

APLICAÇÃO DO MÉTODO DOS PSEUDO-HARMÔNICOS À CINÉTICA
MULTIDIMENSIONAL

Zelmo Rodrigues de Lima

TESE SUBMETIDA AO CORPO DOCENTE DA COORDENAÇÃO DOS
PROGRAMAS DE PÓS-GRADUAÇÃO DE ENGENHARIA DA UNIVERSIDADE
FEDERAL DO RIO DE JANEIRO COMO PARTE DOS REQUISITOS
NECESSÁRIOS PARA A OBTENÇÃO DO GRAU DE DOUTOR EM CIÊNCIAS
EM ENGENHARIA NUCLEAR.

Aprovada por:

Prof. Fernando Carvalho da Silva, D.Sc.

Prof. Antonio Carlos Marques Alvim, Ph.D.

Prof. Aquilino Senra Martinez, D.Sc.

Prof. Hermes Alves Filho, D.Sc.

Prof. Ricardo Carvalho de Barros, Ph.D.

Dr. Sérgio de Queiroz Bogado Leite, Ph.D.

RIO DE JANEIRO, RJ - BRASIL

OUTUBRO DE 2005

DE LIMA, ZELMO RODRIGUES

Aplicação do Método dos Pseudo-Harmônicos à Cinética Multidimensional [Rio de Janeiro] 2005

XVI, 127 p. 29,7 cm (COPPE/UFRJ, D.Sc., Engenharia Nuclear, 2005)

Tese - Universidade Federal do Rio de Janeiro, COPPE

1. Cinética Espacial
2. Pseudo-Harmônicos
3. Métodos de Malha Grossa

I. COPPE/UFRJ II. Título (série)

*A meu pai,
José Rodrigues de Lima,
in memoriam.*

*Dedico este trabalho
aos meus sobrinhos:
Caio, Carina, Augusto e Ludmila.*

AGRADECIMENTOS

Ao professor Fernando Carvalho da Silva, pela dedicação, pelos ensinamentos que não podem ser encontrados em livros e por sempre acreditar na realização deste trabalho.

Ao professor Antonio Carlos Marques Alvim, pelo inestimável apoio em todas as fases deste trabalho e por ter feito o melhor possível para transmitir sua experiência.

Aos professores do Programa de Engenharia Nuclear da COPPE, pelos ensinamentos transmitidos.

A todos os funcionários que trabalham no Programa de Engenharia Nuclear da COPPE, ressaltando o profissionalismo das secretárias Josevalda e Tânia.

Ao Conselho Nacional de Desenvolvimento Científico e Tecnológico (CNPq), pelo apoio financeiro, concedendo a bolsa de estudos, permitindo a realização deste trabalho.

A todos os amigos do Programa de Engenharia Nuclear, pelo companheirismo e apoio.

À Márcia A. S. Batista, pelo seu importante apoio na fase conclusiva deste trabalho.

À minha mãe, Dona Regina, sempre determinada em me ajudar, criando as condições necessárias de tranquilidade para a elaboração deste trabalho.

*"O único lugar onde o sucesso
vem antes do trabalho é no dicionário."*

*"Falta de tempo é desculpa daqueles
que perdem tempo por falta de métodos."*

Einstein

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

APLICAÇÃO DO MÉTODO DOS PSEUDO-HARMÔNICOS À CINÉTICA MULTIDIMENSIONAL

Zelmo Rodrigues de Lima

Outubro/2005

Orientadores: Fernando Carvalho da Silva

Antonio Carlos Marques Alvim

Programa: Engenharia Nuclear

A proposta deste trabalho é desenvolver um método modal com base na teoria dos pseudo-harmônicos para tratar problemas da cinética espacial. Os pseudo-harmônicos são as autofunções associadas ao operador da fuga + remoção em cada grupo de energia da equação de difusão multigrupo estacionária. O método modal desenvolvido aproxima o fluxo dependente do tempo em uma expansão em pseudo-harmônicos onde os coeficientes são dependentes do tempo. A dedução do sistema cujas soluções são os coeficientes da expansão modal é feita com auxílio de funções peso.

Para fins de comparação também é desenvolvido um método direto da cinética espacial. Este método trata a dependência espacial empregando o método de diferenças finitas de malha grossa (DFMG) acoplado com o método de expansão nodal (NEM). Na solução da parte dependente do tempo o método modal e o método direto utilizam a integração analítica da equação dos precursores e um esquema semi-implícito na equação de difusão.

Os resultados obtidos mostram que o método proposto tem uma boa acurácia.

Abstract of Thesis presented to COPPE/UFRJ as a partial fulfillment of the requirements for the degree of Doctor of Science (D.Sc.)

APPLICATION OF THE PSEUDO-HARMONICS METHOD TO THE
MULTIDIMENSIONAL KINETICS

Zelmo Rodrigues de Lima

October/2005

Advisors: Fernando Carvalho da Silva
Antonio Carlos Marques Alvim

Department: Nuclear Engineering

The proposal of this work is to develop a modal method with base on theory of the pseudo-harmonics to treat spatial kinetics problems. The pseudo-harmonics are the eigenfunctions associated with the operator of leakage + removal in each energy groups of the steady-state diffusion equation. The developed modal method approximates the time-dependent flux in an expansion in pseudo-harmonics where the coefficients are dependent of time. The deduction of the system whose solutions are the coefficients of the modal expansion is made with aid of weighting functions.

For comparison purpose a direct method of the spatial kinetics is also developed. This method treats the space dependence using the coarse-mesh finite differences (CMFD) coupled with nodal expansion method (NEM). In the solution of the time-dependent part the modal method and the direct method use the analytical integration of the equation of the precursors and a semi-implicit scheme in the diffusion equation.

The obtained results show that the proposed method has a good accuracy.

ÍNDICE DO TEXTO

CAPÍTULO 1 - INTRODUÇÃO.....	1
CAPÍTULO 2 - MÉTODOS DA TEORIA DE DIFUSÃO PARA A CINÉTICA ESPACIAL	4
INTRODUÇÃO	4
2.1 - MÉTODOS DIRETOS	4
2.1.1 - Método de Diferenças Finitas	4
2.1.2 - Métodos de Malha Grossa e Métodos Nodais	5
2.1.2.a - Métodos de Malha Grossa.....	6
2.1.2.b - Métodos Nodais	7
2.1.3 - Métodos Nodais de Integração Transversa.....	7
2.2 - MÉTODOS INDIRETOS	9
2.2.1 - Métodos de Fatoração do Espaço e Tempo.....	9
2.2.2 - Métodos Modais e de Síntese.....	10
2.3 - CONSIDERAÇÕES GERAIS SOBRE OS MÉTODOS DE INTEGRAÇÃO NO TEMPO.....	10
2.3.1 - O Método Theta	11
2.3.2 - Direções Alternadas Implícito	12
2.3.3 - O Método de Confinamento da Rigidez	13
2.3.4 - Os Métodos de Runge-Kutta Generalizados de Rosenbrock	14
2.3.5 - Integração Analítica da Equação dos Precursores	15
CAPÍTULO 3 - MÉTODO DIRETO DE SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DA CINÉTICA ESPACIAL	16
INTRODUÇÃO	16
3.1 - DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL.....	18
3.1.1 - Método de Diferenças Finitas de Malha Grossa (DFMG).....	18
3.1.2 - Equação Semi-discretizada.....	23
3.2 - DISCRETIZAÇÃO NO TEMPO.....	26
3.2.1 - Integração Analítica da Equação da Concentração dos Precursores...27	27
3.2.2 - Discretização Temporal da Equação de Nêutrons	28

3.3 - O CÓDIGO DO MÉTODO DIRETO	30
CAPÍTULO 4 - MÉTODOS MODAIS E DE SÍNTESE	33
INTRODUÇÃO	33
4.1 - APROXIMAÇÃO SÍNTESE-TEMPO	34
4.2 - APROXIMAÇÃO SÍNTESE ESPAÇO-TEMPO.....	36
4.3 - TIPOS DE AUTOFUNÇÕES DE BASE E DE FUNÇÕES PESO	38
4.3.1 - Modos Naturais.....	38
4.3.2 - Modos Ômega	39
4.3.3 - Modos Lambda	40
CAPÍTULO 5 - MÉTODO DOS PSEUDO-HARMÔNICOS.....	42
INTRODUÇÃO	42
5.1 - DETERMINAÇÃO DOS PSEUDO-HARMÔNICOS	43
5.2 - EXPANSÃO EM PSEUDO-HARMÔNICOS NA SOLUÇÃO DE UM PROBLEMA DE FONTE FIXA.....	45
CAPÍTULO 6 - APLICAÇÃO DOS PSEUDO-HARMÔNICOS NA EXPANSÃO MODAL	47
INTRODUÇÃO	47
6.1 - EXPANSÃO EM PSEUDO MODOS	47
6.2 – SOLUÇÃO DO SISTEMA MODAL	53
6.2.1 – Integração Analítica da Equação Modal da Concentração	54
6.2.2 – Discretização Temporal da Equação Modal de Nêutrons	55
6.3 - O CÓDIGO DO MÉTODO MODAL.....	56
CAPÍTULO 7 - RESULTADOS NUMÉRICOS.....	59
INTRODUÇÃO	59

