parciais de saída nas faces dos nodos. Deste sistema obtém-se, então

$$\bar{J}_{gul}^{-n} = A_{0gul}^n \{ \bar{\phi}_g^n + c_{4gu}^n \} + A_{1gul}^n \bar{J}_{gul}^{+n} + A_{2gul}^n \bar{J}_{gur}^{-n} - A_{3gul}^n c_{3gu}^n \quad (2.6.3)$$

e

$$\bar{J}_{gur}^{+n} = A_{0gur}^n \{ \bar{\phi}_g^n + c_{4gu}^n \} + A_{2gur}^n \bar{J}_{gul}^{+n} + A_{1gur}^n \bar{J}_{gur}^{-n} + A_{3gur}^n c_{3gu}^n , \quad (2.6.4)$$

onde:

$$A_{0gul}^n \equiv 6D_{gu}^n \{ 1 + 4D_{gur}^n \} / \text{DET}_{gu}^n , \quad (2.6.5)$$

$$A_{1gul}^n \equiv \{ 1 + 8[D_{gur}^n - D_{gul}^n] - 48D_{gul}^n D_{gur}^n \} / \text{DET}_{gu}^n , \quad (2.6.6)$$

$$A_{2gul}^n \equiv -8D_{gur}^n / \text{DET}_{gu}^n , \quad (2.6.7)$$

$$A_{3gul}^n \equiv 6D_{gu}^n \{ 1 + 12D_{gur}^n \} / \text{DET}_{gu}^n , \quad (2.6.8)$$

$$A_{0gur}^n \equiv 6D_{gu}^n \{ 1 + 4D_{gul}^n \} / \text{DET}_{gu}^n , \quad (2.6.9)$$

$$A_{1gur}^n \equiv \{ 1 - 8[D_{gur}^n - D_{gul}^n] - 48D_{gul}^n D_{gur}^n \} / \text{DET}_{gu}^n , \quad (2.6.10)$$

$$A_{2gur}^n \equiv -8D_{gul}^n / \text{DET}_{gu}^n \quad (2.6.11)$$

e

$$A_{3gur}^n \equiv 6D_{gu}^n \{ 1 + 12D_{gul}^n \} / \text{DET}_{gu}^n , \quad (2.6.12)$$

com

$$DET_{gu}^n \equiv 1 + 8\{D_{gur}^n + D_{gul}^n\} + 48D_{gul}^n D_{gur}^n, \quad (2.6.13)$$

$$D_{gu}^n \equiv \bar{D}_g^n / a_u^n \quad (2.6.14)$$

e

$$D_{gus}^n \equiv D_{gu}^n / f_{gus}^n; \text{ para } s = r, l. \quad (2.6.15)$$

Agora, com as correntes parciais de saída nas faces dos nodos determinadas, pode-se substituí-las na equação de balanço nodal para então serem calculados os fluxos médios nodais.

2.7 Cálculo do Fluxo Médio Nodal

Substituindo as expressões para as correntes parciais de saída nas faces dos nodos, ou seja, equações (2.6.3) e (2.6.4), na equação que define as correntes líquidas nas faces nodais, representada na equação (2.1.9), para as faces, esquerda e direita, e posteriormente, substituindo-as na equação de balanço nodal, representada pela equação (2.1.2), obtém-se a equação da qual são calculados os fluxos médios nos nodos.

$$\begin{aligned} & \{ \bar{\Sigma}_{Rg}^n + \sum_{u=x,y,z} \frac{A_{0gul}^n + A_{0gur}^n}{a_u^n} \} \bar{\Phi}_g^n - \sum_{g'=1}^2 \left\{ \frac{1}{k_{eff}} \chi_g v \Sigma_{g'}^n + \bar{\Sigma}_{gg'}^n \right\} \bar{\Phi}_{g'}^n = \\ & = \sum_{u=x,y,z} \frac{1}{a_u^n} \{ (1 - \{A_{1gul}^n + A_{2gur}^n\}) \bar{J}_{gul}^{+n} + (1 - \{A_{1gur}^n + A_{2gul}^n\}) \bar{J}_{gur}^{-n} - \\ & - \{A_{3gur}^n - A_{3gul}^n\} c_{3gu}^n - \{A_{0gul}^n + A_{0gur}^n\} c_{4gu}^n \} \end{aligned} \quad (2.7.1)$$

3 Esquema Iterativo do NEM

O modelo computacional para realização dos cálculos neutrônicos utilizado nesta dissertação foi desenvolvido no Programa de Engenharia Nuclear da Coppe/UFRJ (Silva, Martinez, 2003) e é baseado no esquema mostrado na Figura 2.

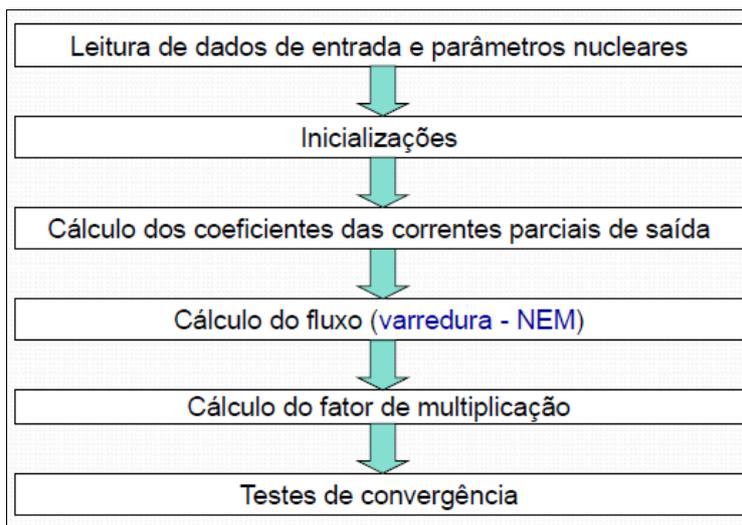


Figura 2 - Esquema iterativo do NEM original

O modelo iterativo representado na figura 2 se inicia com a leitura dos dados geométricos do núcleo do reator e, em seguida, seus parâmetros (seções de choque, coeficiente de difusão, etc). Na seqüência, são realizados os cálculos dos coeficientes A_{gus}^n , os quais não necessitam fazer parte do processo iterativo, uma vez que são constantes por nodo, grupo, face nodal e direção.

Após os cálculos acima, são feitas as inicializações do processo iterativo de cálculo, onde são atribuídos os valores iniciais para as correntes de nêutrons, para o fator de multiplicação efetivo e para o fluxo de nêutrons.

Na etapa seguinte (varredura do NEM), trata-se efetivamente a solução da equação da difusão de nêutrons, onde são calculados o fluxo de nêutrons e todos os

coeficientes do NEM (primários e secundários), através dos valores determinados ao decorrer do processo iterativo. Em seguida, calcula-se o fator de multiplicação e, havendo a convergência para os valores do fluxo médio nodal e do fator de multiplicação efetivo, dentro de critérios pré-estabelecidos, o processo iterativo é finalizado.

3.1 Varredura do NEM

O NEM, por ser um método nodal, soluciona a equação da difusão para três dimensões. Para tanto, o núcleo do reator é dividido em blocos tridimensionais (nodos), cujas localizações no domínio do reator são dadas por suas coordenadas correspondentes (linhas e colunas formando planos horizontais e as divisões axiais ao longo do eixo vertical).

A determinação da localização de um nodo com relação à sua vizinhança é feita através de uma varredura das linhas, colunas nas divisões axiais, o que permite identificar as correntes de entrada nas faces dos nodos. Essa varredura é feita ora fixando uma dada coluna e varrendo as linhas de uma dada divisão axial do núcleo, ora fixando uma linha e varrendo as colunas dessa mesma divisão axial.

Com isso pode-se determinar os nodos vizinhos às faces de um nodo qualquer do núcleo do reator e, com todas as vizinhanças nas faces de cada nodo determinadas (trás, frente, cima, baixo, esquerda e direita), podem ser determinadas as correntes de entrada e, em seguida, dentro da rotina de varredura do NEM, chamar ordenadamente as rotinas para o cálculo das correntes parciais de entrada, coeficientes primários, fuga transversal, coeficientes secundários, fluxo médio nodal e, enfim as correntes parciais de saída para cada face de cada nodo. O esquema de varredura do NEM é representado na Figura 3.

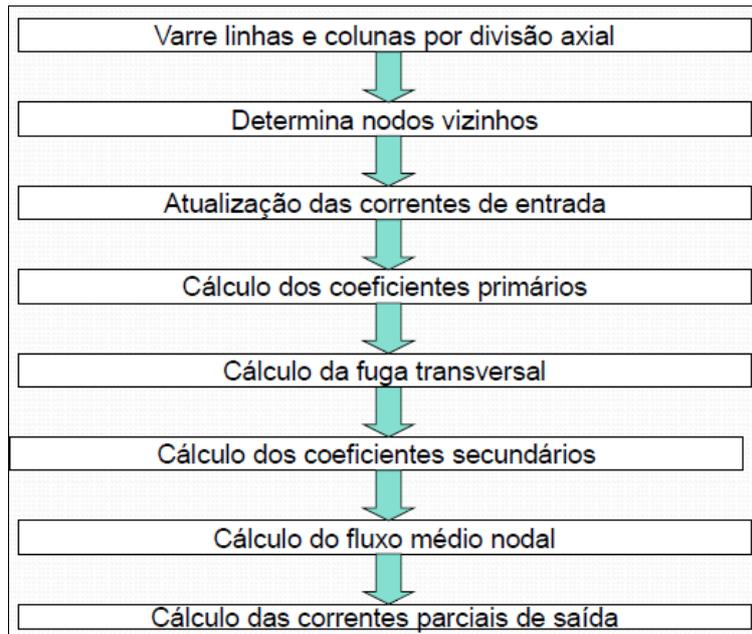


Figura 3 - Fluxograma da rotina de varredura do NEM original

3.2 Cálculo do Fator de Multiplicação

Uma vez determinado o fluxo médio nodal, pode-se efetuar o cálculo iterativo do fator de multiplicação efetivo (K_{eff}) através do Método das Potências (Alvim, 2007), o qual gera seguinte relação entre o valor a ser estimado em uma iteração atual e o valor estimado na iteração anterior:

$$K_{eff}^{Atual} = \frac{S^{Atual} K_{eff}^{Anterior}}{S^{Anterior}} \quad (3.2.1)$$

onde, para uma iteração indicada pelo índice i define-se o termo fonte de fissão somada como sendo

$$S^{(i)} \equiv \left(\sum_{g'=1}^2 v \Sigma_{fg',n}^n \bar{\phi}_{g',n}^{(i)} \right) \mathbf{V}_n \quad (3.2.2)$$

Onde

$$\bar{\phi}_{g,n}^{(i)} \equiv \bar{\phi}_g^n, \text{ calculado em uma iteração } i \quad (3.2.3)$$

e V_n é o produto entre a área da base de um dado elemento combustível pela espessura da divisão axial correspondente ao nodo contido no elemento combustível em questão, ou seja, o volume de um nodo, que é um prisma reto retangular.

3.3 Critérios de Convergência

Os testes de convergência ocorrem após uma estimativa do fator de multiplicação efetivo com base no cálculo do fluxo médio nodal numa dada iteração. Nesses testes determina-se se o valor encontrado numa iteração é satisfatório através das seguintes condições:

$$\left| \frac{\text{Keff}^{\text{Atual}} - \text{Keff}^{\text{Anterior}}}{\text{Keff}^{\text{Atual}}} \right| \leq \varepsilon_{\text{Keff}} \quad (3.3.1)$$

e

$$\max(n, g) \left| \frac{\bar{\phi}_g^{n \text{Atual}} - \bar{\phi}_g^{n \text{Anterior}}}{\bar{\phi}_g^{n \text{Atual}}} \right| \leq \varepsilon_{\text{Fluxo}} \quad (3.3.2)$$

onde $\varepsilon_{\text{Keff}}$ e $\varepsilon_{\text{Fluxo}}$ correspondem, respectivamente, aos valores de tolerância para a convergência do fator de multiplicação efetivo e a do fluxo de nêutrons calculados numa iteração, em relação à uma iteração anterior. Neste trabalho, são utilizados 10^{-6} para o Keff e 10^{-5} para os fluxos nodais. Uma vez atendidos estes critérios, encerra-se o processo iterativo de cálculo do NEM.