7.1 - BENCHMARK IAEA-3D	59
7.2 - REATOR HOMOGÊNEO.....	63
7.3 - TRANSIENTE OPERACIONAL LMW TRIDIMENSIONAL	68
7.4 - TRANSIENTE OPERACIONAL TRIDIMENSIONAL COM DESARME (LMWD)	85
7.5 - LMW TRIDIMENSIONAL COM EJEÇÃO DE BARRA DE CONTROLE (EBC).....	96
CAPÍTULO 8 - CONCLUSÕES E SUGESTÕES.....	102
APÊNDICE A - MÉTODO DE EXPANSÃO NODAL (NEM)	105
APÊNDICE B - TRATAMENTO DA MOVIMENTAÇÃO DE BBC PELO MÉTODO NEM... 	113
REFERÊNCIAS	118

ÍNDICE DE FIGURAS

Fig. 1.1 - Esquema de discretização no tempo. τ representa o contador de passos.	11
Fig. 3.1 - Nodo n e seus vizinhos nas direções x, y, z.	22
Fig. 3.2 – Esquema de discretização no tempo. O índice τ representa o contador de número de passos.	27
Fig. 3.3 - Fluxograma do código KDFMG3D para o método direto desenvolvido..	31
Fig. 6.1 - Fluxograma do código KMODPH3D para o método modal.	57
Fig. 7.1 - Configuração para simetria de 1/4 do IAEA-3D no plano 3 (ver Fig. 7.2). As setas indicam a fileira associada ao gráfico da Fig.7.3.	61
Fig. 7.2 - Configuração do IAEA-3D em um dos planos xz.....	61
Fig. 7.3 - Desvio relativo percentual na fileira destacada na Fig 7.1. Nesta fileira foi observado o maior desvio ($\approx 10^{-5}$).	62
Fig. 7.4 - IAEA-3D - Fluxo de nêutrons rápidos no plano central.	63
Fig. 7.5 - IAEA-3D - Fluxo de nêutrons térmicos no plano central.	63
Fig. 7.6 - Discretização do reator cubo homogêneo na simetria de 1/4.....	64
Fig. 7.7 - Evolução temporal do fluxo de nêutrons no grupo rápido na fileira central do reator homogêneo.....	67
Fig. 7.8 - Evolução temporal do fluxo de nêutrons no grupo térmico na fileira central do reator homogêneo.....	67
Fig. 7.9 - Reator LMW. (a) Geometria radial; (b) Movimento dos bancos de barras de controle.	69
Fig. 7.10 - Reator LMW - Geometria axial no instante inicial.....	69
Fig. 7.11 - Reator LMW - Geometria axial ao fim do transiente.....	70
Fig. 7.12 - Reator LMW - Variação da densidade de potência média.	71

Fig. 7.13 - Reator LMW - Variação do desvio relativo da densidade de potência. .72	.72
Fig. 7.14 - Reator LMW - Geometria axial no instante que ocorre a máxima densidade de potência média, em 20,5 s.....74	74
Fig. 7.15 - Reator LMW - Distribuição da Densidade de Potência Média Normalizada em três instantes.75	75
Fig. 7.16 - Reator LMW - Comparação da Distribuição da Densidade de Potência Média Normalizada no instante de máxima potência (em 20,5 s).76	76
Fig. 7.17 - Reator LMW - Comparação da Distribuição da Densidade de Potência Média Normalizada no instante final (60 s).77	77
Fig. 7.18 - Reator LMW - Variação das densidades de potências localizadas nos pontos 1, 2, 3 e 4.....78	78
Fig. 7.19 - Reator LMW - Variação da densidade de potência localizada no ponto 1.....79	79
Fig. 7.20 - Reator LMW - Variação do desvio relativo da densidade de potência localizada no ponto 1.79	79
Fig. 7.21 - Reator LMW - Variação da densidade de potência localizada no ponto 2.....80	80
Fig. 7.22 - Reator LMW - Variação do desvio relativo da densidade de potência localizada no ponto 2.....80	80
Fig. 7.23 - Reator LMW - Variação da densidade de potência localizada no ponto 3.....81	81
Fig. 7.24 - Reator LMW - Variação do desvio relativo da densidade de potência localizada no ponto 3.....81	81
Fig. 7.25 - Reator LMW - Variação da densidade de potência localizada no ponto 4.....82	82
Fig. 7.26 - Reator LMW - Variação do desvio relativo da densidade de potência localizada no ponto 4.....82	82
Fig. 7.27 - Reator LMW - Variação do fluxo de nêutrons rápidos no plano nº 6....83	83
Fig. 7.28 - Reator LMW - Variação do fluxo de nêutrons térmicos no plano nº 6..84	84

Fig. 7.29 - Geometria axial no instante da ocorrência do Desarme, $t = t_d$.	86
Fig. 7.30 - Reator LMWD -Variação da Densidade de Potência Média.	87
Fig. 7.31 - Reator LMWD - Variação do desvio relativo da densidade de potência.	88
Fig. 7.32 - Reator LMWD - Variação das densidades de potência localizadas nos pontos 1, 2, 3 e 4.	89
Fig. 7.33 - Reator LMWD -Variação da densidade de potência localizada no ponto 1.	90
Fig. 7.34 - Reator LMWD - Variação do desvio relativo da densidade de potência localizada no ponto 1.	90
Fig. 7.35 - Reator LMWD -Variação da densidade de potência localizada no ponto 2.	91
Fig. 7.36 - Reator LMWD -Variação do desvio relativo da densidade de potência localizada no ponto 2.	91
Fig. 7.37 - Reator LMWD -Variação da densidade de potência localizada no ponto 3.	92
Fig. 7.38 - Reator LMWD -Variação do desvio relativo da densidade de potência localizada no ponto 3.	92
Fig. 7.39 - Reator LMWD -Variação da densidade de potência localizada no ponto 4.	93
Fig. 7.40 - Reator LMWD -Variação do desvio relativo da densidade de potência localizada no ponto 4.	93
Fig. 7.41 - Reator LMWD -Variação do fluxo de nêutrons rápidos no plano nº 6.	94
Fig. 7.42 - Reator LMWD -Variação do fluxo de nêutrons térmicos no plano nº 6.	95
Fig. 7.43 - EBC - Variação da potência relativa.	98
Fig. 7.44 - EBC - Variação da potência relativa - escala ampliada.	99

Fig. 7.45 - EBC - Variação da temperatura média do núcleo.....99

Fig. B.1 - Esquema de um nodo n com barra de controle parcialmente inserida. 113

Índice de Tabelas

Tabela 7.1 - Parâmetros de convergência	60
Tabela 7.2 - Parâmetros Nucleares de Multigrupo - IAEA-3D	62
Tabela 7.3 - Reator Homogêneo - Parâmetros Nucleares e Cinéticos de Multigrupo	65
Tabela 7.4 - Reator Homogêneo - Comportamento do erro de truncamento na discretização temporal	66
Tabela 7.5 - Reator Homogêneo - Comparação com a solução exata.	66
Tabela 7.6 - Reator LMW - Parâmetros Nucleares e Cinéticos de Multigrupo.	68
Tabela 7.7 - Reator LMW - Comportamento do erro de truncamento na discretização temporal.....	71
Tabela 7.8 - Reator LMW - Máxima Densidade de Potência	73
Tabela 7.9 - Reator LMW - Densidade de Potência; comparação com o CUBBOX.	63
Tabela 7.10 - Reator LMWD - Comportamento do erro de truncamento na discretização temporal.	85
Tabela 7.11 - Resultados para o transiente com Desarme	86
Tabela 7.12 - EBC - Parâmetros Nucleares e Cinéticos de Multigrupo	96
Tabela 7.13 - EBC - Modelo de Realimentação Térmica	97
Tabela 7.14 - EBC - Comportamento do erro de truncamento na discretização temporal.	97

CAPÍTULO 1

INTRODUÇÃO

Em função de décadas de estudos e aperfeiçoamentos existe atualmente um número considerável de métodos aplicados a teoria da difusão para tratar os problemas da física de reatores relacionados com a cinética espacial. Os métodos da cinética espacial podem ser classificados em duas grandes categorias: métodos diretos e métodos indiretos. Os métodos diretos utilizam os métodos de discretização de problemas estacionários para tratar a dependência espacial, e em seguida resolvem a dependência no tempo. Os métodos de diferenças finitas, métodos de malha grossa e métodos nodais combinados com algum esquema de integração no tempo pertencem a esta classe de métodos. Os métodos indiretos baseiam-se na idéia de separar a parte espacial da parte temporal. Os métodos de fatoração do espaço e tempo e os métodos modais e de síntese são considerados como métodos indiretos.

Os métodos modais (STACEY, 1969) ou métodos de expansão modal são caracterizados como o procedimento no qual o fluxo de nêutrons dependente do tempo é aproximado empregando-se combinações lineares de uma determinada distribuição espacial independente do tempo, ou seja, o fluxo dependente do tempo é expandido em funções conhecidas, que incluem a parte espacial, e em coeficientes de expansão incógnitos que incluem toda a parte temporal. A dedução do sistema cujas soluções são os coeficientes da expansão modal é feita com auxílio de uma função peso.

A escolha dos modos (funções da expansão) e das funções peso tem um aspecto importante na aplicação deste método. Podemos citar três exemplos de escolha: *modos alfa*, ou *modos naturais* são as autofunções associadas ao operador de uma específica equação de difusão de nêutrons e precursores dependente do tempo. Geralmente os modos naturais são complexos; *modos ômega* são as autofunções associadas ao operador da equação de difusão de nêutrons dependente do tempo, ignorando os nêutrons retardados; *modos lambda* são as autofunções da equação de difusão de nêutrons estacionária. Os modos ômega e lambda envolvem os operadores de destruição e produção da teoria de difusão multigrupo e são, em princípio, obtidos com o uso de códigos computacionais padrões para problemas estacionários. Enquanto que os modos

lambda não exigem nenhuma modificação em tais códigos, a aplicação dos modos ômega exige modificações consideráveis. Os modos lambda têm sido utilizados em recentes trabalhos que tratam da questão da instabilidade em núcleos do tipo BWR.

Para cada um dos três auto-sistemas citados há um correspondente sistema adjunto, e, portanto, relações de ortogonalidade são exploradas.

Na presente tese, apresentamos o método dos pseudo-harmônicos como uma alternativa na aplicação dos métodos modais. Os pseudo-harmônicos (GOMIT *et al.*, 1982) são as autofunções associadas ao operador de fuga + remoção em cada grupo de energia da equação de difusão estacionária. Como de modo geral este operador é auto-adjunto as autofunções são reais, não há necessidade de calcular as autofunções adjuntas, não existe degenerescência nas autofunções e as equações são desacopladas em grupos de energia.

Os pseudo-harmônicos são obtidos a partir da matriz que representa a fuga+remoção discretizada pelo método de diferenças finitas de malha grossa (DFMG) (ARAGONES *et al.*, 1986) para o problema estacionário 3D e 2 grupos de energia. O DFMG faz uso dos resultados obtidos no método de expansão nodal (NEM) (FINNEMANN *et al.*, 1977). A opção pelo DFMG é conveniente devido a sua praticidade de construir a matriz do operador de fuga + remoção, de maneira que os pseudo-harmônicos são determinados sem a necessidade que o código para o DFMG sofra qualquer modificação e pela disponibilidade deste código (DA SILVA *et al.*, 2003), previamente desenvolvido no Programa de Engenharia Nuclear (PEN) da COPPE-UFRJ para resolver problemas estacionários.

Quando aplicados nos métodos modais da cinética espacial os pseudo-harmônicos serão denominados de *pseudo modos*.

A tese está organizada em oito capítulos. No capítulo 2, são descritos resumidamente alguns dos principais métodos aplicados na solução das equações da cinética espacial. A classificação dos métodos diretos e indiretos é abordada de maneira mais ramificada.

O desenvolvimento de um método direto para gerar as soluções de referência é abordado de forma detalhada no capítulo 3. Como será visto, o método de referência tem como base o DFMG acoplado com o NEM para tratar da discretização do espaço e faz uso da técnica de integração analítica da equação de precursores em conjunto com o método de Crank-Nicholson para tratar a dependência temporal.

No capítulo 4, será apresentada a teoria envolvida nos principais métodos modais existentes. Será uma abordagem geral, onde, por exemplo, a variável espaço não aparece na forma discretizada, mas sim continuamente.

O método dos pseudo-harmônicos no formalismo da discretização do método DFMG é tratado no capítulo 5. Também é abordada a aplicação da expansão em pseudo-harmônicos na solução de um problema de fonte fixa.

O capítulo 6 focaliza o método proposto. Os pseudo-harmônicos são utilizados como as funções peso e as autofunções de base na expansão modal. Esta nova opção de metodologia modal é apresentada como sendo os pseudo modos.

No capítulo 7, são apresentados os resultados numéricos. Inicialmente é verificada a validade da expansão em pseudo-harmônicos na solução de problemas de fonte fixa, desenvolvida teoricamente no capítulo 5. Para este fim é usado o Benchmark IAEA-3D. Logo depois o método proposto é testado e comparado com o método de referência desenvolvido no capítulo 3. Quatro diferentes problemas de transientes são utilizados: a perturbação resultante da mudança em degrau num reator homogêneo, o conhecido problema de transiente operacional de Langenbuch, o transiente operacional de Langenbuch com desarme e ainda uma simulação de ejeção de barra de controle.

Finalmente, as conclusões e sugestões desta tese são apresentadas no capítulo 8.

CAPÍTULO 2

MÉTODOS DA TEORIA DE DIFUSÃO PARA A CINÉTICA ESPACIAL

INTRODUÇÃO

Neste capítulo são descritos de forma breve os principais métodos da teoria de difusão para a cinética espacial. Os métodos de solução da equação de difusão dependente do tempo multidimensional podem ser divididos em duas categorias: em métodos diretos e em métodos indiretos. Primeiramente são abordados os métodos que tratam a dependência espacial e em seguida os métodos que solucionam a dependência na variável tempo. As informações apresentadas aqui têm como referência básica o livro de STACEY (1969) e o artigo de SUTTON *et al.* (1996).

2.1 - MÉTODOS DIRETOS

Os métodos diretos podem ser definidos como os métodos que realizam a integração no tempo das equações diferenciais ordinárias acopladas que são resultantes de uma discretização espacial da equação de difusão de nêutrons dependente do tempo e da equação da concentração de precursores. Podemos classificar os métodos diretos na seguinte maneira:

- 2.1.1 Método de Diferenças Finitas;
- 2.1.2 Métodos de Malha Grossa e Métodos Nodais;
- 2.1.3 Métodos Nodais de Integração Transversa.

2.1.1 - Método de Diferenças Finitas

O método de diferenças finitas para problemas de transiente é apenas uma extensão para o caso dependente do tempo dos procedimentos já conhecidos que são empregados na solução da equação de difusão de nêutrons estacionária. Para se obter uma acurácia aceitável, o espaçamento de malha nas diferenças finitas deve ser da

ordem do menor comprimento de difusão (mesmo se um espaçamento maior seja adequado para definir a geometria do reator). Para muitos problemas de interesse esta exigência resulta no uso de um grande número de cubos de malha, e em consequência um elevado número de incógnitas, que devem ser solucionadas. Neste método, os parâmetros nucleares são considerados uniformes dentro de cada cubo de malha. A variação espacial do fluxo de nêutrons e da concentração dos precursores dentro de cada volume integrado é aproximada por uma expansão em série de Taylor truncada. Geralmente duas versões do método de diferenças finitas são utilizadas: na formulação quina de malha as incógnitas são definidas nas quinas dos cubos de malha; enquanto que na formulação centrada na malha as incógnitas são definidas no ponto central do cubo de malha.

Apesar do custo computacional associado com a malha espacial fina, o método de diferenças finitas apresenta certas características convenientes, de modo que tem sido implementado em muitos códigos de cinética espacial. De fato as propriedades das equações de diferenças são bem conhecidas e uma grande massa de conhecimento acerca das técnicas numéricas para resolvê-las, faz com que praticamente se assegure que o erro de truncamento espacial desapareça no limite de malha fina, e que o fluxo de nêutrons detalhado e a distribuição de taxas de reações sejam prontamente obtidas pela solução.

2.1.2 - Métodos de Malha Grossa e Métodos Nodais

Os métodos de malha grossa e os métodos nodais reduzem o número de incógnitas pelo fato de ser possível definir parâmetros equivalentes de difusão multigrupo homogeneizados que permitam que grandes regiões (por exemplo, “assemblies” inteiros) sejam tratadas como se elas fossem espacialmente homogeneizadas. Com regiões homogêneas maiores podemos discretizar o reator com um espaçamento de malha relativamente maior, de modo que tais métodos aumentem a eficiência computacional devido à redução de incógnitas que devem ser calculadas.

Para alcançar uma acurácia aceitável, estes métodos empregam um tratamento espacial de altas-ordens dentro de cada nodo (cubo de malha). Embora a quantidade de cálculos por nodo seja maior que no método de diferenças finitas, a redução no número

de incógnitas ainda resulta em uma redução significativa nos recursos computacionais necessários.

DORNING (1977) sugere um esquema de classificação dos métodos e faz uma distinção entre os métodos de malha grossa e os métodos nodais: os métodos de malha grossa são definidos como aqueles métodos em que a determinação da distribuição do fluxo de nêutrons multidimensional dentro de um nodo é parte integral do procedimento de solução; enquanto que os métodos nodais são definidos como aqueles métodos nos quais os fluxos médios nodais e, quando possível, as componentes das correntes líquidas ou correntes parciais médias nas faces dos nodos são resultados diretos do procedimento de solução.