4 Método Nodal Semi-Analítico

O método nodal semi-analítico é similar ao NEM no que diz respeito à metodologia usada na determinação das correntes parciais de saída para a obtenção dos fluxos nodais na equação de balanço nodal, a partir da solução da equação da difusão integrada transversalmente. No entanto, no método nodal semi-analítico, os termos de fonte (fissão e espalhamento) no lado direito desta equação são aproximados por uma expansão polinomial de quarta ordem, a qual utiliza as mesmas funções de base do NEM. Com base nessas informações, pode-se escrever a equação da difusão de nêutrons integrada transversalmente, segundo o método nodal semi-analítico, da seguinte forma para dois grupos de energia (sem upscattering):

$$-\bar{D}_g^n \frac{d^2}{du^2} \bar{\Psi}_{gu}^n(u) + \Sigma_{Rg}^n \bar{\Psi}_{gu}^n(u) = Q_{gu}^n(u) - L_{gu}^n(u) , \quad (4.1)$$

onde

$$Q_{gu}^n(u) \equiv \begin{cases} \frac{1}{keff} \sum_{g=1}^2 v \Sigma_{fg}^n \bar{\Psi}_{g'u}^n(u) & ; \text{para } g = 1 \\ \bar{\Sigma}_{21}^n \bar{\Psi}_{1u}^n(u) & ; \text{para } g = 2 \end{cases} . \quad (4.2)$$

No método semi-analítico, $Q_{gu}^n(u)$ é uma expansão da seguinte forma:

$$Q_{gu}^n(u) \equiv \sum_{k=0}^4 q_{kgu}^n h_k(u/a_u^n) ; \text{para } u = x, y, z \quad (4.3)$$

Com $L_{gu}^n(u)$ dado pela equação (2.3.2) e $Q_{gu}^n(u)$ dado pela equação (4.3), resolve-se a equação (4.1) analiticamente e, por esta razão, este método foi denominado NEM semi-analítico. Os coeficientes presentes na solução analítica da equação (4.1) serão determinados na seção (4.1). No entanto, tais coeficientes irão

depender da determinação dos coeficientes da expansão de $Q_{gu}^n(u)$, a qual será efetuada, em seguida, na seção (4.2).

4.1 Solução Analítica para a Equação da Difusão de Nêutrons Integrada Transversalmente segundo o Método Nodal Semi-Analítico

Substituindo as equações (2.3.2) e (4.3), situada na página 28, na equação (4.1) e dividindo-a por $-\bar{D}_g^n$, obtém-se

$$\frac{d^2}{du^2} \bar{\Psi}_{gu}^n(u) - \lambda_g^n \bar{\Psi}_{gu}^n(u) = \sum_{k=0}^4 b_{kgu}^n h_k(u/a_u^n), \quad (4.1.1)$$

onde:

$$b_{kgu}^n \equiv \begin{cases} \frac{(\alpha_{kgu}^n - q_{kgu}^n)}{\bar{D}_g^n} & ; \text{para } k = 0,1,2 \\ -q_{kgu}^n/\bar{D}_g^n & ; \text{para } k = 3,4 \end{cases} \quad (4.1.2)$$

e

$$\lambda_g^n \equiv \frac{\sum_{Rg}^n}{\bar{D}_g^n}. \quad (4.1.3)$$

A solução geral da equação (4.1.1) será composta por uma parte homogênea (que engloba funções seno e cosseno hiperbólicos) e uma parte particular, composta por uma expansão polinomial de quarta ordem, também usando as funções de base do NEM original, da seguinte forma:

$$\begin{aligned} \bar{\Psi}_{gu}^n(u) = & A_{gu}^n \sinh(\gamma_g^n \{u - a_u^n / 2\}) + B_{gu}^n \cosh(\gamma_g^n \{u - a_u^n / 2\}) + \\ & + \sum_{k=0}^4 c_{kgu}^n (u/a_u^n) h_k(u/a_u^n) \end{aligned} \quad (4.1.4)$$

onde $\gamma_g^n \equiv \sqrt{\lambda_g^n}$.

A obtenção dos coeficientes A_{gu}^n , B_{gu}^n e c_{kgu}^n , presentes na equação (4.1.4), será realizada através dos seguintes procedimentos: condições de contorno para calcular A_{gu}^n e B_{gu}^n , condição de consistência para calcular c_{0gu}^n e uma técnica de resíduos ponderados para os demais c_{kgu}^n .

4.1.1 Cálculo dos coeficientes da solução de $\bar{\Psi}_{gu}^n(u)$

A condição de consistência, utilizada para o cálculo de c_{0gu}^n é dada pela seguinte equação.

$$\frac{1}{a_u^n} \int_0^{a_u^n} \bar{\Psi}_{gu}^n(u) du = \bar{\Phi}_g^n. \quad (4.1.1.1)$$

Então, substituindo a equação (4.1.4) na equação (4.1.1.1) e realizando a integração, obtém-se o seguinte resultado para o coeficiente de grau zero da expansão polinomial presente na equação (4.1.4).

$$c_{0gu}^n = \bar{\Phi}_g^n - \frac{2}{\gamma_g^n a_u^n} B_{gu}^n \sinh(\gamma_g^n a_u^n / 2). \quad (4.1.1.2)$$

Com isso, pode-se escrever:

$$\bar{\Psi}_{gu}^n(u) = A_{gu}^n \sinh(\gamma_g^n \{u - a_u^n / 2\}) + \{ \cosh(\gamma_g^n \{u - a_u^n / 2\}) - \frac{2}{\gamma_g^n a_u^n} \sinh(\gamma_g^n a_u^n / 2) \} B_{gu}^n + \bar{\phi}_g^n + \sum_{k=1}^4 c_{kgu}^n h_k(u/a_u^n). \quad (4.1.1.3)$$

A aplicação das condições de contorno para a determinação de A_{gu}^n se baseia na aproximação da difusão, ou seja:

$$\bar{\Psi}_{gu}^n(u_s^n) = 2(\bar{J}_{gus}^{+n} + \bar{J}_{gus}^{-n})/f_{gus}^n \quad ; s = l, r. \quad (4.1.1.4)$$

Substituindo então a equação (4.1.1.3) na equação (4.1.1.4) e usando os valores de u_s^n nas faces, esquerda e direita, obtém-se

$$-S_{gu}^n A_{gu}^n + [C_{gu}^n - 2S_{gu}^n / (\gamma_g^n a_u^n)] B_{gu}^n + \bar{\phi}_g^n - c_{1gu}^n - c_{2gu}^n = 2(\bar{J}_{gul}^{+n} + \bar{J}_{gul}^{-n})/f_{gul}^n \quad (4.1.1.5)$$

e

$$+S_{gu}^n A_{gu}^n + [C_{gu}^n - 2S_{gu}^n / (\gamma_g^n a_u^n)] B_{gu}^n + \bar{\phi}_g^n + c_{1gu}^n - c_{2gu}^n = 2(\bar{J}_{gur}^{+n} + \bar{J}_{gur}^{-n})/f_{gur}^n \quad (4.1.1.6)$$

Onde definimos:

$$S_{gu}^n \equiv \sinh(\gamma_g^n a_u^n / 2) \quad (4.1.1.7)$$

e

$$C_{gu}^n \equiv \cosh(\gamma_g^n a_u^n / 2). \quad (4.1.1.8)$$

Agora, resolvendo o sistema composto pelas equações (4.1.1.5) e (4.1.1.6), obtém-se que

$$A_{gu}^n = \frac{(\bar{J}_{gur}^{+n} + \bar{J}_{gur}^{-n})/f_{gur}^n - (\bar{J}_{gul}^{+n} + \bar{J}_{gul}^{-n})/f_{gul}^n - c_{1gu}^n}{S_{gu}^n} \quad (4.1.1.9)$$

e

$$\mathbf{B}_{gu}^n = \frac{(\bar{\mathbf{J}}_{gur}^{+n} + \bar{\mathbf{J}}_{gur}^{-n})/f_{gur}^n + (\bar{\mathbf{J}}_{gul}^{+n} + \bar{\mathbf{J}}_{gul}^{-n})/f_{gul}^n + \mathbf{c}_{2gu}^n - \bar{\phi}_g^n}{\hat{\mathbf{C}}_{gu}^n} \quad (4.1.1.10)$$

onde:

$$\hat{\mathbf{C}}_{gu}^n \equiv \mathbf{C}_{gu}^n - 2\mathbf{S}_{gu}^n / (\gamma_g^n a_u^n). \quad (4.1.1.11)$$

A técnica de resíduos ponderados com peso do tipo Galerkin é usada para a determinação dos coeficientes de graus um até quatro da expansão polinomial, relativa à parte particular da solução da equação da difusão integrada transversalmente, ou seja, tem-se que:

$$\frac{1}{a_u^n} \int_0^{a_u^n} \left\{ \frac{d^2}{du^2} \bar{\psi}_{gu}^n(u) - \lambda_g^n \bar{\psi}_{gu}^n(u) - \sum_{k=0}^4 \mathbf{b}_{kgu}^n h_k(u/a_u^n) \right\} h_i(u/a_u^n) du = 0 ; \text{ para } i = 1,2,3,4. \quad (4.1.1.12)$$

Agora, substituindo a parte particular da solução da equação da difusão integrada transversalmente na equação (4.1.1.12), tem-se que:

$$\frac{1}{a_u^n} \int_0^{a_u^n} \left\{ \sum_{k=1}^4 \mathbf{c}_{kgu}^n \frac{d^2}{du^2} h_k(u/a_u^n) - \sum_{k=1}^4 (\lambda_g^n \mathbf{c}_{kgu}^n + \mathbf{b}_{kgu}^n) h_k(u/a_u^n) \right\} h_i(u/a_u^n) du = 0, \quad (4.1.1.13)$$

onde as funções $h_i(u/a_u^n)$ são as funções de base do NEM original. Substituindo então as funções de base do NEM na equação (4.1.1.13), obtém-se:

$$\int_0^{a_u^n} h_1(u/a_u^n) \frac{d^2}{du^2} h_k(u/a_u^n) du = \begin{cases} 0 & ; \text{ para } k = 1,2,4 \\ -\frac{12}{a_u^n} & ; \text{ para } k = 3 \end{cases}, \quad (4.1.1.14)$$

$$\int_0^{a_u^n} h_2(u/a_u^n) \frac{d^2}{du^2} h_k(u/a_u^n) du = \begin{cases} 0 & ; \text{para } k = 1,2,3 \\ \frac{12}{a_u^n} & ; \text{para } k = 4 \end{cases} , \quad (4.1.1.15)$$

$$\int_0^{a_u^n} h_3(u/a_u^n) \frac{d^2}{du^2} h_k(u/a_u^n) du = \begin{cases} 0 & ; \text{para } k = 1,2,4 \\ -\frac{36}{5a_u^n} & ; \text{para } k = 3 \end{cases} , \quad (4.1.1.16)$$

$$\int_0^{a_u^n} h_1(u/a_u^n) \frac{d^2}{du^2} h_k(u/a_u^n) du = \begin{cases} 0 & ; \text{para } k = 1,2,3 \\ -\frac{36}{7a_u^n} & ; \text{para } k = 4 \end{cases} , \quad (4.1.1.17)$$

$$\int_0^{a_u^n} h_1(u/a_u^n) h_k(u/a_u^n) du = \begin{cases} \frac{a_u^n}{3} & ; \text{para } k = 1 \\ 0 & ; \text{para } k = 2,4 , \\ \frac{a_u^n}{5} & ; \text{para } k = 3 \end{cases} \quad (4.1.1.18)$$

$$\int_0^{a_u^n} h_2(u/a_u^n) h_k(u/a_u^n) du = \begin{cases} 0 & ; \text{para } k = 1,3 \\ \frac{a_u^n}{5} & ; \text{para } k = 2 , \\ -\frac{3a_u^n}{35} & ; \text{para } k = 4 \end{cases} \quad (4.1.1.19)$$

$$\int_0^{a_u^n} h_3(u/a_u^n) h_k(u/a_u^n) du = \begin{cases} \frac{a_u^n}{5} & ; \text{para } k = 1 \\ 0 & ; \text{para } k = 2,4 , \\ \frac{6a_u^n}{35} & ; \text{para } k = 3 \end{cases} \quad (4.1.1.20)$$

$$\int_0^{a_u^n} h_3(u/a_u^n) h_k(u/a_u^n) du = \begin{cases} 0 & ; \text{para } k = 1,3 \\ -\frac{3a_u^n}{35} & ; \text{para } k = 2 \\ \frac{2a_u^n}{35} & ; \text{para } k = 4 \end{cases} \quad (4.1.1.21)$$

Usando então estes resultados na equação (4.1.1.13), obtém-se o seguinte sistema de equações para a determinação dos coeficientes da expansão polinomial da solução particular da equação (4.1.1).

$$-12c_{3gu}^n / (a_u^n)^2 - (\lambda_g^n c_{1gu}^n + b_{1gu}^n) / 3 - (\lambda_g^n c_{3gu}^n + b_{3gu}^n) / 5 = 0 , \quad (4.1.1.22)$$

$$12c_{4gu}^n / (a_u^n)^2 - (\lambda_g^n c_{2gu}^n + b_{2gu}^n) / 5 + 3(\lambda_g^n c_{4gu}^n + b_{4gu}^n) / 35 = 0 , \quad (4.1.1.23)$$

$$-\frac{3}{5} (12c_{3gu}^n / (a_u^n)^2) - (\lambda_g^n c_{1gu}^n + b_{1gu}^n) / 5 - 6(\lambda_g^n c_{3gu}^n + b_{3gu}^n) / 35 = 0 , \quad (4.1.1.24)$$

e

$$-\frac{3}{7} (12c_{4gu}^n / (a_u^n)^2) + 3(\lambda_g^n c_{2gu}^n + b_{2gu}^n) / 35 - 2(\lambda_g^n c_{4gu}^n + b_{4gu}^n) / 35 = 0 . \quad (4.1.1.25)$$

Resolvendo-se este sistema, obtém-se que

$$c_{1gu}^n = \frac{(36b_{3gu}^n - \lambda_g^n (a_u^n)^2 b_{1gu}^n)}{(\lambda_g^n a_u^n)^2} , \quad (4.1.1.26)$$

$$c_{2gu}^n = -\frac{(60b_{4gu}^n + \lambda_g^n (a_u^n)^2 b_{2gu}^n)}{(\lambda_g^n a_u^n)^2} , \quad (4.1.1.27)$$

$$c_{3gu}^n = -\frac{b_{3gu}^n}{\lambda_g^n} \quad (4.1.1.28)$$

e

$$c_{4gu}^n = -\frac{b_{4gu}^n}{\lambda_{g_u}^n} \quad (4.1.1.29)$$

Com os coeficientes da solução analítica da equação da difusão integrada transversalmente definidos, resta agora a determinação dos coeficientes da expansão polinomial $Q_{gu}^n(u)$, para a obtenção definitiva de $\bar{\Psi}_{gu}^n(u)$.