2.1.2.a - Métodos de Malha Grossa

Os métodos de malha grossa fazem uso de um esquema de alta-ordem para obter a variação espacial do fluxo de nêutrons dentro de um nodo. É bom ressaltar que, embora estes métodos utilizam uma malha computacional grossa, podemos ainda, com algum esforço adicional, utilizá-los para se obter uma distribuição da taxa de reação sobre uma escala espacial mais fina.

O método de expansão do fluxo (FEM) (LANGENBUCH *et al.*, 1977a e 1977b) é um método de malha grossa que tem sido implementado nos códigos para transientes QUABOX e CUBBOX. No código QUABOX polinômios quadráticos são empregados, e as funções de base são formadas com polinômios de Taylor unidimensionais. Já no código CUBBOX funções cúbicas são usadas para se construir as funções de base. Neste caso as funções de base consistem de produtos e somas de funções splines de interpolação e polinômios unidimensionais, bem como de polinômios tridimensionais.

Outro método de malha grossa que podemos citar é o método dos elementos finitos (KANG *et al.*, 1973). Este método também pode ser classificado como um método de malha fina de altas ordens. A idéia básica do método dos elementos finitos é aproximar o fluxo num grupo de energia como um somatório de polinômios multidimensionais e que são identicamente nulos em toda parte do lado de fora de algum volume elementar que circunda o correspondente ponto de malha. Implementações com funções de base compostas por polinômios cúbicos de Hermite também são adotadas. O método dos elementos finitos tem sido empregado em vários

códigos da cinética espacial, como por exemplo no HERMITE (ROHAN *et al.*, 1975) e no CRONOS (KAVENOKY *et al.*, 1982).

2.1.2.b - Métodos Nodais

Da mesma forma que nos métodos de malha grossa, os métodos nodais também utilizam nodos com dimensões maiores que as usadas no método de diferenças finitas. Uma equação de balanço nodal é obtida integrando-se a equação de difusão de nêutrons dependente do tempo sobre o volume de cada nodo. A solução da equação de balanço nodal requer relações adicionais entre o fluxo médio nodal com as correntes parciais ou líquidas médias nas interfaces dos nodos. Os primeiros métodos nodais usam parâmetros de acoplamento que são obtidos a partir de um cálculo de referência (geralmente um acurado cálculo de malha fina) para eliminar as correntes parciais na equação de balanço nodal. Um exemplo é o Método de Acoplamento Grave (WACHPRESS *et al.*, 1962). Estes métodos apresentam bons resultados quando as condições analisadas se aproximam das condições de referência. Entretanto se as diferenças entre essas condições são relativamente grandes, tais métodos não são bem sucedidos. Apesar das dificuldades, os antigos métodos nodais ainda são utilizados, particularmente em códigos de simulações onde o tempo de execução é um fator primordial.

2.1.3 - Métodos Nodais de Integração Transversa

Diferentemente dos antigos métodos nodais, os métodos nodais de integração transversa (LAWRENCE, 1986) podem resolver problemas compostos de "assemblies" homogêneos sem a necessidade de informações adicionais, precisando apenas de uma descrição geométrica e dos valores das seções de choque e dos coeficientes de difusão. Estes métodos podem ser estendidos a problemas que envolvam "assemblies" heterogêneos através da aplicação de sofisticados métodos de homogeneização nodal que se baseiam em alguma forma da teoria de equivalência (KOEKKE, 1978, SMITH, 1986). Para esses casos, são necessários cálculos de homogeneização com malha fina para se obterem os parâmetros nucleares nodais. Tem sido encontrado, contudo, que a acurácia da solução nodal é relativamente insensível ao grau de similaridade entre o

problema que é resolvido e o problema usado para o cálculo de homogeneização. Além disso, os métodos de reconstrução (KOEKKE *et al.*, 1977) estão amplamente desenvolvidos permitindo a determinação da distribuição do fluxo ou da potência de forma detalhada dentro de um nodo.

Os métodos nodais de integração transversa utilizam um procedimento de integração dentro do volume de cada nodo, produzindo equações unidimensionais acopladas a partir da equação de difusão multigrupo tridimensional e da equação da concentração de precursores. As soluções dessas equações unidimensionais fornecem as relações entre o fluxo médio nodal e as correntes parciais ou líquidas médias nas interfaces do nodo necessárias para se resolver a equação de balanço nodal.

Nos métodos nodais polinomiais, as equações unidimensionais são resolvidas aproximando-se o fluxo integrado transverso por uma expansão polinomial truncada. Os coeficientes da expansão são determinados pela condição de continuidade e por processos de resíduos ponderados. Como exemplo de método nodal polinomial, podemos citar o método de expansão nodal (NEM) (FINNEMANN *et al.*, 1977), que é usado nos códigos NESTLE (AL-CHALABI *et al.*, 1993), SPANDEX (AVILES, 1993), IQSBOX (FINNEMANN *et al.*, 1981) e TRAC/NEM (BEAM *et al.*, 1999). No apêndice A o NEM será tratado com maiores detalhes. Ainda, como exemplo dos métodos nodais polinomiais, temos o Método de Sims (SHOBER *et al.*, 1977) e o método empregado no código NODLEG (MAEDER, 1978).

Os métodos nodais analíticos são caracterizados por usarem uma solução analítica em alguma parte do processo de solução das equações integradas transversalmente. Podemos citar os seguintes exemplos: o Método Nodal Analítico (ANM), que é empregado no código QUANDRY (GREENMAN, *et al.*, 1979), onde uma aproximação quadrática para a fuga é adotada, e o Método da Função de Green Nodal (NGFM) (LAWRENCE *et al.*, 1980).

Há também as formulações híbridas, onde os métodos nodais analíticos e polinomiais são mesclados, conforme pode se visto no código SKETCH-N (ZIMIN *et al.*, 1998) e no código AETNA (TAMITANI *et al.*, 2003).

2.2 - MÉTODOS INDIRETOS

Os métodos indiretos de modo geral têm como idéia básica separar a parte dependente do espaço da parte dependente do tempo na solução das equações da cinética espacial. Estes métodos podem ser divididos nos métodos de fatoração do espaço e tempo e nos métodos modais e de síntese.

2.2.1 - Métodos de Fatoração do Espaço e Tempo

Os métodos de fatoração do espaço e tempo utilizam uma decomposição do fluxo de nêutrons dependente do tempo em um produto de duas funções: uma função amplitude que depende apenas da variável tempo, e uma função forma que depende do espaço e da energia como também da variável tempo. A motivação de se usarem estes métodos reside no fato de que em muitos cálculos de reatores a função forma depende fracamente do tempo, e em consequência disso ela não precisa ser calculada em todos os passos no tempo. Como o cálculo da função forma é geralmente muito dispendioso em termos computacionais e em contrapartida o cálculo da função amplitude é relativamente simples, os métodos de fatoração do espaço e tempo podem produzir bons resultados e exigindo menos recursos computacionais do que os métodos diretos usando a mesma discretização espacial.

Como exemplo desses métodos podemos citar o método quase-estático, o método quase-estático melhorado (IQS) (DODDS, 1976), que tem sido empregado nos códigos IQSBOX, DIF3D e KIKO3D (KERESZTÚRI *et al.*, 2003). Temos também o método adiabático (HENRY *et al.*, 1958), onde as funções forma são as soluções da equação de difusão estacionária em vários instantes durante o transiente.

As equações da cinética pontual também podem ser classificadas como um método de fatoração no qual o espaço e o tempo são separáveis e onde a função forma é a solução da equação de difusão estacionária calculada no instante inicial do transiente e que não varia com o tempo. Um estudo sobre a estabilidade numérica das equações da cinética pontual é apresentado por HASHIMOTO *et al.* (2000).

2.2.2 - Métodos Modais e de Síntese

Os métodos modais e de síntese aproximam o fluxo dependente do tempo por uma combinação linear de uma predeterminada distribuição espacial independente do tempo com coeficientes dependentes do tempo. Nos métodos modais as funções da expansão são as autofunções da equação de difusão estacionária, enquanto que nos métodos de síntese elas são as soluções da equação de difusão estacionária para alguma configuração específica das condições do núcleo. Tem sido encontrado que os métodos modais freqüentemente requerem um número grande de termos em relação ao método de síntese para se chegar a uma acurácia aceitável. No entanto a escolha das funções da expansão de síntese pode exigir uma considerável experiência.

No capítulo 4, os métodos modais e de síntese serão abordados de forma mais específica, pois o método proposto neste trabalho tem como base a teoria envolvida nestes métodos.

2.3 - CONSIDERAÇÕES GERAIS SOBRE OS MÉTODOS DE INTEGRAÇÃO NO TEMPO

Nesta seção os métodos de integração numérica da dependência no tempo da equação de difusão de nêutrons e da equação dos precursores serão abordados de forma resumida. Alguns desses métodos têm a característica de tratarem de forma eficiente a questão da rigidez do sistema de equações que surgem nos métodos da cinética espacial. Outros métodos, devido a sua estrutura, permitem, de modo relativamente simples, a formulação de um algoritmo de monitoramento do erro de truncamento e de controle automático do passo no tempo.