4.2 Coeficientes da expansão polinomial de $Q_{gu}^n(u)$

Os coeficientes de graus zero, um e dois da expansão de $Q_{gu}^n(u)$ foram obtidos da seguinte forma: aplicação da condição de consistência para calcular o coeficiente de grau zero e condições nas faces do nodo para calcular os coeficientes de graus um e dois. Já os coeficientes de graus três e quatro foram calculados através de três diferentes propostas a saber: i) aplicação das condições, nas faces dos nodos, para a derivada da expansão polinomial $Q_{gu}^n(u)$; ii) utilização de uma técnica de resíduos ponderados, com peso do tipo momento e iii) aplicação dos coeficientes obtidos para a expansão de $\bar{\Psi}_{gu}^n(u)$ no NEM original. Importante ressaltar que esta última proposta engloba o cálculo de todos os coeficientes de $Q_{gu}^n(u)$.

4.2.1 Coeficientes de graus zero, um e dois

Para o cálculo do coeficiente de grau zero é utilizada a seguinte condição de consistência.

$$\bar{Q}_g^n \equiv \frac{1}{a_u^n} \int_0^{a_u^n} Q_{gu}^n(u) du = \begin{cases} \frac{1}{\text{keff}} \sum_{g'=1}^2 v \Sigma_{fg'}^n \bar{\phi}_{g'}^n & ; \text{para } g = 1 \\ \bar{\Sigma}_{21}^n \bar{\phi}_1^n & ; \text{para } g = 2 \end{cases} \quad (4.2.1.1)$$

Realizando a integração da equação (4.3), situada na página 28, e fazendo uso da propriedade das funções de base do NEM descrita pela equação (2.2.10), obtém-se que

$$q_{ogu}^n = \bar{Q}_g^n \quad ; \forall u = x, y, z . \quad (4.2.1.2)$$

Para o cálculo dos coeficientes de graus um e dois, adotou-se a seguinte definição para a aplicação das condições nas faces dos nodos na expansão.

$$Q_{gus}^n(u) \equiv Q_{gu}^n(u_s^n) = \begin{cases} \frac{1}{\text{keff}} \sum_{g'=1}^2 v \Sigma_{fg'}^n \bar{\psi}_{g'u}^n(u_s^n) & ; \text{para } g = 1 \\ \bar{\Sigma}_{21}^n \bar{\psi}_{1u}^n(u_s^n) & ; \text{para } g = 2. \end{cases} \quad (4.2.1.3)$$

Lembrando que u_s^n vale zero para a face esquerda e a_u^n para a face direita com relação à direção u e, aplicando esses valores na equação (4.3), situada na página 28, obtém-se um sistema de equações que resulta nas seguintes expressões para os coeficientes de graus um e dois:

$$q_{1gu}^n = \frac{1}{2} (Q_{gur}^n - Q_{gul}^n) \quad (4.2.1.4)$$

e

$$q_{2gu}^n = \bar{Q}_g^n - \frac{1}{2} (Q_{gur}^n + Q_{gul}^n) . \quad (4.2.1.5)$$

4.2.2 Cálculo de q_{3gu}^n e q_{4gu}^n utilizando as Derivadas da expansão polinomial nas faces dos nodos

Esta proposta consiste em construir um sistema de equações, a partir da aplicação das condições nas faces do nodo para a derivada da expansão polinomial $Q_{gu}^n(u)$, com a finalidade de encontrar os coeficientes de graus três e quatro. Com base na equação (2.2.2), pode-se representar a derivação da expansão polinomial $Q_{gu}^n(u)$ em relação à direção u da seguinte forma:

$$\frac{d}{du} Q_{gu}^n(u) \Big|_{u=u_s^n} = \begin{cases} -\frac{1}{keff} \sum_{g'=1}^2 (v \Sigma_{fg'}^n / \bar{D}_{g'}^n) \bar{J}_{g'us}^n & ; \text{para } g = 1 \\ -(\bar{\Sigma}_{21}^n / \bar{D}_g^n) \bar{J}_{1us}^n & ; \text{para } g = 2 \end{cases} \quad (4.2.2.1)$$

Executando a derivação da equação (4.3), situada na página 28, e aplicando-se as condições de contorno nas faces, obtém-se o seguinte sistema de equações para a determinação dos coeficientes de terceiro e quarto graus.

$$\begin{cases} 4q_{1gu}^n - 12q_{3gu}^n = a_u^n (Q_{gul}^n + Q_{gul}^n) \\ 12q_{2gu}^n + 12q_{4gu}^n = a_u^n (Q_{gul}^n - Q_{gul}^n) \end{cases} \quad (4.2.2.2)$$

onde $Q_{gus}^n \equiv \frac{d}{du} Q_{gu}^n(u) \Big|_{u=u_s^n}$.

A solução do sistema representado pela equação (4.2.2.2), para a determinação dos coeficientes, é a seguinte:

$$q_{3gu}^n = \frac{1}{3} q_{1gu}^n - (a_u^n / 12) (Q_{gul}^n + Q_{gur}^n) \quad (4.2.2.3)$$

e

$$q_{4gu}^n = (a_u^n / 12) (Q_{gu}^n - Q_{gur}^n) - q_{2gu}^n \quad (4.2.2.4)$$

4.2.3 Aplicação da Técnica de Resíduos Ponderados para o cálculo de q_{3gu}^n e q_{4gu}^n

A técnica de resíduos ponderados, com peso do tipo momento, é aplicada na expansão polinomial de $Q_{gu}^n(u)$, do seguinte modo:

$$\sum_{k=0}^4 q_{kgu}^n \left(\int_0^{a_u^n} h_k(u/a_u^n) h_i(u/a_u^n) du \right) = \begin{cases} \frac{1}{\text{keff}} \sum_{g'=1}^2 v \Sigma_{fg'}^n \left(\int_0^{a_u^n} \bar{\Psi}_{g'u}^n(u) h_i(u/a_u^n) du \right) & ; \text{ para } g = 1 \\ \bar{\Sigma}_{21}^n \left(\int_0^{a_u^n} \bar{\Psi}_{1u}^n(u) h_i(u/a_u^n) du \right) & ; \text{ para } g = 2. \end{cases}$$

$$(4.2.3.1)$$

Utilizando os polinômios de base do NEM para as funções peso $h_i(u/a_u^n)$, com $i = 1$ e 2, pode-se obter os coeficientes de graus três e quatro da expansão de $Q_{gu}^n(u)$.

Com base na equação (4.3) pode-se escrever:

$$\begin{aligned} \int_0^{a_u^n} \bar{\Psi}_{gu}^n(u) h_i(u/a_u^n) du &= A_{gu}^n \int_0^{a_u^n} \sinh(\gamma_g^n \{u - a_u^n / 2\}) h_i(u/a_u^n) du + \\ &+ B_{gu}^n \int_0^{a_u^n} \cosh(\gamma_g^n \{u - a_u^n / 2\}) h_i(u/a_u^n) du + \\ &+ \sum_{k=1}^4 (c_{kgu}^n) \int_0^{a_u^n} h_k(u/a_u^n) h_i(u/a_u^n) du. \end{aligned} \quad (4.2.3.2)$$

Resolvendo-se a equação (4.2.3.2) para $i = 1$ e 2, obtêm-se as seguintes expressões para os coeficientes q_{3gu}^n e q_{4gu}^n :

$$\mathbf{q}_{31u}^n = (\mathbf{a}_{22u}^n \mathbf{P}_{11u}^n - \mathbf{a}_{12u}^n \mathbf{P}_{12u}^n) / (\mathbf{a}_{11u}^n \mathbf{a}_{22u}^n - \mathbf{a}_{12u}^n \mathbf{a}_{12u}^n) \quad (4.2.3.3)$$

$$\mathbf{q}_{32u}^n = (\mathbf{a}_{11u}^n \mathbf{P}_{12u}^n - \mathbf{a}_{21u}^n \mathbf{P}_{11u}^n) / (\mathbf{a}_{11u}^n \mathbf{a}_{22u}^n - \mathbf{a}_{12u}^n \mathbf{a}_{12u}^n) \quad (4.2.3.4)$$

$$\mathbf{q}_{41u}^n = (\mathbf{n}_{22u}^n \mathbf{P}_{21u}^n - \mathbf{n}_{12u}^n \mathbf{P}_{22u}^n) / (\mathbf{n}_{11u}^n \mathbf{n}_{22u}^n - \mathbf{n}_{12u}^n \mathbf{n}_{12u}^n) \quad (4.2.3.5)$$

$$\mathbf{q}_{42u}^n = (\mathbf{n}_{11u}^n \mathbf{P}_{22u}^n - \mathbf{n}_{21u}^n \mathbf{P}_{21u}^n) / (\mathbf{n}_{11u}^n \mathbf{n}_{22u}^n - \mathbf{n}_{12u}^n \mathbf{n}_{12u}^n) \quad (4.2.3.6)$$

onde:

$$\mathbf{a}_{11u}^n \equiv \frac{1}{\mathbf{Keff}} \left(\frac{\mathbf{a}_u^n}{5} - \mathbf{v} \bar{\Sigma}_{f1}^n \mathbf{M}_{11u}^n \right), \quad (4.2.3.7)$$

$$\mathbf{a}_{12u}^n \equiv -\frac{1}{\mathbf{Keff}} \mathbf{v} \bar{\Sigma}_{f2}^n \mathbf{M}_{12u}^n, \quad (4.2.3.8)$$

$$\mathbf{a}_{22u}^n \equiv \frac{\mathbf{a}_u^n}{5}, \quad (4.2.3.9)$$

$$\mathbf{a}_{21u}^n \equiv -\bar{\Sigma}_{21}^n \mathbf{M}_{11u}^n, \quad (4.2.3.10)$$

$$\mathbf{P}_{11u}^n \equiv \frac{1}{\mathbf{Keff}} (\mathbf{v} \bar{\Sigma}_{f1}^n \mathbf{L}_{11u}^n + \mathbf{v} \bar{\Sigma}_{f2}^n \mathbf{L}_{12u}^n) - \frac{\mathbf{a}_u^n}{3} \mathbf{q}_{11u}^n, \quad (4.2.3.11)$$

$$\mathbf{P}_{12u}^n \equiv \bar{\Sigma}_{21}^n \mathbf{L}_{11u}^n - \frac{\mathbf{a}_u^n}{3} \mathbf{q}_{12u}^n, \quad (4.2.3.12)$$

$$\mathbf{n}_{11u}^n \equiv 3 \frac{\mathbf{a}_u^n}{35} + \frac{1}{\mathbf{Keff}} \mathbf{v} \bar{\Sigma}_{f1}^n \mathbf{M}_{21u}^n, \quad (4.2.3.13)$$

$$\mathbf{n}_{12u}^n \equiv \frac{1}{\mathbf{Keff}} \mathbf{v} \bar{\Sigma}_{f2}^n \mathbf{M}_{22u}^n, \quad (4.2.3.14)$$

$$\mathbf{n}_{22u}^n \equiv 3 \frac{\mathbf{a}_u^n}{35}, \quad (4.2.3.15)$$

$$\mathbf{n}_{21u}^n \equiv \bar{\Sigma}_{21}^n \mathbf{M}_{21u}^n, \quad (4.2.3.16)$$

$$\mathbf{P}_{21u}^n \equiv \frac{\mathbf{a}_u^n}{5} \mathbf{q}_{11u}^n - \frac{1}{\mathbf{Keff}} \left(\mathbf{v} \bar{\Sigma}_{f1}^n \mathbf{L}_{21u}^n + \mathbf{v} \bar{\Sigma}_{f2}^n \mathbf{L}_{22u}^n \right) \quad (4.2.3.17)$$

e

$$\mathbf{P}_{21u}^n \equiv \frac{\mathbf{a}_u^n}{5} \mathbf{q}_{22u}^n - \bar{\Sigma}_{21}^n \mathbf{L}_{21u}^n. \quad (4.2.3.18)$$

Agora, para $g = 1$ e 2 :

$$\mathbf{M}_{1gu}^n \equiv \frac{1}{\mathbf{D}_g^n} \left(\frac{\mathbf{a}_u^n}{5} - \mathbf{R}_{1gu}^n \frac{36}{(\lambda_g^n \mathbf{a}_u^n)^2} \right), \quad (4.2.3.13)$$

$$\mathbf{R}_{1gu}^n \equiv \frac{\mathbf{a}_u^n}{3} - \frac{\beta_{1gu}^n}{\mathbf{S}_{gu}^n}, \quad (4.2.3.14)$$

$$\beta_{1gu}^n \equiv \frac{2}{\gamma_g^n} \mathbf{C}_{gu}^n - \frac{4}{\lambda_g^n \mathbf{a}_u^n} \mathbf{S}_{gu}^n, \quad (4.2.3.15)$$

$$\mathbf{L}_{1gu}^n \equiv \beta_{1gu}^n \frac{\omega_{gu}^{-n}}{\mathbf{S}_{gu}^n} - \mathbf{b}_{1gu}^n \frac{\mathbf{R}_{1gu}^n}{\lambda_g^n}, \quad (4.2.3.16)$$

$$\omega_{gu}^{-n} \equiv (\bar{\mathbf{J}}_{gur}^{+n} + \bar{\mathbf{J}}_{gur}^{-n}) / \mathbf{f}_{gur}^n - (\bar{\mathbf{J}}_{gul}^{+n} + \bar{\mathbf{J}}_{gul}^{-n}) / \mathbf{f}_{gul}^n, \quad (4.2.3.17)$$

$$\mathbf{M}_{2gu}^n \equiv \frac{1}{\mathbf{D}_g^n} \left(\mathbf{R}_{2gu}^n \frac{60}{(\lambda_g^n \mathbf{a}_u^n)^2} - 3 \frac{\mathbf{a}_u^n}{35} \right), \quad (4.2.3.18)$$

$$\mathbf{R}_{2gu}^n \equiv \frac{\beta_{2gu}^n}{\hat{\mathbf{C}}_{gu}^n} + \frac{\mathbf{a}_u^n}{5}, \quad (4.2.3.19)$$

$$\beta_{2gu}^n \equiv \frac{12}{a_u^n} C_{gu}^n - \frac{2}{\gamma_g^n} \left(1 - \frac{12}{(a_u^n)^2 \lambda_g^n} \right) S_{gu}^n, \quad (4.2.3.20)$$

$$L_{2gu}^n \equiv \beta_{2gu}^n \frac{(\omega_{gu}^{+n} - \bar{\phi}_g^n)}{\hat{C}_{gu}^n} - b_{2gu}^n \frac{R_{2gu}^n}{\lambda_g^n}, \quad (4.2.3.21)$$

e

$$\omega_{gu}^{+n} \equiv (\bar{J}_{gur}^{+n} + \bar{J}_{gur}^{-n}) / f_{gur}^n + (\bar{J}_{gul}^{+n} + \bar{J}_{gul}^{-n}) / f_{gul}^n. \quad (4.2.3.22)$$

4.2.4 Utilização dos Coeficientes do NEM para o cálculo dos coeficientes de $Q_{gu}^n(u)$

Nesta seção, é mostrada a aplicação dos coeficientes primários e secundários do NEM para a obtenção dos coeficientes presentes na expansão polinomial de quarto grau de $Q_{gu}^n(u)$, a qual aproxima os termos de fonte e espalhamento da equação da difusão integrada transversalmente segundo o método nodal semi-analítico.

Através da equação (4.2), pode-se fazer uma relação entre os coeficientes da expansão de $Q_{gu}^n(u)$ do método nodal semi-analítico e os coeficientes determinados no NEM, substituindo a função $\bar{\Psi}_{gu}^n(u)$ pela expansão polinomial utilizada no NEM como solução da equação da difusão de nêutrons integrada transversalmente. A equação a seguir representa esta aplicação.

$$\sum_{k=0}^4 q_{kgu}^n h_k(u/a_u^n) = \begin{cases} \frac{1}{keff} \sum_{g'=1}^2 v \Sigma_{fg'}^n \bar{\Psi}_{g'u}^n(u) & ; \text{para } g = 1 \\ \bar{\Sigma}_{21}^n \bar{\Psi}_{1u}^n(u) & ; \text{para } g = 2 \end{cases} \quad (4.2.4.1)$$

onde

$$\bar{\Psi}_{gu}^n(u) \equiv \sum_{k=0}^4 \rho_{kgu}^n h_k(u/a_u^n) \quad ; k = 0,1,2,3,4 \quad (4.2.4.2)$$

e os coeficientes ρ_{kgu}^n representam os coeficientes da expansão polinomial utilizada no NEM para aproximar os fluxos médios nas faces dos nodos já calculados no capítulo 2.

Substituindo a equação (4.2.4.2) na equação (4.2.4.1) e identificando os termos de mesma ordem polinomial, segue que

$$q_{kgu}^n = \begin{cases} \frac{1}{\text{keff}} \sum_{g'=1}^2 v \Sigma_{fg'}^n \rho_{kgu}^n & ; \text{para } g = 1 \\ \bar{\Sigma}_{21}^n \rho_{k1u}^n & ; \text{para } g = 2. \end{cases} \quad 4.2.4.3$$

Concluindo, assim, a utilização dos coeficientes do NEM para a determinação dos coeficientes da expansão de $Q_{gu}^n(u)$.

4.3 Cálculo das Correntes Parciais de Saída

Uma vez determinados todos os coeficientes pertencentes à solução da equação da difusão integrada transversalmente, pode-se então calcular as correntes parciais de saída nas faces dos nodos.

O cálculo das correntes parciais será realizado com base na Lei de Fick, que é representada através da equação a seguir:

$$\bar{J}_{gus}^{+n} - \bar{J}_{gus}^{-n} = -\bar{D}_g^n \frac{d}{du} \bar{\Psi}_{gu}^n(u) \Big|_{u=u_n^s} \quad ; s = l, r. \quad (4.3.1)$$

Mas

$$\begin{aligned} \frac{d}{du} \bar{\Psi}_{gu}^n(u) &= \gamma_g^n A_{gu}^n \cosh(\gamma_g^n \{u - a_u^n / 2\}) + \gamma_g^n B_{gu}^n \sinh(\gamma_g^n \{u - a_u^n / 2\}) + \\ &+ \sum_{k=1}^4 c_{kgu}^n \frac{d}{du} h_k(u/a_u^n) . \end{aligned} \quad (4.3.2)$$

Para $s = l$, tem-se que

$$\left. \frac{d}{du} \bar{\Psi}_{gu}^n(u) \right|_{u=u_s^n} = \gamma_g^n C_{gu}^n A_{gu}^n - \gamma_g^n S_{gu}^n B_{gu}^n + \frac{1}{a_u^n} (2c_{1gu}^n + 6c_{2gu}^n - 6c_{3gu}^n + 6c_{4gu}^n) . \quad (4.3.3)$$

E para $s = r$, tem-se que

$$\left. \frac{d}{du} \bar{\Psi}_{gu}^n(u) \right|_{u=u_s^n} = \gamma_g^n C_{gu}^n A_{gu}^n + \gamma_g^n S_{gu}^n B_{gu}^n + \frac{1}{a_u^n} (2c_{1gu}^n - 6c_{2gu}^n - 6c_{3gu}^n - 6c_{4gu}^n) , \quad (4.3.4)$$

onde S_{gu}^n e C_{gu}^n já foram definidos anteriormente nas equações (4.1.1.7) e (4.1.1.8).

Agora, substituindo as equações (4.1.1.9) e (4.1.1.10) na equação (4.3.1), obtêm-se as seguintes equações para as faces esquerda e direita, respectivamente:

$$\begin{aligned} \bar{J}_{gul}^{+n} - \bar{J}_{gul}^{-n} &= -t_{gu}^n (\bar{J}_{gur}^{+n} + \bar{J}_{gur}^{-n}) / f_{gur}^n + t_{gu}^n (\bar{J}_{gul}^{+n} + \bar{J}_{gul}^{-n}) / f_{gul}^n + (t_{gu}^n - 2D_{gu}^n) c_{1gu}^n + \\ &+ \hat{t}_{gu}^n (\bar{J}_{gur}^{+n} + \bar{J}_{gur}^{-n}) / f_{gur}^n + \hat{t}_{gu}^n (\bar{J}_{gul}^{+n} + \bar{J}_{gul}^{-n}) / f_{gul}^n + (\hat{t}_{gu}^n - 6D_{gu}^n) c_{2gu}^n - \\ &- \hat{t}_{gu}^n \bar{\phi}_g^n + (6D_{gu}^n) (c_{3gu}^n - c_{4gu}^n) \end{aligned} \quad (4.3.5)$$

e

$$\begin{aligned} \bar{J}_{gur}^{+n} - \bar{J}_{gur}^{-n} &= -t_{gu}^n (\bar{J}_{gur}^{+n} + \bar{J}_{gur}^{-n}) / f_{gur}^n + t_{gu}^n (\bar{J}_{gul}^{+n} + \bar{J}_{gul}^{-n}) / f_{gul}^n + (t_{gu}^n - 2D_{gu}^n) c_{1gu}^n - \\ &- \hat{t}_{gu}^n (\bar{J}_{gur}^{+n} + \bar{J}_{gur}^{-n}) / f_{gur}^n - \hat{t}_{gu}^n (\bar{J}_{gul}^{+n} + \bar{J}_{gul}^{-n}) / f_{gul}^n - (\hat{t}_{gu}^n - 6D_{gu}^n) c_{2gu}^n + , \\ &+ \hat{t}_{gu}^n \bar{\phi}_g^n + (6D_{gu}^n) (c_{3gu}^n + c_{4gu}^n) \end{aligned} \quad (4.3.6)$$

onde:

$$t_{gu}^n \equiv \gamma_g^n \bar{D}_g^n C_{gu}^n / S_{gu}^n \quad (4.3.7)$$

$$\hat{\mathbf{t}}_{\text{gu}}^n \equiv \gamma_g^n \bar{\mathbf{D}}_g^n \mathbf{S}_{\text{gu}}^n / \hat{\mathbf{C}}_{\text{gu}}^n \quad (4.3.8)$$

$$\mathbf{D}_{\text{gu}}^n \equiv \bar{\mathbf{D}}_g^n / \mathbf{a}_u^n. \quad (4.3.9)$$

Colocando os termos comuns em evidência, as equações (4.3.5) e (4.3.6) podem ser reescritas nas seguintes formas.

$$\bar{\mathbf{J}}_{\text{gul}}^{+n} - \bar{\mathbf{J}}_{\text{gul}}^{-n} = -\mathbf{b}_{\text{gur}}^{-n} (\bar{\mathbf{J}}_{\text{gur}}^{+n} + \bar{\mathbf{J}}_{\text{gur}}^{-n}) + \mathbf{b}_{\text{gul}}^{+n} (\bar{\mathbf{J}}_{\text{gul}}^{+n} + \bar{\mathbf{J}}_{\text{gul}}^{-n}) - \hat{\mathbf{t}}_{\text{gu}}^n \bar{\phi}_g^n + \sum_{k=1}^4 \theta_{\text{kgu}}^n \mathbf{c}_{\text{kgu}}^n \quad (4.3.10)$$

e

$$\bar{\mathbf{J}}_{\text{gur}}^{+n} - \bar{\mathbf{J}}_{\text{gur}}^{-n} = -\mathbf{b}_{\text{gul}}^{+n} (\bar{\mathbf{J}}_{\text{gul}}^{+n} + \bar{\mathbf{J}}_{\text{gul}}^{-n}) + \mathbf{b}_{\text{gur}}^{-n} (\bar{\mathbf{J}}_{\text{gur}}^{+n} + \bar{\mathbf{J}}_{\text{gur}}^{-n}) + \hat{\mathbf{t}}_{\text{gu}}^n \bar{\phi}_g^n + \sum_{k=1}^4 \hat{\theta}_{\text{kgu}}^n \mathbf{c}_{\text{kgu}}^n, \quad (4.3.11)$$

onde definimos

$$\mathbf{b}_{\text{gur}}^{-n} \equiv (\mathbf{t}_{\text{gu}}^n - \hat{\mathbf{t}}_{\text{gu}}^n) / \mathbf{f}_{\text{gur}}^n \quad (4.3.12)$$

$$\mathbf{b}_{\text{gul}}^{-n} \equiv (\mathbf{t}_{\text{gu}}^n - \hat{\mathbf{t}}_{\text{gu}}^n) / \mathbf{f}_{\text{gul}}^n \quad (4.3.13)$$

$$\mathbf{b}_{\text{gur}}^{+n} \equiv (\mathbf{t}_{\text{gu}}^n + \hat{\mathbf{t}}_{\text{gu}}^n) / \mathbf{f}_{\text{gur}}^n \quad (4.3.14)$$

$$\mathbf{b}_{\text{gul}}^{+n} \equiv (\mathbf{t}_{\text{gu}}^n + \hat{\mathbf{t}}_{\text{gu}}^n) / \mathbf{f}_{\text{gul}}^n \quad (4.3.15)$$

$$\theta_{\text{kgu}}^n \equiv \begin{cases} \mathbf{t}_{\text{gu}}^n - 2\mathbf{D}_{\text{gu}}^n & ; \text{para } k = 1 \\ \hat{\mathbf{t}}_{\text{gu}}^n - 6\mathbf{D}_{\text{gu}}^n & ; \text{para } k = 2 \\ 6\mathbf{D}_{\text{gu}}^n & ; \text{para } k = 3 \\ -6\mathbf{D}_{\text{gu}}^n & ; \text{para } k = 4 \end{cases} \quad (4.3.16)$$

$$\hat{\theta}_{k\text{gu}}^n \equiv \begin{cases} \theta_{1\text{gu}}^n & ; \text{para } k = 1 \\ -\theta_{2\text{gu}}^n & ; \text{para } k = 2 \\ \theta_{3\text{gu}}^n & ; \text{para } k = 3 \\ -\theta_{4\text{gu}}^n & ; \text{para } k = 4. \end{cases} \quad (4.3.17)$$

Evidenciando as correntes parciais nas equações (4.3.10) e (4.3.11), são obtidas as seguintes equações:

$$-(1 + b_{\text{gul}}^{+n})\bar{J}_{\text{gul}}^{-n} + b_{\text{gur}}^{-n}\bar{J}_{\text{gur}}^{+n} = -(1 - b_{\text{gul}}^{+n})\bar{J}_{\text{gul}}^{+n} - b_{\text{gur}}^{-n}\bar{J}_{\text{gur}}^{-n} - \hat{t}_{\text{gu}}^n \bar{\phi}_{\text{g}}^n + \sum_{k=1}^4 \theta_{k\text{gu}}^n c_{k\text{gu}}^n \quad (4.3.18)$$

$$-b_{\text{gul}}^{-n}\bar{J}_{\text{gul}}^{-n} + (1 + b_{\text{gur}}^{+n})\bar{J}_{\text{gur}}^{+n} = b_{\text{gul}}^{-n}\bar{J}_{\text{gul}}^{+n} + (1 - b_{\text{gur}}^{+n})\bar{J}_{\text{gur}}^{-n} + \hat{t}_{\text{gu}}^n \bar{\phi}_{\text{g}}^n + \sum_{k=1}^4 \hat{\theta}_{k\text{gu}}^n c_{k\text{gu}}^n, \quad (4.3.19)$$

através das quais obtêm-se as seguintes expressões para as correntes parciais de saída nas faces dos nodos.