Com a finalidade de abordar os métodos de forma mais específica vamos considerar que as equações da cinética espacial podem ser colocadas na seguinte forma matricial:

$$\frac{\partial}{\partial t} \underset{\sim}{\varphi} = [A] \underset{\sim}{\varphi} \quad (1.1)$$

onde o vetor $\tilde{\varphi}$ de dimensão N representa o fluxo de nêutrons e as concentrações de nêutrons retardados e [A] é um operador matricial $N \times N$ cujos elementos são as seções de choque e as constantes cinéticas.

2.3.1 - O Método Theta (θ)

O método theta (STACEY, 1969, NAKAMURA, 1977) tem sido empregado nos cálculos de cinética espacial desde a década de 60. Ele envolve o uso de um parâmetro, θ , para controlar o quanto o esquema é implícito. O método de Euler implícito, o método de Euler explícito e o método de Crank-Nicholson podem ser derivados a partir do método theta.

Fazendo uso do esquema de diferenças finitas no sistema de equações diferenciais dado pela equação (1.1), temos a seguinte expressão

$$\frac{\tilde{\varphi}(t_{\tau+1}) - \tilde{\varphi}(t_{\tau})}{\Delta t} = [M(t_{\tau+1})] \tilde{\varphi}(t_{\tau+1}) + [[A(t_{\tau})] - [M(t_{\tau})]] \tilde{\varphi}(t_{\tau}) \quad (1.2)$$

onde $\Delta t = t_{\tau+1} - t_{\tau}$ é o passo na discretização temporal (ver Fig. 1.1).

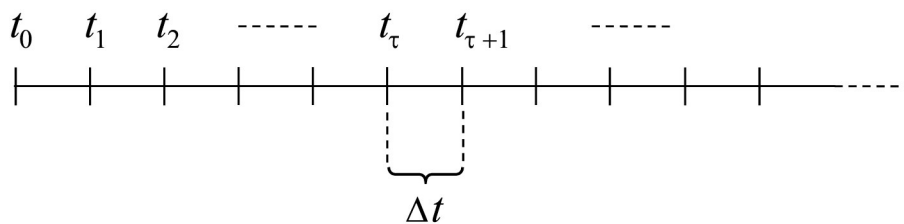


Fig. 1.1 - Esquema de discretização no tempo. τ representa o contador de passos.

Resolvendo a equação (1.2) para $\tilde{\varphi}(t_{\tau+1})$, temos

$$\tilde{\varphi}(t_{\tau+1}) = [[I] - \Delta t [M(t_{\tau+1})]]^{-1} [[I] + \Delta t [A(t_{\tau})] - \Delta t [M(t_{\tau})]] \tilde{\varphi}(t_{\tau}),$$

onde os elementos das matrizes $[M(t_{\tau+1})]$ e $[M(t_{\tau})]$ se relacionam com os elementos das matrizes $[A(t_{\tau+1})]$ e $[A(t_{\tau})]$ da seguinte forma

$$m_{ij}(t_{\tau+1}) = \theta_{ij}(t_{\tau+1}) a_{ij}(t_{\tau+1}),$$

$$m_{ij}(t_{\tau}) = \theta_{ij}(t_{\tau}) a_{ij}(t_{\tau}),$$

com os parâmetros escalares $\theta_{ij}(t_{\tau+1})$ e $\theta_{ij}(t_{\tau})$ variando de 0 a 1. Na prática se faz $\theta_{ij}(t_{\tau+1}) = \theta_{ij}(t_{\tau})$. O método de Euler implícito, o método de Euler explícito e o método de Crank-Nicholson são obtidos configurando todos os parâmetros θ_{ij} em 1, 0 e $\frac{1}{2}$, respectivamente. Existem métodos para encontrar o valor otimizado do parâmetro θ_{ij} , mas, geralmente, este parâmetro é escolhido com base na experiência. Uma escolha comum é $\theta_{ij} = 1$ para a equação do fluxo de nêutrons e $\theta_{ij} = \frac{1}{2}$ para a equação dos precursores. Dois algoritmos de variável passo no tempo se aplicam ao método theta: um consiste da técnica do passo duplicado (PRESS *et al.*, 1992), e o outro adapta o tamanho do passo com base no período inverso de alguma variável de estado (TAIWO *et al.*, 1993).

2.3.2 - Direções Alternadas Implícito

O método de direções alternadas implícito (ADI) (WACHSPRESS, 1966, STACEY, 1969) tem como característica ser altamente implícito e de necessitar de menos esforço computacional quando comparado com o método θ . O ADI separa as direções do operador matricial da equação (1.1) e resolve implicitamente cada direção por vez. A equação (1.1) pode ser escrita na seguinte forma

$$\frac{\partial}{\partial t} \underline{\varphi} = [[A_x] + [A_y] + [A_z] + [E]] \underline{\varphi},$$

onde $[A_u]$, $u = x, y, z$, é o operador matricial na direção u , enquanto que o operador

matricial $[E]$ representa os termos independentes das direções. O ADI alterna entre as três direções de modo que resolve seqüencialmente uma direção diferenciando no tempo implicitamente enquanto que as outras direções são tratadas explicitamente.

A estabilidade do ADI é discutida em (HAGEMAN *et al.*, 1969, LANGENBUCH *et al.*, 1977a). Também podemos citar o código DPOL3D (MONTAGNINI *et al.*, 1996) que utiliza o ADI em sua formulação.

2.3.3 - O Método de Confinamento da Rigidez

O método de confinamento da rigidez (CHAO *et al.*, 1985 e 1993) é uma aproximação para a integração numérica no tempo das equações da cinética espacial que confina a rigidez do sistema para as equações do fluxo de nêutrons. Neste método a rigidez das equações da cinética espacial é desacoplada pela introdução das frequências dinâmicas que são assim definidas:

$$\omega_g^\phi(\underline{r}, t) \equiv \frac{\frac{\partial}{\partial t} \phi_g(\underline{r}, t)}{\phi_g(\underline{r}, t)} = \frac{\partial}{\partial t} \ln(\phi_g(\underline{r}, t)), \quad \text{para } g = 1, \dots, G,$$

$$\omega_l^c(\underline{r}, t) \equiv \frac{\frac{\partial}{\partial t} C_l(\underline{r}, t)}{C_l(\underline{r}, t)} = \frac{\partial}{\partial t} \ln(C_l(\underline{r}, t)), \quad \text{para } l = 1, \dots, L,$$

onde $\phi_g(\underline{r}, t)$ e $C_l(\underline{r}, t)$ são, respectivamente, o fluxo de nêutrons no grupo g e a concentração de nêutrons retardados no grupo l , definidos num ponto \underline{r} e no instante t . Usando estas definições nas equações da cinética espacial chega-se a uma equação similar a equação de difusão estacionária, sendo que agora as constantes de grupo são modificadas e são funções das frequências dinâmicas.

Este método é empregado no código para transientes SPNOVA-K (CHAO *et al.*, 1989) e também um esquema relacionado é implementado no código nodal PANTHER (HUTT *et al.*, 1993), que utiliza uma transformação exponencial em conjunção com o método iterativo sobre-relaxação sucessivas simétrico.

2.3.4 - Os Métodos de Runge-Kutta Generalizados de Rosenbrock

Estes métodos pertencem à classe dos métodos que têm o objetivo de resolver os sistemas de equações rígidos. Os Métodos de Runge-Kutta Generalizados de Rosenbrock (PRESS *et al.*, 1992) são implícitos e têm sido aplicados nos problemas de cinética espacial em vários casos. Um exemplo desse método é o de Runge-Kutta Generalizado de Kaps-Rentrop que é empregado no código SPANDEX (AVILES, 1993). Este método consegue obter soluções acuradas usando um passo no tempo relativamente grande. Além disso ele possui uma solução de terceira ordem contida na solução de quarta ordem. Com isso as duas soluções podem ser usadas para controlar o tamanho do passo no tempo, fornecendo uma estimativa do erro de truncamento temporal.

Pelo método de Rosenbrock a solução da equação (1.1) é dada por

$$\tilde{\varphi}(t_0 + \Delta t) = \tilde{\varphi}(t_0) + \sum_{i=1}^s b_i \tilde{k}_i \quad (1.3)$$

onde os vetores de correção \tilde{k}_i são obtidos pela solução do seguinte sistema de equações

$$\left([I] - \gamma \Delta t \tilde{f}' \right) \tilde{k}_i = \Delta t \tilde{f} \left(\tilde{\varphi}(t_0) + \sum_{j=1}^{i-1} \alpha_{ij} \tilde{k}_j \right) + \Delta t \tilde{f}' \sum_{j=1}^{i-1} \gamma_{ij} \tilde{k}_j, \quad i=1, \dots, s, \quad (1.4)$$

onde \tilde{f}' é o Jacobiano do sistema linear, $\tilde{f} = \frac{\partial}{\partial t} \tilde{\varphi}$, e os coeficientes γ , b_i , α_{ij} e γ_{ij} são constantes fixas independentes do problema. No caso de $\gamma = \gamma_{ij} = 0$ o método se reduz ao Runge-Kutta tradicional.