Para a face esquerda

$$\bar{J}_{\text{gul}}^{-n} = A_{0\text{gul}}^n \bar{\phi}_{\text{g}}^n + A_{1\text{gul}}^n \bar{J}_{\text{gul}}^{+n} + A_{2\text{gul}}^n \bar{J}_{\text{gur}}^{-n} + \sum_{k=1}^4 B_{k\text{gul}}^n c_{k\text{gu}}^n, \quad (4.3.20)$$

onde

$$A_{0\text{gul}}^n \equiv (1 + b_{\text{gur}}^{-n} + b_{\text{gur}}^{+n}) \hat{t}_{\text{gu}}^n / \delta_{\text{gu}}^n \quad (4.3.21)$$

$$A_{1\text{gul}}^n \equiv ((1 - b_{\text{gul}}^{+n})(1 + b_{\text{gur}}^{+n}) + b_{\text{gul}}^{-n} b_{\text{gur}}^{-n}) \delta_{\text{gu}}^n \quad (4.3.22)$$

$$A_{2\text{gul}}^n \equiv 2b_{\text{gur}}^{-n} / \delta_{\text{gu}}^n \quad (4.3.23)$$

$$B_{k\text{gul}}^n \equiv (b_{\text{gur}}^{-n} \hat{\theta}_{k\text{gu}}^n - (1 + b_{\text{gur}}^{+n}) \theta_{k\text{gu}}^n) \quad (4.3.24)$$

$$\delta_{\text{gu}}^n \equiv (1 + b_{\text{gul}}^{+n})(1 + b_{\text{gur}}^{+n}) - b_{\text{gul}}^{-n} b_{\text{gur}}^{-n} \quad (4.3.25)$$

Para a face direita

$$\bar{J}_{gur}^{+n} = A_{0gur}^n \bar{\phi}_g^n + A_{1gur}^n \bar{J}_{gul}^{+n} + A_{2gur}^n \bar{J}_{gur}^{-n} + \sum_{k=1}^4 B_{kgur}^n c_{kgu}^n \quad (4.3.26)$$

onde:

$$A_{0gur}^n \equiv (1 + b_{gul}^{-n} + b_{gul}^{+n}) \hat{t}_{gu}^n / \delta_{gu}^n \quad (4.3.27)$$

$$A_{1gur}^n \equiv 2b_{gul}^{-n} / \delta_{gu}^n \quad (4.3.28)$$

$$A_{2gul}^n \equiv [(1 - b_{gur}^{+n})(1 + b_{gul}^{+n}) + b_{gul}^{-n} b_{gur}^{-n}] / \delta_{gu}^n \quad (4.3.29)$$

$$B_{kgur}^n = [(1 + b_{gul}^{+n}) \hat{\theta}_{kgu}^n - b_{gul}^{-n} \theta_{kgu}^n] / \delta_{gu}^n \quad (4.3.30)$$

Com a obtenção das correntes parciais de saída nas faces dos nodos, pode-se utilizar a equação de balanço nodal para o cálculo do fluxo médio nodal de nêutrons, conforme será detalhado na próxima seção deste capítulo.

4.4 Cálculo do Fluxo Médio Nodal pelo Método Nodal Semi-Analítico

Substituindo a equação (2.1.9) na equação (2.1.2), pode-se reescrever a equação de balanço nodal na seguinte forma para dois grupos de energia:

$$\sum_{u=x,y,z} [(\bar{J}_{gur}^{+n} - \bar{J}_{gur}^{-n}) - (\bar{J}_{gul}^{+n} - \bar{J}_{gul}^{-n})] / a_u^n + \bar{\Sigma}_{Rg}^n \bar{\phi}_g^n = \frac{1}{k_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 \nu \bar{\Sigma}_{fg'}^n \bar{\phi}_{g'}^n + \sum_{g'=1}^2 \bar{\Sigma}_{gg'}^n \bar{\phi}_{g'}^n \quad (4.4.1)$$

Agora, substituindo as equações que determinam as correntes parciais de saída do NEM semi-analítico, ou seja, as equações (4.3.20) e (4.3.26) na equação (4.4.1), obtém-se que:

$$\begin{aligned}
& \sum_{u=x,y,z} (A_{1gur}^n \bar{J}_{gul}^{+n} + A_{2gur}^n \bar{J}_{gur}^{-n} + \sum_{k=1}^4 B_{kgur}^n c_{kgu}^n + A_{1gul}^n \bar{J}_{gul}^{+n} + A_{2gul}^n \bar{J}_{gur}^{-n} + \sum_{k=1}^4 B_{kgul}^n c_{kgu}^n) / a_u^n + \\
& + \sum_{u=x,y,z} [(A_{0gur}^n + A_{0gul}^n) \bar{\phi}_g^n - (\bar{J}_{gur}^{-n} + \bar{J}_{gul}^{+n})] / a_u^n + \bar{\Sigma}_{Rg}^n \bar{\phi}_g^n = \frac{1}{k_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 \nu \bar{\Sigma}_{fg'}^n \bar{\phi}_{g'}^n + \sum_{g'=1}^2 \bar{\Sigma}_{gg'}^n \bar{\phi}_{g'}^n
\end{aligned} \tag{4.4.2}$$

com o índice g indicando os grupos de energia 1 e 2.

A equação (4.4.2) pode ser reescrita na seguinte forma matricial em função dos dois grupos de energia.

$$\begin{bmatrix} m_{11}^n & m_{12}^n \\ m_{21}^n & m_{22}^n \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \bar{\phi}_1^n \\ \bar{\phi}_2^n \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} E_1^n \\ E_2^n \end{bmatrix}, \tag{4.4.3}$$

onde:

$$E_g^n \equiv \sum_{u=x,y,z} \left[(1 - A_{1gul}^n - A_{1gur}^n) \bar{J}_{gul}^{+n} + (1 - A_{2gul}^n - A_{2gur}^n) \bar{J}_{gur}^{-n} - \sum_{k=1}^4 (B_{kgul}^n + B_{kgur}^n) c_{kgu}^n \right] / a_u^n, \tag{4.4.4}$$

$$m_{gg}^n \equiv \bar{\Sigma}_{Rg}^n + \sum_{u=x,y,z} (A_{0gul}^n + A_{0gur}^n) / a_u^n - \frac{1}{k_{eff}} \chi_g \nu \bar{\Sigma}_f^g; \quad g = 1, 2, \tag{4.4.5}$$

e

$$m_{gg'}^n \equiv -\frac{1}{k_{eff}} \chi_{g'} \nu \bar{\Sigma}_{fg'}^n - \bar{\Sigma}_{gg'}^n; \quad g' \neq g. \tag{4.4.6}$$

Então, resolvendo-se o sistema dado pela equação (4.4.3) obtêm-se os fluxos médios nodais.

5 Esquema Iterativo do Método Nodal Semi-Analítico

O esquema iterativo do método nodal semi-analítico é baseado no mesmo modelo utilizado pelo NEM, representado na Figura 1. No entanto, a rotina de varredura do método nodal semi-analítico difere do NEM com respeito ao conteúdo e seqüência de chamada das rotinas de cálculo. Essa diferença se dá em função da metodologia utilizada para os cálculos dos coeficientes da expansão de $Q_{gu}^n(u)$ e da solução analítica de $\bar{\psi}_{gu}^n(u)$ pelo método nodal semi-analítico.

5.1 Varredura do Método Nodal Semi-Analítico

No método nodal semi-analítico são aplicadas três metodologias distintas para o cálculo dos coeficientes da expansão de $Q_{gu}^n(u)$, como visto no capítulo anterior.

Nas duas primeiras metodologias (uso das derivadas e técnica de resíduos ponderados) tanto os coeficientes presentes na expansão de $Q_{gu}^n(u)$, quanto os coeficientes presentes na parte particular da solução analítica da equação da difusão integrada transversalmente foram determinados dentro de uma mesma rotina de cálculo e, com isso, a rotina de varredura correspondente a esses casos pode ser representada pelo esquema mostrado na Figura 4.

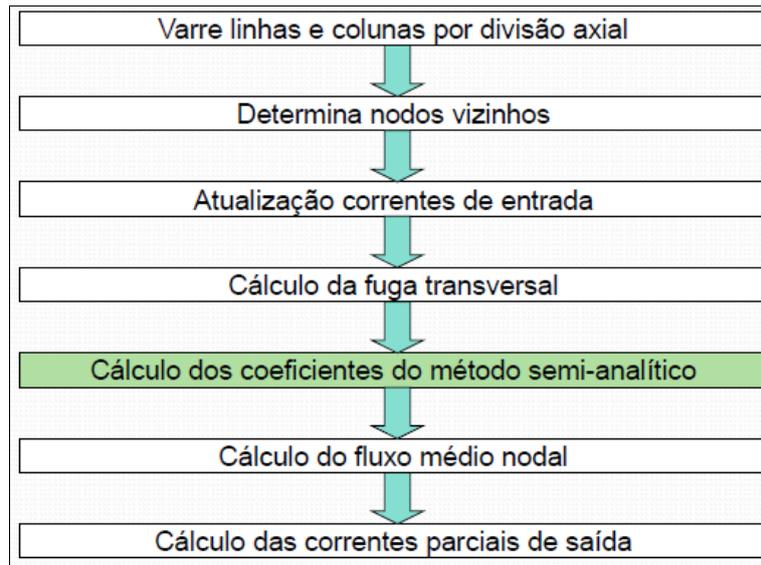


Figura 4 - Esquema de varredura do método semi-analítico para os casos das derivadas nas faces e técnica de resíduos ponderados.

É importante observar que, nos casos descritos acima, a rotina de cálculo dos coeficientes do método nodal semi-analítico é chamada após a rotina de cálculo das fugas transversais na rotina de varredura, uma vez que alguns desses coeficientes dependem dos coeficientes que são determinados na aproximação do termo de fuga transversal, presente na equação da difusão integrada transversalmente.

No caso da determinação dos coeficientes da expansão de $Q_{gu}^n(u)$ através da utilização dos coeficientes primários e secundários do NEM, foi utilizado o mesmo esquema de varredura original do NEM, porém com a adição de uma rotina de cálculo dos coeficientes da expansão de $Q_{gu}^n(u)$ e os da expansão polinomial, ou seja, os c_{kgu}^n presentes na solução analítica. Neste caso, tal rotina é chamada após ser chamada a rotina de determinação dos coeficientes secundários na seqüência de varredura do NEM. A Figura 5 ilustra o esquema da rotina de varredura do método nodal semi-analítico para este caso.