Para se elaborar um algoritmo de controle automático do tamanho do passo Δt duas estimativas da forma da equação (1.3) são computadas: uma estimativa “real”, $\tilde{\varphi}$, e outra estimativa de baixa ordem $\hat{\tilde{\varphi}}$ calculada com diferentes coeficientes, \hat{b}_i , $i=1, \dots, \hat{s}$, onde $\hat{s} < s$, mas com os mesmos \tilde{k}_i . A diferença entre $\tilde{\varphi}$ e $\hat{\tilde{\varphi}}$ conduz a

uma estimativa do erro de truncamento local, que pode ser utilizado para controlar o tamanho do passo Δt . Foi demonstrado (KAPS *et al.*, 1979) que o menor valor para s é 4 e para \hat{s} é 3, de modo que o método é de quarta ordem.

2.3.5 - Integração Analítica da Equação dos Precursores

Com este procedimento é possível reduzir a dimensão do sistema de equações da cinética espacial (equação de difusão de nêutrons mais a equação dos precursores), e conseqüentemente a rigidez do sistema. A equação dos precursores é analiticamente integrada considerando-se que a seção de choque de fissão varie linearmente no tempo (STACEY, 1969). Este método tem sido implementado com sucesso em uma variedade de códigos neutrônicos de transientes, quais sejam: NESTLE (AL-CHALABI *et al.*, 1993), NGFM (LAWRENCE *et al.*, 1980), SKETCH-N (ZIMIN *et al.*, 1998), DIF3D-K (TAIWO *et al.*, 1993), PANTHER (HUTT *et al.*, 1993) e no código NOBACK, desenvolvido por GINESTAR *et al.* (1998), e em outros códigos não citados aqui.

Nos capítulos 3 e 6 este método será tratado de modo mais específico.

CAPÍTULO 3

MÉTODO DIRETO DE SOLUÇÃO DAS EQUAÇÕES DA CINÉTICA ESPACIAL

INTRODUÇÃO

Pelas definições do capítulo anterior os métodos diretos integram no tempo as equações diferenciais ordinárias acopladas, resultantes de uma discretização espacial das equações da cinética espacial. O objetivo deste capítulo é descrever o método direto que será adotado como o método de referência. Para isso vamos considerar a teoria de difusão multigrupo, em geometria cartesiana, que permite que as equações da cinética espacial possam ser escritas na seguinte maneira:

$$\frac{1}{v_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi_g(x, y, z, t) = - \sum_u \frac{\partial}{\partial u} J_g(x, y, z, t) - \Sigma_{Rg}(x, y, z, t) \phi_g(x, y, z, t) + q_g(x, y, z, t), \quad (3.1)$$

$$J_g(x, y, z, t) = J_{gu}^+(x, y, z, t) - J_{gu}^-(x, y, z, t) = -D_g(x, y, z, t) \frac{\partial}{\partial u} \phi_g(x, y, z, t), \quad (3.2)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} C_l(x, y, z, t) = \beta_l \sum_{g=1}^G v \Sigma_{fg}(x, y, z, t) \phi_g(x, y, z, t) - \lambda_l C_l(x, y, z, t), \quad (3.3)$$

$$l = 1, \dots, L,$$

com $g = 1, \dots, G$, $u = x, y, z, e$

$$q_g(x, y, z, t) = \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^G \Sigma_{sgg'}(x, y, z, t) \phi_{g'}(x, y, z, t) + (1 - \beta) \chi_g \sum_{g'=1}^G v \Sigma_{fg'}(x, y, z, t) \phi_{g'}(x, y, z, t) + \sum_{l=1}^L \lambda_l \chi_{gl} C_l(x, y, z, t),$$

onde temos a seguinte nomenclatura:

- G = Número total de grupos de energia;
- L = Número total de grupos de precursores de nêutrons retardados;
- $\phi_g(x, y, z, t)$ = Fluxo de nêutrons no grupo g , num ponto (x, y, z) e tempo t (# de nêutrons /cm² s);
- $J_g(x, y, z, t)$ = Corrente líquida de nêutrons no grupo g , num ponto (x, y, z) e tempo t (# de nêutrons /cm² s);
- $J_{gu}^{+/-}(x, y, z, t)$ = Correntes parciais de nêutrons no grupo g , num ponto (x, y, z) , no sentido (+) ou (-) na direção u e tempo t (# de nêutrons /cm² s);
- $C_l(x, y, z, t)$ = Concentração de precursores de nêutrons retardados no grupo l , num ponto (x, y, z) e tempo t (núcleo/cm³ s);
- β_l = Fração de nêutrons retardados no grupo l ;
- λ_l = Constante de decaimento dos precursores de nêutrons retardados no grupo l , (sec⁻¹);
- v_g = Velocidade de nêutrons no grupo g ;
- $D_g(\underline{r}, t)$ = Coeficiente de difusão no grupo g , num ponto (x, y, z) e tempo t (cm);
- $\Sigma_{Rg}(\underline{r}, t)$ = Seção de choque macroscópica de remoção no grupo g , num ponto (x, y, z) e tempo t (cm⁻¹);
- $\Sigma_{sgg'}(\underline{r}, t)$ = Seção de choque macroscópica de espalhamento do grupo g' para o grupo g , num ponto (x, y, z) e tempo t (cm⁻¹);
- $\nu \Sigma_{fg}(\underline{r}, t)$ = Número médio de nêutrons emitidos por fissão multiplicado pela seção de choque macroscópica de fissão no grupo g , num ponto (x, y, z) e tempo t (cm⁻¹);
- χ_g = Fração espectral de fissão de nêutrons prontos no grupo g ;
- χ_{gl} = Fração espectral de fissão de nêutrons retardados no grupo g e no grupo l .

A maioria dos métodos diretos de solução das eqs. (3.1), (3.2) e (3.3) têm como base a discretização no espaço e no tempo. No presente trabalho a discretização no espaço será desenvolvida pelo Método de Diferenças Finitas de Malha Grossa (DFMG) em conexão com o Método de Expansão Nodal (NEM), enquanto que a discretização no tempo será tratada pelo Método de Diferenças Finitas (MDF) e com a integração analítica da equação dos precursores de nêutrons.

Com a formulação deste método de referência podemos gerar as soluções de referência para fins de comparação com o método modal que será desenvolvido no capítulo 6.

3.1 - DISCRETIZAÇÃO ESPACIAL

Nesta seção vamos mostrar como a dependência espacial é tratada com o fim de se obter a equação da cinética espacial semi-discretizada, ou seja, com a discretização sendo realizada apenas na variável espacial.

Inicialmente descrevemos o método de diferenças finitas de malha grossa (DFMG), já o método de expansão nodal (NEM) é apresentado no Apêndice A. O DFMG utiliza como parâmetros de entrada os resultados gerados pelo NEM.

3.1.1 - Método de Diferenças Finitas de Malha Grossa

Os métodos nodais, entre eles o NEM, podem apresentar um elevado tempo na execução de cálculos repetitivos como por exemplo na movimentação de bancos de barras de controle, na pesquisa da concentração crítica de Boro solúvel, e também nos cálculos de queima de combustível. Na busca de procedimentos alternativos para acelerar os métodos nodais nestes cálculos, o método de diferenças finitas de malha grossa (DFMG) vem sendo uma ferramenta muito útil neste sentido (ARAGONES *et al.*, 1986, CHAO, 1999 e 2000, PEREIRA *et al.*, 2002,).

O DFMG desenvolvido aqui se baseia na formulação proposta em ARAGONES *et al.* (1986) e com aplicações nos trabalhos de PEREIRA *et al.* (2002) e DA SILVA *et al.* (2003).

A formulação do método utiliza como parâmetros de entrada o coeficiente de difusão $D_g^{i,j,k}(t)$, as correntes médias nas faces do nodo $J_{gus}^{i,j,k}(t)$, os fluxos médios

nas faces do nodo $\psi_{gus}^{i,j,k}(t)$ ($s = e, d$) e o fluxo médio no nodo $\phi_g^{i,j,k}(t)$, que são previamente calculados pelo NEM quando aplicado na solução da equação de nêutrons estacionária. No apêndice A é apresentado o método NEM para problemas estacionários.

Na formulação do DFMG são adotados os fatores de correção de malha grossa que alteram a formulação de diferenças finitas de malha fina, com isso podemos escrever as correntes médias nas faces do nodo da seguinte maneira:

$$J_{gue}^{i,j,k}(t) = -\frac{2}{a_u^r} D_g^{i,j,k}(t) (\phi_g^{i,j,k}(t) - \psi_{gue}^{i,j,k}(t)) + f_{gue}^{i,j,k}(t) (\phi_g^{i,j,k}(t) + \psi_{gue}^{i,j,k}(t)) \quad (3.4)$$

e

$$J_{gud}^{i,j,k}(t) = -\frac{2}{a_u^r} D_g^{i,j,k}(t) (\psi_{gud}^{i,j,k}(t) - \phi_g^{i,j,k}(t)) - f_{gud}^{i,j,k}(t) (\phi_g^{i,j,k}(t) + \psi_{gud}^{i,j,k}(t)) \quad (3.5)$$

onde $f_{gus}^{i,j,k}(t)$ são os fatores de correção e a_u^r é a dimensão do nodo na direção u , com $g = 1, 2$, representando os grupos de energia, $u = x, y, z$ as direções cartesianas, $s = e, d$ as faces esquerda e direita do nodo, i, j, k um nodo genérico e

$$r \equiv \begin{cases} i & \text{para } u = x \\ j & \text{para } u = y \\ k & \text{para } u = z \end{cases}$$

Podemos observar que se caso os fatores de correção, $f_{gus}^{i,j,k}(t)$, fossem nulos, recairíamos na metodologia clássica de diferenças finitas (malha fina). De modo geral os fatores de correção são determinados empiricamente no DFMG. Um estudo comparativo de diferentes esquemas que relacionam os fatores de correção com as correntes médias nas faces do nodo, pode ser encontrado em (CHAO, 2000).

De acordo com as Eqs. (3.4) e (3.5) e conhecendo os dados $J_{gus}^{i,j,k}(t)$, $\psi_{gus}^{i,j,k}(t)$, $\phi_g^{i,j,k}(t)$, $D_g^{i,j,k}(t)$, já calculados pelo NEM (ver Apêndice A), e a_u^r então os fatores de correção podem ser determinados assim:

$$f_{gue}^{i,j,k}(t) = \frac{J_{gue}^{i,j,k}(t) + \frac{2}{a_u^r} D_g^{i,j,k}(t) (\phi_g^{i,j,k}(t) - \psi_{gud}^{i,j,k}(t))}{\phi_g^{i,j,k}(t) + \psi_{gue}^{i,j,k}(t)} \quad (3.6)$$

e

$$f_{gud}^{i,j,k}(t) = \frac{J_{gud}^{i,j,k}(t) - \frac{2}{a_u^r} D_g^{i,j,k}(t) (\phi_g^{i,j,k}(t) - \psi_{gud}^{i,j,k}(t))}{\phi_g^{i,j,k}(t) + \psi_{gud}^{i,j,k}(t)}. \quad (3.7)$$

Aplicando as condições de continuidade de fluxo e de corrente na interface entre nodos, por exemplo, para três nodos consecutivos na direção x , obtém-se:

$$J_{gxe}^{i,j,k}(t) = -D_{gxe}^{i,j,k}(t) \phi_g^{i,j,k}(t) + D_{gxd}^{i-1,j,k}(t) \phi_g^{i-1,j,k}(t) \quad (3.8)$$

e

$$J_{gxd}^{i,j,k}(t) = D_{gxd}^{i,j,k}(t) \phi_g^{i,j,k}(t) - D_{gxe}^{i+1,j,k}(t) \phi_g^{i+1,j,k}(t) \quad (3.9)$$

onde:

$$D_{gxe}^{i,j,k}(t) = \frac{2 \left(\frac{1}{a_x^{i-1}} D_g^{i-1,j,k}(t) + \frac{1}{2} f_{gxd}^{i-1,j,k}(t) \right) \left(\frac{1}{a_x^i} D_g^{i,j,k}(t) - \frac{1}{2} f_{gxe}^{i,j,k}(t) \right)}{\left(\frac{1}{a_x^{i-1}} D_g^{i-1,j,k}(t) + \frac{1}{2} f_{gxd}^{i-1,j,k}(t) \right) + \left(\frac{1}{a_x^i} D_g^{i,j,k}(t) + \frac{1}{2} f_{gxe}^{i,j,k}(t) \right)} \quad (3.10)$$

e

$$D_{gxe}^{i,j,k}(t) = \frac{2 \left(\frac{1}{a_x^i} D_g^{i,j,k}(t) - \frac{1}{2} f_{gxd}^{i,j,k}(t) \right) \left(\frac{1}{a_x^{i+1}} D_g^{i+1,j,k}(t) + \frac{1}{2} f_{gxe}^{i+1,j,k}(t) \right)}{\left(\frac{1}{a_x^i} D_g^{i,j,k}(t) + \frac{1}{2} f_{gxd}^{i,j,k}(t) \right) + \left(\frac{1}{a_x^{i+1}} D_g^{i+1,j,k}(t) + \frac{1}{2} f_{gxe}^{i+1,j,k}(t) \right)}. \quad (3.11)$$

Por analogia determinam-se as correntes médias e os coeficientes de difusão nas faces do nodo, para as direções y e z .

Considerando a equação da continuidade (3.1) para dois grupos de energia e aplicando sobre esta o operador de média integral dado por

$$\frac{1}{V^{i,j,k}} \int_{V^{i,j,k}} (\bullet) dV,$$

onde $V^{i,j,k}$ é o volume de um nodo genérico i, j, k , obtemos a equação da continuidade discretizada segundo o DFMG:

$$\frac{1}{v_g} \frac{d}{dt} \phi_g^{i,j,k}(t) = - \sum_{u=x,y,z} \frac{1}{a_u^r} (J_{gud}^{i,j,k}(t) - J_{gue}^{i,j,k}(t)) - \sum_{Rg}^{i,j,k}(t) \phi_g^{i,j,k}(t) + \quad (3.12)$$

$$\sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^2 \sum_{sgg'}^{i,j,k} \phi_{g'}^{i,j,k} + (1-\beta) \chi_g \sum_{g'=1}^2 v \sum_{fg'}^{i,j,k}(t) \phi_{g'}^{i,j,k}(t) + \sum_{l=1}^L \lambda_l \chi_{gl} C_l^{i,j,k}(t)$$

Agora, utilizando as equações (3.8) e (3.9) e as análogas nas direções y e z na eq. (3.12), temos que:

$$-\frac{1}{a_z^k} D_{gzd}^{i,j,k-1}(t) \phi_g^{i,j,k-1}(t) - \frac{1}{a_y^j} D_{gyd}^{i,j-1,k}(t) \phi_g^{i,j-1,k}(t) - \frac{1}{a_x^i} D_{gxd}^{i-1,j,k}(t) \phi_g^{i-1,j,k}(t)$$

$$-\frac{1}{a_x^i} D_{gxe}^{i+1,j,k}(t) \phi_g^{i+1,j,k}(t) + \sum_{u=x,y,z} \frac{1}{a_u^r} (D_{gue}^{i,j,k}(t) + D_{gud}^{i,j,k}(t)) \phi_g^{i,j,k}(t) -$$

$$\frac{1}{a_y^j} D_{gye}^{i,j+1,k}(t) \phi_g^{i,j+1,k}(t) - \frac{1}{a_z^k} D_{gze}^{i,j,k+1}(t) \phi_g^{i,j,k+1}(t) -$$

$$\sum_{Rg}^{i,j,k}(t) \phi_g^{i,j,k}(t) + \frac{1}{v_g} \frac{d}{dt} \phi_g^{i,j,k}(t) =$$

$$(1-\beta) \chi_g \sum_{g'=1}^2 v \sum_{fg'}^{i,j,k}(t) \phi_{g'}^{i,j,k}(t) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g'=g}}^2 \sum_{gg'}^{i,j,k}(t) \phi_{g'}^{i,j,k}(t) + \sum_{l=1}^L \lambda_l \chi_{gl} C_l^{i,j,k}(t) \quad (3.13)$$

Colocando a Eq. (3.13), com ajuda da Fig. 3.1, na forma matricial tem-se que:

$$\begin{aligned}
& -B_{n,q}(t)\phi_g^{i,j,k-1}(t) - B_{n,t}(t)\phi_g^{i,j-1,k}(t) - B_{n,p}(t)\phi_g^{i-1,j,k}(t) - B_{n,n}(t)\phi_g^{i,j,k}(t) \\
& -B_{n,\alpha}(t)\phi_g^{i+1,j,k}(t) - B_{n,\beta}(t)\phi_g^{i,j+1,k}(t) - B_{n,\gamma}(t)\phi_g^{i,j,k+1}(t) - \sum_{Rg}^{i,j,k}(t)\phi_g^{i,j,k}(t) \\
& + \frac{1}{\nu_g} \frac{\partial}{\partial t} \phi_g^{i,j,k}(t) = (1-\beta)F^{i,j,k}(t)\phi_g^{i,j,k}(t) + S^{i,j,k}(t)\phi_g^{i,j,k}(t) + \sum_{l=1}^L \lambda_l \chi_{gl} C_l^{i,j,k}(t)
\end{aligned} \tag{3.14}$$