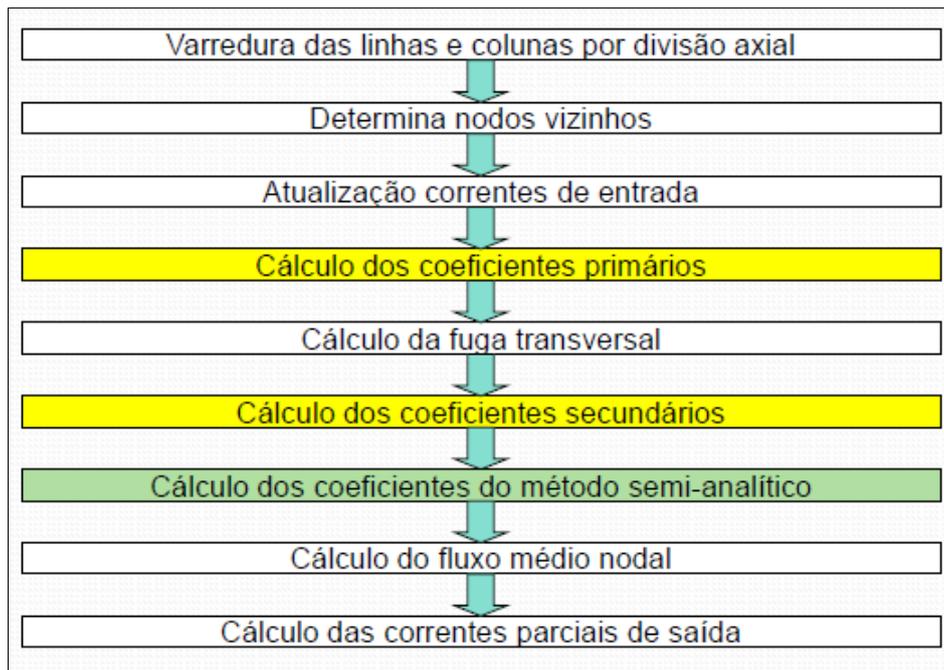


Figura 5 - Varredura do método semi-analítico, utilizando coeficientes do NEM original

6 Apresentação e Análise de Resultados

Neste capítulo são apresentados os resultados obtidos com a utilização das três propostas de cálculo dos coeficientes do método nodal semi-analítico. Esses resultados serão comparados com os resultados obtidos através da aplicação do NEM. Os cálculos foram efetuados com dados de entrada e valores de referência para dois grupos de energia, referentes a dois diferentes modelos tridimensionais conhecidos de núcleo de reator PWR. O primeiro é o modelo de um reator benchmark fornecido pela IAEA (International Atomic Energy Agency) e o segundo é o reator LMW (Langenburch, Maurer e Werner, 1977).

Em virtude da utilização de três formas distintas para o cálculo dos coeficientes pertencentes à expansão polinomial de $Q_{gu}^n(u)$, foram gerados três conjuntos de valores para os fatores de potência nos núcleos do reator IAEA e do LMW e para o fator de multiplicação efetivo (Keff) no caso do reator IAEA. Na seqüência, primeiro são mostrados os resultados gerados pelo NEM e, em seguida os gerados pelas três variações do método nodal semi-analítico com relação aos cálculos de seus coeficientes para ambos os reatores de referência.

6.1 Reator PWR (IAEA)

Neste modelo, o núcleo do reator possui uma altura ativa de 340 cm para os elementos combustíveis, divididos em 1311 nodos. As dimensões radiais de cada elemento combustível são de 20 cm. Os nodos têm dimensões definidas como as larguras dos elementos combustíveis no plano horizontal e 20 cm na direção axial.

A Tabela 1 mostra os dados disponibilizados pela IAEA com os valores referentes às seções de choque de absorção, fissão, coeficiente de difusão e seção de choque de espalhamento para cada um dos dois grupos energéticos.

Tabela 1 - Dados nucleares para um reator PWR 3-D fornecidos pela IAEA.

Composição material do Nodo	Grupo de energia	Σ_{ag} (cm ⁻¹)	$\nu\Sigma_{fg}$ (cm ⁻¹)	D_g (cm)	$\Sigma_{\substack{gg' \\ g' \neq g}}$ (cm ⁻¹)
Combustível 1	Grupo 1	0.01	0.0	1.5	0.02
	Grupo 2	0.08	0.135	0.4	0.0
Combustível 1+barra de controle	Grupo 1	0.01	0.0	1.5	0.02
	Grupo 2	0.13	0.135	0.4	0.0
Combustível 2	Grupo 1	0.01	0.0	1.5	0.02
	Grupo 2	0.085	0.135	0.4	0.0
Refletor	Grupo 1	0.0	0.0	2.0	0.04
	Grupo 2	0.01	0.0	0.3	0.0
Refletor + Barra de Controle	Grupo 1	0.0	0.0	2.0	0.04
	Grupo 2	0.055	0.0	0.3	0.0

Os cálculos foram realizados utilizando simetria de um quarto de núcleo, cuja configuração é representada a seguir na Figura 6.

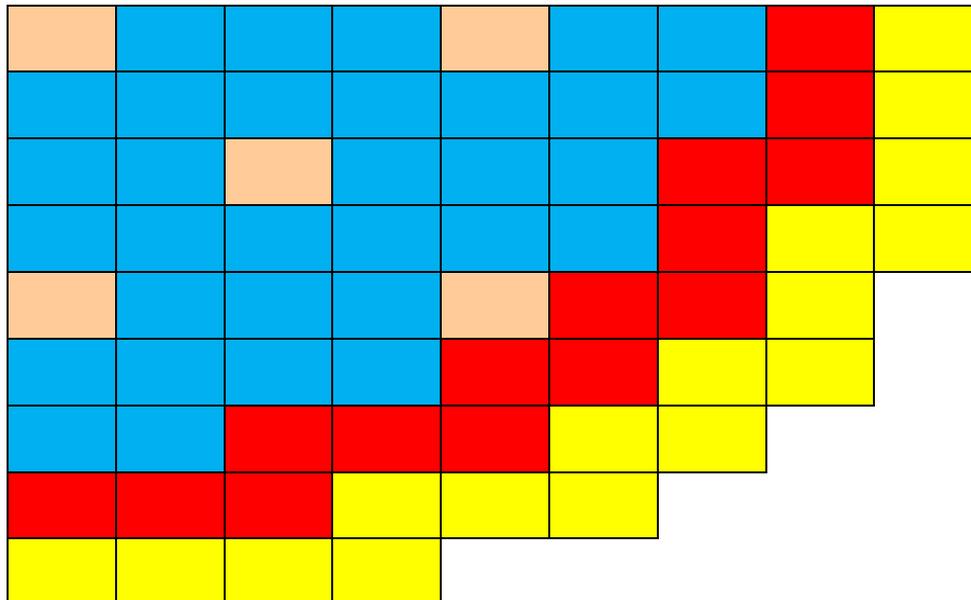


Figura 6 - Mapa de um quarto de núcleo do IAEA de acordo com os tipos de nodo

Na Figura 6, os nodos compostos por refletor com barra de controle não aparecem, uma vez que a altura do núcleo utilizada corresponde apenas à altura efetiva de combustível (altura ativa).

O fator de multiplicação de referência fornecido pela IAEA para este reator é de 1,029003, enquanto que os fatores de potência de referência para cada elemento combustível são mostrados na Tabela 2.

Tabela 2 - Fatores de potência de referência para um quarto de núcleo do IAEA

0.729	1.283	1.423	1.195	0.610	0.953	0.958	0.773
1.283	1.398	1.432	1.291	1.072	1.055	0.974	0.753
1.423	1.432	1.369	1.311	1.181	1.088	0.997	0.707
1.195	1.291	1.311	1.179	0.972	0.923	0.864	0.0
0.610	1.072	1.181	0.972	0.475	0.699	0.608	0.0
0.953	1.055	1.088	0.923	0.699	0.597	0.0	0.0
0.958	0.974	0.997	0.864	0.608	0.0	0.0	0.0
0.773	0.753	0.707	0.0	0.0	0.0	0.0	0.0

O cálculo dos desvios percentuais utilizado na comparação dos resultados mostrados nesse capítulo para ambos os reatores é realizado da seguinte maneira:

$$\text{Desvio} = 100 \times \left[\frac{\text{valor calculado}}{\text{valor referência}} - 1 \right], \quad (6.1.1)$$

onde os valores calculados serão o fator de multiplicação efetivo (Keff) ou os fatores de potência dos elementos combustíveis.

Para a relação entre o tempo de execução computacional para cada metodologia de cálculo do método nodal semi-analítico e o tempo de execução computacional para o NEM, é feita a razão entre o tempo para cada uma e o tempo para com o NEM sempre utilizando o mesmo processador.

6.1.1 Resultados gerados com o NEM para o Reator IAEA

O fator de multiplicação obtido com a aplicação do NEM é de 1,029004, apresentando um desvio de 0,0001%.

O NEM aplicado ao reator PWR da IAEA gera, para os fatores de potência, os valores e desvios com relação aos valores de referência mostrados na Tabela 3, sendo a célula em vermelho o elemento no qual o fator de potência possui o maior desvio percentual (0,90%).

Tabela 3 - Fatores de potência e seus desvios, obtidos com a aplicação do NEM.

Fator	0.730	1.285	1.430	1.196	0.610	0.953	0.956	0.772
Desvio	0.19	0.18	0.47	0.12	0.04	-0.02	-0.17	-0.19
Fator	1.285	1.403	1.436	1.295	1.073	1.055	0.971	0.750
Desvio	0.18	0.32	0.29	0.32	0.06	-0.01	-0.28	-0.40
Fator	1.430	1.436	1.370	1.314	1.184	1.088	0.991	0.708
Desvio	0.47	0.29	0.09	0.25	0.26	-0.02	-0.56	0.20
Fator	1.196	1.295	1.314	1.181	0.971	0.920	0.862	
Desvio	0.12	0.32	0.25	0.20	-0.06	-0.30	-0.24	
Fator	0.610	1.073	1.184	0.971	0.474	0.693	0.608	
Desvio	0.04	0.06	0.26	-0.06	-0.16	-0.90	0.07	
Fator	0.953	1.055	1.088	0.920	0.693	0.595		
Desvio	-0.02	-0.01	-0.02	-0.30	-0.90	-0.37		
Fator	0.956	0.971	0.991	0.862	0.608			
Desvio	-0.17	-0.28	-0.56	-0.24	0.07			
Fator	0.772	0.750	0.708					
Desvio	-0.19	-0.40	0.20					

6.1.2 Resultados para o Reator IAEA com a Aplicação das Derivadas no cálculo dos coeficientes de terceiro e quarto graus de $Q_{gu}^n(u)$

Com relação ao tempo computacional, esta aplicação gastou 1,88 vezes o tempo gasto pelo NEM. Já com relação ao resultado obtido para o fator de multiplicação efetivo (K_{eff}), o método nodal semi-analítico utilizando as derivadas obtém o valor de 1,029880, gerando um desvio de 0,0852%, em relação ao valor de referência. A Tabela 4 mostra os valores obtidos para os fatores de potência e seus desvios com relação aos valores referência.

Tabela 4: Fatores de Potência e seus desvios, utilizando o cálculo com a derivada.

Fator	0.704	1.202	1.344	1.138	0.616	0.967	1.009	0.814
Desvio	-3.46	-6.34	-5.58	-4.75	0.99	1.46	5.32	5.34
Fator	1.202	1.313	1.355	1.236	1.051	1.068	1.025	0.802
Desvio	-6.34	-6.03	-5.39	-4.23	-1.98	1.21	5.23	6.47
Fator	1.344	1.355	1.305	1.266	1.167	1.108	1.037	0.738
Desvio	-5.58	-5.39	-4,71	-3.42	-1.21	1.84	3.97	4.43
Fator	1.138	1.236	1.266	1.151	0.969	0.959	0.900	
Desvio	-4.75	-4.23	-3.42	-2.41	-0.34	3.86	4.21	
Fator	0.616	1.051	1.167	0.969	0.501	0.737	0.633	
Desvio	0.99	-1.98	-1.21	-0.34	5.56	5.38	4.06	
Fator	0.967	1.068	1.108	0.959	0.737	0.616		
Desvio	1.46	1.21	1.84	3.86	5.38	3.23		
Fator	1.009	1.025	1.037	0.900	0.633			
Desvio	5.32	5.23	3.97	4.21	4.06			
Fator	0.814	0.802	0.738					
Desvio	5.34	6.47	4.43					

A célula em vermelho na tabela 4 contém o maior desvio gerado para os fatores de potência (6,47%) com a aplicação das derivadas nos cálculos dos coeficientes do método nodal semi-analítico.

6.1.3 Resultados para o Reator IAEA com o uso da Técnica de Resíduos Ponderados no cálculo dos coeficientes de terceiro e quarto graus de $Q_{gu}^n(u)$

O tempo de cálculo computacional gasto foi 1,84 vezes o tempo gasto pelo NEM. Para o K_{eff} , o valor obtido utilizando a técnica de resíduos ponderados nos cálculos foi de 1,029134 com um desvio de 0,0127%.

Tabela 5 - Fatores de Potência e seus desvios, utilizando a Técnica de Resíduos ponderados.

Fator	0.724	1.266	1.411	1.182	0.609	0.951	0.963	0.783
Desvio	-0.71	-1.29	-0.86	-1.08	-0.14	-0.24	0.49	1.24
Fator	1.266	1.384	1.419	1.282	1.065	1.054	0.979	0.764
Desvio	-1.29	-0.97	-0.91	-0.69	-0.69	-0.10	0.50	1.49
Fator	1.411	1.419	1.356	1.303	1.177	1.089	1.001	0.724
Desvio	-0.86	-0.91	-0.95	-0.61	-0.31	0.07	0.39	2.47
Fator	1.182	1.282	1.303	1.173	0.967	0.926	0.877	
Desvio	-1.08	-0.69	-0.61	-0.49	-0.48	0.37	1.50	
Fator	0.609	1.065	1.177	0.967	0.477	0.702	0.623	
Desvio	-0.14	-0.69	-0.31	-0.48	0.51	0.39	2.40	
Fator	0.951	1.054	1.089	0.926	0.702	0.609		
Desvio	-0.24	-0.10	0.07	0.37	0.39	2.01		
Fator	0.963	0.979	1.001	0.877	0.623			
Desvio	0.49	0.50	0.39	1.50	2.40			
Fator	0.783	0.764	0.724					
Desvio	1.24	1.49	2.47					

Com relação aos desvios obtidos para os fatores de potência, o método nodal semi-analítico (caso dos resíduos ponderados) atingiu o pico máximo de desvio em 2,47%.

6.1.4 Resultados para o IAEA utilizando os Coeficientes do NEM no cálculo dos coeficientes de $Q_{gu}^n(u)$

O valor obtido para o Keff neste caso foi de 1,029672, apresentando um desvio de 0,065% com relação ao valor de referência. Com relação ao tempo computacional, esta aplicação gastou 1,87 vezes o tempo gasto pelo NEM. Com relação aos fatores de potência, os resultados são:

Tabela 6 - Fatores de Potência e seus desvios, utilizando os coeficientes do NEM.

Fator	0.711	1.240	1.382	1.164	0.608	0.958	0.981	0.796
Desvio	-2.47	-3.36	-2.89	-2.59	-0.34	0.47	2.37	2.92
Fator	1.240	1.356	1.392	1.264	1.059	1.060	0.997	0.780
Desvio	-3.36	-3.01	-2.77	-2.09	-1.21	0.48	2.39	3.54
Fator	1.382	1.392	1.334	1.288	1.172	1.097	1.016	0.730
Desvio	-2.89	-2.77	-2.53	-1.77	-0.74	0.79	1.92	3.30
Fator	1.164	1.264	1.288	1.165	0.968	0.940	0.888	
Desvio	-2.59	-2.09	-1.77	-1.21	-0.40	1.89	2.73	
Fator	0.608	1.059	1.172	0.968	0.484	0.717	0.627	
Desvio	-0.34	-1.21	-0.74	-0.40	1.93	2.59	3.14	
Fator	0.958	1.060	1.097	0.940	0.717	0.614		
Desvio	0.47	0.48	0.79	1.89	2.59	2.83		
Fator	0.981	0.997	1.016	0.888	0.627			
Desvio	2.37	2.39	1.92	2.73	3.14			
Fator	0.790	0.780	0.730					
Desvio	2.92	3.54	3.30					

Com base na Tabela 6, nota-se que o maior desvio gerado para os fatores de potência foi de 3,54% (como se evidencia nas células vermelhas).

6.1.5 Análise dos resultados obtidos para o Reator IAEA

Com base nos resultados obtidos com as três variações na metodologia utilizada para o cálculo dos coeficientes do método nodal semi-analítico no caso do reator IAEA, pode ser observado que nenhuma delas superou o NEM com relação à eficiência dos cálculos (precisão nos resultados e tempo de execução computacional).

A Tabela 7 mostra os valores obtidos para o fator de multiplicação efetivo e seu desvio com relação ao valor de referência, o tempo computacional gasto no cálculo e o maior desvio relativo aos fatores de potência com o NEM e o método nodal semi-analítico em suas três variações.

Tabela 7 - Resultados obtidos com O NEM e as três variações do método nodal semi-analítico para o reator IAEA.

Keff de referência (IAEA) 1.029003	NEM	Resíduos	Derivadas	Coef. NEM
Keff	1,029004	1,029134	1,029880	1,029555
Desvio Keff	0,0001	0,0127	0,0852	0,0536
Desvio máximo do fator de potência	0,90%	2,47%	6,47%	3,54%
Relação de tempo	1	1,84	1,88	1,87

Conforme evidenciado na Tabela 7, pode-se constatar que a proposta das derivadas para o cálculo dos coeficientes gerou os resultados mais desfavoráveis com relação ao tempo computacional e à precisão nos resultados tanto para os fatores de potência, quanto para o fator de multiplicação efetivo.

A Figura 7 mostra a relação entre os valores obtidos para o desvio do Keff, erro máximo nos fatores de potência e tempo computacional gasto nos cálculos, utilizando o NEM e o método nodal semi-analítico em suas três propostas de cálculo.

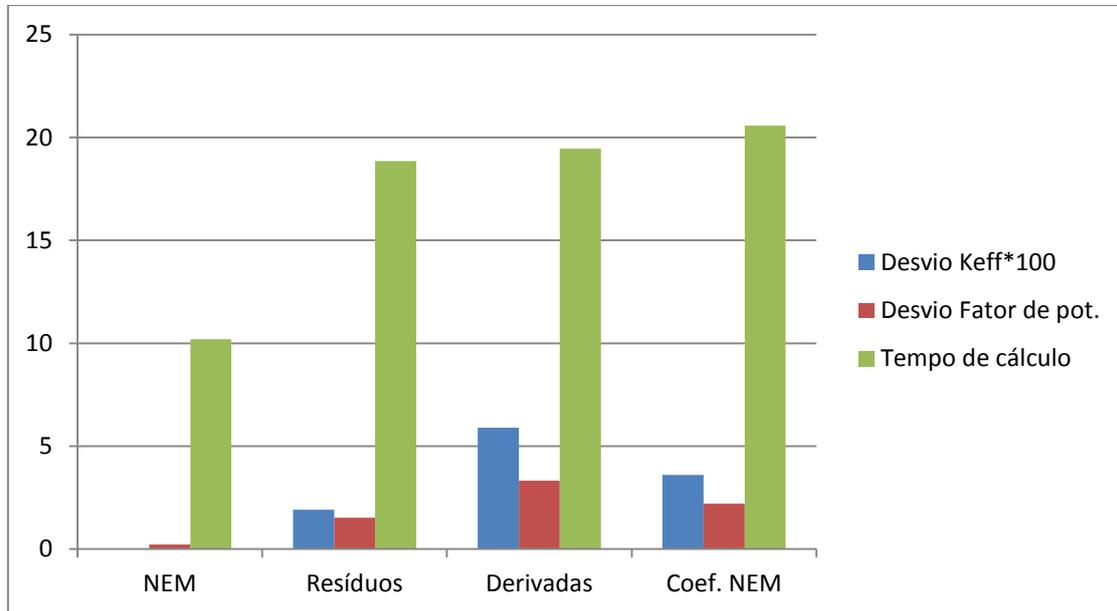


Figura 7 - relação entre os resultados obtidos para o reator IAEA com as três variações do método nodal semi-analítico e os resultados obtidos com o NEM.

Com base na Figura 7, percebe-se que a variação do método nodal semi-analítico que utiliza a técnica de resíduos ponderados para o cálculo dos coeficientes de terceiro e quarto grau da expansão de $Q_{gu}^n(u)$ é a que apresenta melhor precisão, porém possui tempo computacional elevado com relação ao NEM, mesmo sendo a mais rápida entre as três metodologias de cálculo propostas no método nodal semi-analítico.

6.2 Reator LMW

O modelo LMW de reator PWR tridimensional (Lima, et al, 2005) possui 160 cm de altura ativa nos elementos combustíveis, divididos em quatro diferentes tipos de nodos com parâmetros homogeneizados. A Tabela 8 mostra os valores de referência utilizados para cálculo com o reator LMW.

Tabela 8 - Dados nucleares homogeneizados para os quatro tipos de nodo do LMW com dois grupos de energia.

Composição material do Nodo	Grupo de energia	Σ_{ag} (cm ⁻¹)	$\nu\Sigma_{fg}$ (cm ⁻¹)	D_g (cm)	$\Sigma_{\substack{gg' \\ g' \neq g}}$ (cm ⁻¹)
Combustível 1	Grupo 1	0.01040206	0.006477691	1.423913	0.01755555
	Grupo 2	0.08766217	0.1127328	0.356306	0.0
Combustível 2	Grupo 1	0.01099263	0.007503284	1.425611	0.01717768
	Grupo 2	0.09925634	0.1378004	0.350574	0.0
Combustível 1+ Barra de Controle	Grupo 1	0.01095206	0.006477691	1.423913	0.01755555
	Grupo 2	0.09146217	0.1127328	0.356306	0.0
Refletor	Grupo 1	0.002660573	0.0	1.634227	0.02759693
	Grupo 2	0.04936351	0.0	0.264002	0.0

O reator é dividido 1170 nodos e apresenta dez subdivisões axiais. A altura dessas subdivisões é de 20 cm cada uma. A primeira e a última camada representam respectivamente o refletor inferior e o refletor superior. Com isso, a altura total do núcleo, ou seja, parte ativa e não ativa, corresponde a 200 cm.

No plano radial, o núcleo do LMW é dividido em onze partes com 20 cm de largura cada uma, em ambas as coordenadas. A configuração do núcleo com relação aos tipos de nodo é mostrada na Figura 8, onde se representa uma simetria de um quarto de núcleo e cada uma das cores das células corresponde a um tipo de nodo.

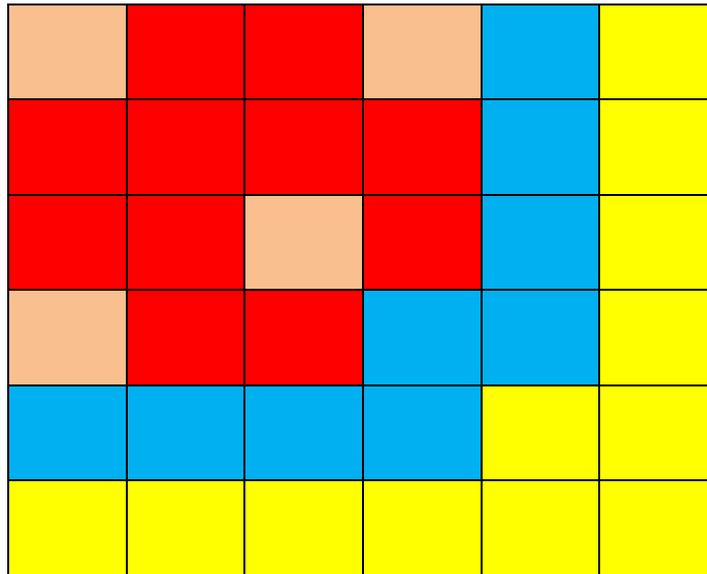


Figura 8: Distribuição dos tipos de combustíveis nos nodos do LMW para a simetria de um quarto de núcleo.

Neste reator, os fatores de potência utilizados como referência são representados na Tabela 9.

Tabela 9 - Valores referência para os fatores de potência em um quarto de núcleo do LMW

1.707	1.639	1.426	1.075	0.713
1.639	1.575	1.382	1.071	0.695
1.426	1.382	1.232	0.970	0.617
1.075	1.071	0.970	0.849	0.423
0.713	0.695	0.617	0.423	0.000

6.2.1 Resultados gerados com o NEM para o LMW

Os valores obtidos para os fatores de potência e seus desvios relativos aos valores de referência são mostrados na Tabela 10.

Tabela 10 - Fatores de potência e desvios calculados com o NEM para o reator LMW

Fator	1.706	1.637	1.424	1.076	0.714
Desvio	-0.03	-0.15	-0.12	0.05	0.15
Fator	1.637	1.572	1.380	1.071	0.697
Desvio	-0.15	-0.16	-0.12	-0.03	0.23
Fator	1.424	1.380	1.232	0.970	0.618
Desvio	-0.12	-0.12	0.04	0.00	0.18
Fator	1.076	1.071	0.970	0.850	0.424
Desvio	0.05	-0.03	0.00	0.07	0.15
Fator	0.714	0.697	0.618	0.424	0.0
Desvio	0.15	0.23	0.18	0.15	0.0

O maior desvio percentual gerado com a aplicação do NEM para o caso do reator LMW foi de 0,23%, conforme mostra a Tabela 10 nas células em vermelho. O valor do K_{eff} calculado foi de 0,999467 e servirá para referência nas aplicações das propostas de cálculo do método nodal semi-analítico.

6.2.2 Resultados para o LMW com a Aplicação das Derivadas no cálculo dos coeficientes de terceiro e quarto grau da expansão de $Q_{gu}^n(u)$

Os valores obtidos para os fatores de potência e seus desvios relativos aos valores de referência são mostrados na Tabela 11.

Tabela 11 - Fatores de potência e desvios calculados para o caso das derivadas

Fator	1.682	1.615	1.409	1.076	0.722
Desvio	-1.45	-1.49	-1.20	0.07	1.26
Fator	1.615	1.553	1.367	1.069	0.705
Desvio	-1.49	-1.42	-1.11	-0.16	1.45
Fator	1.409	1.367	1.224	0.973	0.632
Desvio	-1.20	-1.11	-0.63	0.30	2.44
Fator	1.076	1.069	0.973	0.865	0.437
Desvio	0.07	-0.16	0.30	1.92	3.33
Fator	0.722	0.705	0.632	0.437	0.0
Desvio	1.26	1.45	2.44	3.33	0.0

O maior desvio percentual gerado com a aplicação do NEM original para o caso do reator LMW foi de 3,33%, como evidenciado nas células em vermelho. Com relação ao tempo de processamento dos cálculos esta aplicação gastou 1,91 vezes o tempo gasto pelo NEM original. O valor estimado para o fator de multiplicação foi de 1,000057, apresentando um desvio de 0,0590% em relação ao K_{eff} estimado com o NEM.

6.2.3 Resultados gerados para o LMW com a Aplicação da Técnica de Resíduos Ponderados no cálculo dos coeficientes de terceiro e quarto graus da expansão de $Q_{gu}^n(u)$

Os valores obtidos para os fatores de potência e seus desvios relativos aos valores de referência são mostrados na Tabela 12.

Tabela 12 - Fatores de potência e desvios calculados para o caso dos resíduos ponderados

Fator	1.698	1.629	1.419	1.074	0.719
Desvio	-0.52	-0.61	-0.50	-0.07	0.77
Fator	1.629	1.566	1.376	1.069	0.701
Desvio	-0.61	-0.59	-0.46	-0.16	0.88
Fator	1.419	1.376	1.229	0.970	0.623
Desvio	-0.50	-0.46	-0.21	-0.04	1.01
Fator	1.074	1.069	0.970	0.853	0.429
Desvio	-0.07	-0.16	-0.04	0.52	1.52
Fator	0.719	0.701	0.623	0.429	0.0
Desvio	0.77	0.88	1.01	1.52	0.0

O maior desvio percentual gerado com a aplicação do NEM para o caso do reator LMW foi de 1,52%. Com relação ao tempo de processamento dos cálculos esta aplicação gastou 1,85 vezes o tempo gasto pelo NEM. O valor estimado para o fator de multiplicação foi de 0,999658, apresentando um desvio de 0,0191% em relação ao K_{eff} estimado com o NEM.

6.2.4 Resultados gerados para o LMW com o uso dos Coeficientes do NEM no cálculo dos coeficientes da expansão de $Q_{gu}^n(u)$

Os valores obtidos para os fatores de potência e seus desvios relativos aos valores de referência são mostrados a seguir na Tabela 13.

Tabela 13 - Fatores de potência e desvios calculados para o caso do uso dos coeficientes do NEM.

Fator	1.692	1.623	1.415	1.074	0.720
Desvio	-0.89	-0.96	-0.78	-0.07	1.03
Fator	1.623	1.561	1.372	1.069	0.703
Desvio	-0.96	-0.92	-0.71	-0.16	1.16
Fator	1.415	1.372	1.227	0.971	0.627
Desvio	-0.78	-0.71	-0.37	0.09	1.55
Fator	1.074	1.069	0.971	0.858	0.432
Desvio	-0.07	-0.16	0.09	1.07	2.21
Fator	0.720	0.703	0.627	0.432	0.0
Desvio	1.03	1.16	1.55	2.21	0.0

Como se evidencia nas células em vermelho o maior desvio percentual gerado com esta aplicação foi de 2,21% enquanto que, com relação ao tempo de processamento dos cálculos, esta aplicação gastou 2,02 vezes o tempo gasto pelo NEM original. O valor estimado para o fator de multiplicação foi de 0,999828, apresentando um desvio de 0,0361 % em relação ao Keff estimado com o NEM.

6.2.5 Análise dos resultados obtidos para o reator LMW

Os resultados obtidos com as três propostas de cálculo do método nodal semi-analítico para o caso LMW, assim como no caso do reator IAEA, não superaram os resultados obtidos com o NEM.

A Tabela 14 mostra os maiores desvios gerados no cálculo dos fatores de potência para o NEM e o método nodal semi-analítico em suas três propostas de cálculo, assim como a relação entre o tempo de processamento dos cálculos de ambos os métodos.

Tabela 14 - Resultados obtidos com O NEM e as três variações do método nodal semi-analítico para o reator LMW.

Keff referência (NEM) 0,999467	NEM	Derivadas	Resíduos	Coef. NEM
Desvio máximo do fator de potência	0.23%	3.33%	1.52%	2.21%
Desvio do Keff	0.0%	0,0590%	0,0191%	0,0361%
Relação de tempo	1	1.91	1.85	2.02

Com base na Tabela 14, percebe-se que a proposta de cálculo dos coeficientes do método nodal semi-analítico que mostra o melhor desempenho com relação à precisão dos resultados e ao tempo computacional para o LMW é a que utiliza a técnica de resíduos ponderados, assim como no caso do reator IAEA.

A Figura 9 ilustra graficamente a relação entre os resultados do NEM e os resultados de cada uma das três propostas de cálculo do método nodal semi-analítico.

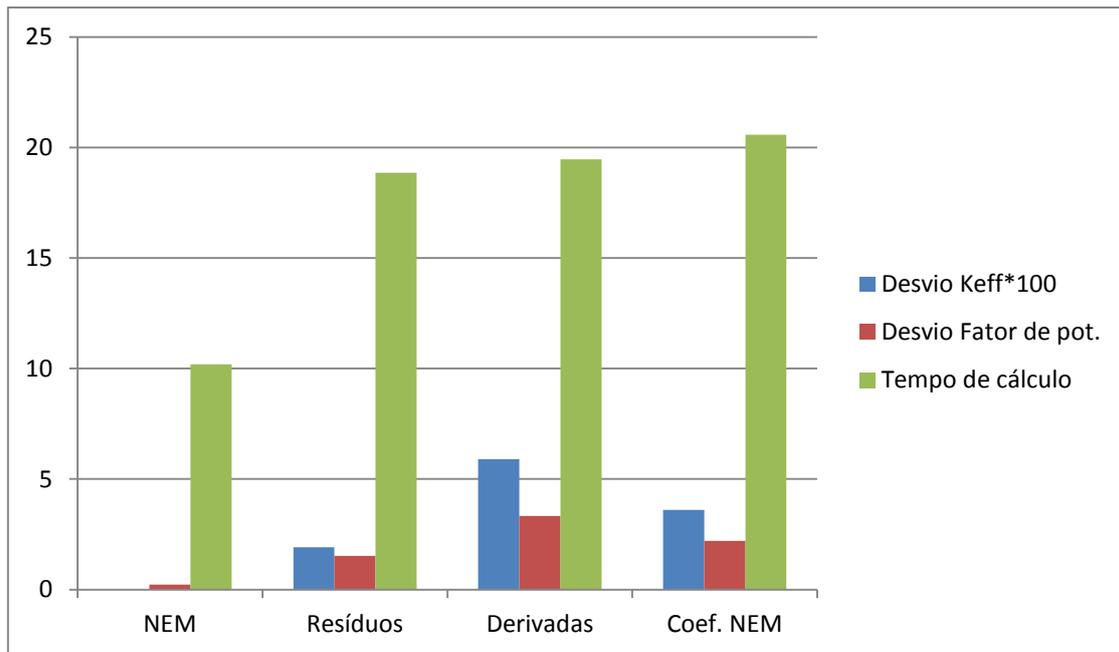


Figura 9 - relação entre os resultados obtidos para o reator IAEA com as três variações do método nodal semi-analítico e os resultados obtidos com o NEM.

De acordo com os dados ilustrados na Figura 9, pode-se perceber que, quanto à eficiência de cada uma das propostas de cálculos apresentadas com o método nodal semi-analítico, houve coerência nos resultados para ambos os modelos de núcleo de reator utilizados.

7 Conclusões e Sugestões para Estudos Futuros

Dentre as três metodologias aplicadas para o cálculo dos coeficientes da expansão polinomial que aproxima os termos de fonte pertencentes à equação da difusão de nêutrons integrada transversalmente, a que obteve os resultados mais acurados foi a que utiliza a técnica de resíduos ponderados. No entanto, esta mostra-se menos eficiente que o NEM com relação ao tempo computacional gasto nos cálculos e à precisão nos resultados obtidos, tanto para o modelo de reator PWR, quanto para o LMW. Com relação ao tempo computacional gasto, era previsto que o NEM semi-analítico fosse menos veloz que o NEM, uma vez que sua metodologia de cálculo é mais complexa, envolvendo um número bem maior de coeficientes.

Apesar de se mostrar menos eficiente que o NEM, o método nodal semi-analítico possui uma característica importante, proveniente da aproximação dos termos de fonte da equação da difusão integrada transversalmente. A aproximação desses termos acarreta no não acoplamento entre os grupos na solução da equação da difusão (caso da derivada). Isso pode gerar um desempenho satisfatório do método semi-analítico, se o mesmo for aplicado nos casos de problemas com muitos grupos de energia.

Com base na característica acima citada, pode ser sugerida a continuidade do estudo do método, visando a melhorar sua precisão e seu tempo computacional, para que o mesmo possa ser útil tanto no caso de dois quanto de vários grupos de energia.

Uma possibilidade de continuidade desse estudo está na utilização de uma metodologia diferente para o cálculo do termo de fuga transversal presente na equação da difusão integrada transversalmente, como por exemplo, o uso da

aproximação parabólica direta, DPA (sigla em Inglês), para a obtenção de seus coeficientes (Kim, et. all, 1999).

Durante o desenvolvimento das rotinas de cálculos que seriam usadas no processo iterativo, percebeu-se que se os coeficientes de terceiro e quarto graus da expansão polinomial que aproxima os termos de fonte fossem igualados a zero, o programa funcionava, o que motivou a tentativa de cálculo de tais coeficientes com as três diferentes metodologias utilizadas nesta dissertação. Com isso, pode-se sugerir também que sejam buscadas novas técnicas para o cálculo desses coeficientes, uma vez que os mesmos mostram interferir mais significativamente na precisão dos resultados obtidos.

8 Referências Bibliográficas

ALVIM, A. C. M., Métodos numéricos em Engenharia Nuclear 1 ed, Centauro, São Paulo 2007.

Benghanem, M. and Rohach F., Formulation of High Order Finite Difference Approximations to the 3-D Neutron Diffusion Equation, Annals of Nuclear Energy, vol. 14, N^o.5, pp. 227-234, 1987.

Finnemann, H., Bennowitz, F. and Wagner, M. R., Interface current techniques for multidimensional reactor calculations, Atomkernenergie, vol. 300, pp. 123-127, 1977.

Fowler, T.B.; Vondy,D.R.; Cunningha, M.G.W. Nuclear reactor core analysis code: CITATION. Oak Ridge, Tenn., Oak Ridge National Laboratory, 1971. (ORNL-TM-2496-Rev. 2).

Gamino, R.G., The Development and application of supernodal methods to PWR analysis, Ph.D. Thesis, Department of Nuclear Engineering, MIT, Cambridge, MA (May 1986).

GUIMARAES, C. S. ; MARTINEZ, Aquilino Senra ; SILVA, F. C. . Utilização do Método de Diferenças Finitas de Malha Grossa Analítico para a Solução da Equação de Difusão de Nêutrons. In: Encontro de Modelagem Computacional, 2008, Rio de Janeiro. XI Encontro de Modelagem Computacional, 2008.

Hoju Moon and Samuel H. Levine, A Fundamental Derivation of the Nodal Diffusion and Its Variation, Nuclear Science and Engineering, vol.104, pp. 112-122, 1990.

J.Duderstadt, J., J.Hamilton,L., Nuclear Reactor Analysis, 1 ed, John Wiley & Sons, 1976.

Joo, H. K., Kim, C. H., Noh, J. M. and Kim, S., A New Approach to Core-Reflector Boundary Conditions for Nodal Reactor Computations, Nuclear Science and Engineering, vol. 116, pp. 300-312, 1994.

Kim, Yeong-Il., Kim, Young-Jin, Kim, Sang-Ji and Kim, Taek-Kyum, A semi-analytic multigroup nodal method, Annals of Nuclear Energy, vol. 26, pp. 699-708, 1999.

Lawrence, R.D. and Dorning J.J., A Nodal Green's Function Method for Multidimensional Neutron Diffusion Calculations, Nuclear Science and Engineering, vol. 76, pp. 218-231, 1980.

Lima, Z.R., Silva F.C., Alvim A.C.M., Use of pseudo-harmonics method coupled with finite differences coarse mesh in the solution of fixed source problems, Annals of Nuclear Energy, vol. 32, pp. 1366-1376, 2005.

Martinez, A.S., Pereira, V. and Silva, F. C., A system for the prediction and determination of the sub-critical multiplication condition, Kerntechnik, vol. 64, n. 4, pp. 230-234, 1999.

ONO, S. Aplicação do método de elementos finitos na solução da equação da difusão em estado estacionário. São Paulo, IPEN, 1982. (Dissertação de Mestrado)

Shober, R.A., Sims, R.N. and Henry, A.F., Two Nodal Methods for Solving Time-Dependent Group Diffusion Equations, Nuclear Science and Engineering, vol. 64, pp. 582-592, 1977.

Silva, F. C. e Martinez, A. S., Aceleração do método nodal NEM usando diferenças finitas de malha grossa, VI Encontro de Modelagem Computacional, 1 a 3 de dezembro de 2003, Nova Friburgo, RJ.

Takeda, T., Sato, H. and Ono, S., An Effective Homogenization Method For Heterogeneous Assemblies, Annals of Nuclear Energy, vol. 9, pp. 509-524, 1982.

Tara M. Beam, Kostafin N. Ivanov, Anthony J. Baratta, Herbert Finemman, Nodal kinetics model upgrade in the Penn State coupled TRAC/NEM codes, Annals of Nuclear Energy, vol. 26, pp. 1205-1219, 1999.