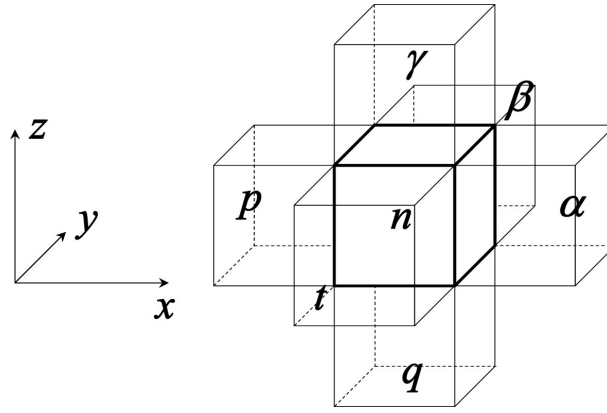


Fig. 3.1 - Nodo n e seus vizinhos nas direções x, y, z.

onde:

$$[F^{i,j,k}(t)] \equiv \begin{bmatrix} \chi_1 \nu \sum_{f_1}^{i,j,k}(t) & \chi_1 \nu \sum_{f_2}^{i,j,k}(t) \\ \chi_2 \nu \sum_{f_1}^{i,j,k}(t) & \chi_2 \nu \sum_{f_2}^{i,j,k}(t) \end{bmatrix},$$

$$[S^{i,j,k}(t)] \equiv \begin{bmatrix} 0 & \sum_{12}^{i,j,k}(t) \\ \sum_{21}^{i,j,k}(t) & 0 \end{bmatrix},$$

$$[B_{n,m}(t)] \equiv \begin{bmatrix} b_{n,m}^1(t) & 0 \\ 0 & b_{n,m}^2(t) \end{bmatrix},$$

$$[B_{n,n}(t)] \equiv \begin{bmatrix} b_{n,n}^1(t) & 0 \\ 0 & b_{n,n}^2(t) \end{bmatrix},$$

com

$$b_{n,n}^g(t) \equiv \sum_{Rg}^{i,j,k}(t) + \sum_{u=x,y,z} \frac{1}{a_u^r} (D_{gue}^{i,j,k}(t) - D_{gud}^{i,j,k}(t)) \quad (3.15)$$

com n representando o nodo i, j, k e m sendo o seu vizinho da esquerda (p) ou da direita (α), na direção x , de frente (t) ou de detrás (β), na direção y , e debaixo (q) ou de cima (γ), na direção z . Por exemplo, para o vizinho da esquerda temos

$$b_{n,m}^g(t) \equiv \frac{1}{a_x^i} D_{gxd}^{i-1,j,k}(t).$$

3.1.2 - Equação Semi-discretizada

Por conveniência, podemos colocar a Eq. (3.14) em uma estrutura bloco-heptadiagonal, no qual chegamos à equação da cinética espacial semi-discretizada na formulação do método DFMG:

$$[v]^{-1} \frac{d}{dt} \Phi(t) + [B(t)] \Phi(t) = [S(t)] \Phi(t) + (1 - \beta) [F(t)] \Phi(t) + \sum_{l=1}^L \lambda_l c_{-l}(t) \quad (3.16)$$

$$\frac{d}{dt} c_{-l}(t) = \beta_l [F(t)] \Phi(t) - \lambda_l c_{-l}(t), \quad l = 1, \dots, L, \quad (3.17)$$

onde

$$\Phi(t) \equiv \begin{pmatrix} \phi_{-1}(t) \\ \vdots \\ \phi_{-2}(t) \end{pmatrix}, \quad \phi_{-g}(t) \equiv \text{col}(\phi_g^1(t) \quad \dots \quad \phi_g^n(t) \quad \dots \quad \phi_g^N(t)),$$

$$c_{\sim l}(t) \equiv \begin{pmatrix} \chi_{1,l}^r C_{\sim l}^1(t) \\ \vdots \\ \chi_{1,l}^r C_{\sim l}^N(t) \\ \chi_{2,l}^r C_{\sim l}^1(t) \\ \vdots \\ \chi_{2,l}^r C_{\sim l}^N(t) \end{pmatrix}, \quad c_{\sim l}(t) \equiv \begin{pmatrix} \chi_{1,l}^r C_l^1(t) \\ \vdots \\ \chi_{1,l}^r C_l^N(t) \\ \chi_{2,l}^r C_l^1(t) \\ \vdots \\ \chi_{2,l}^r C_l^N(t) \end{pmatrix},$$

$$[v]^{-1} = \left[\begin{array}{ccc|ccc} 1/\nu_1 & 0 & 0 & 0 & \dots & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & 1/\nu_1 & 0 & \dots & 0 \\ \hline 0 & \dots & 0 & 1/\nu_2 & 0 & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & \dots & 0 & 0 & 0 & 1/\nu_2 \end{array} \right]_{2N \times 2N},$$

$$[B(t)] \equiv \begin{bmatrix} [B_1(t)] & 0 \\ 0 & [B_2(t)] \end{bmatrix},$$

onde:

$$[B_g(t)] \equiv \begin{pmatrix} b_{1,1}^g & b_{1,2}^g & & b_{1,n}^g & & b_{1,N-1}^g & & \\ b_{2,1}^g & b_{2,2}^g & b_{2,3}^g & & b_{2,n+1}^g & & & b_{2,N}^g \\ & b_{3,2}^g & b_{3,3}^g & \ddots & & \ddots & & \\ & & \ddots & \ddots & b_{n-1,n}^g & & b_{n-1,N-1}^g & \\ b_{n,1}^g & & & \ddots & b_{n,n}^g & \ddots & & b_{n,N}^g \\ & b_{n+1,2}^g & & & b_{n+1,n}^g & \ddots & & \\ & & \ddots & & & \ddots & & \\ b_{N-1,1}^g & & & b_{N-1,n-1}^g & & b_{N-2,N-2}^g & b_{N-2,N-1}^g & \\ & b_{N,1}^g & & & b_{N,n}^g & b_{N-1,N-2}^g & b_{N-1,N-1}^g & b_{N-1,N}^g \\ & & & & & & b_{N,N-1}^g & b_{N,N}^g \end{pmatrix},$$

com N sendo o número total de nodos. Já as matrizes de fissão e de espalhamento, são, respectivamente:

$$[F(t)] \equiv \begin{bmatrix} [F_{11}(t)] & [F_{12}(t)] \\ [F_{21}(t)] & [F_{22}(t)] \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad [S(t)] \equiv \begin{bmatrix} 0 & [S_1(t)] \\ [S_2(t)] & 0 \end{bmatrix}$$

que são formadas por blocos diagonais de dimensões $N \times N$:

$$[S_g(t)] = \begin{bmatrix} \sum_{gg'}^1(t) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \sum_{gg'}^n(t) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sum_{gg'}^N(t) \end{bmatrix}, \quad g \neq g', \quad g = 1, 2, \quad g' = 1, 2,$$

$$[F_{gg}(t)] = \chi_g \begin{bmatrix} \nu \sum_{fg}^1(t) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \nu \sum_{fg}^n(t) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \nu \sum_{fg}^N(t) \end{bmatrix}, \quad g = 1, 2,$$

$$[F_{gg'}(t)] = \chi_g \begin{bmatrix} \nu \sum_{fg'}^1(t) & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \ddots & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \nu \sum_{fg'}^n(t) & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \ddots & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \nu \sum_{fg'}^N(t) \end{bmatrix}, \quad g = 1, 2, \quad g' = 1, 2.$$

Como o DFMG forma um sistema bloco-heptadiagonal (devido o operador de difusão ser de segunda ordem), preservando uma estrutura semelhante ao método de diferenças finitas clássico, podemos então adotar as mesmas estratégias de solução empregadas no método de diferenças finitas clássico, como, por exemplo, o método SOR para as iterações internas, o método de Potências para as iterações externas, aceleração de Chebyshev e o método iterativo de Wielandt (WACHSPRESS, 1966, NAKAMURA, 1977).

Observa-se que as eqs. (3.16) e (3.17) representam um problema de valor inicial, onde $\phi_{\sim g}(0)$ e $C_{\sim l}(0)$ são conhecidos.

Se considerarmos que $\chi_1 = 1.0$, $\chi_2 = 0.0$, $\chi_{1,l}^r = 1.0$, $\chi_{2,l}^r = 0.0$ e que não há "upscattering", as matrizes $[F(t)]$ e $[S(t)]$ serão dadas por

$$[F(t)] = \begin{bmatrix} [F_{11}(t)] & [F_{12}(t)] \\ 0 & 0 \end{bmatrix}, \quad [S(t)] = \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ [S_{21}(t)] & 0 \end{bmatrix},$$

e as equações (3.16) e (3.17) ficam

$$[v]^{-1} \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \phi_{\sim 1}(t) \\ \phi_{\sim 2}(t) \end{pmatrix} = - \begin{bmatrix} [B_1(t)] - (1-\beta)[F_{11}(t)] & -(1-\beta)[F_{12}(t)] \\ -[S_{21}(t)] & [B_2(t)] \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{\sim 1}(t) \\ \phi_{\sim 2}(t) \end{pmatrix} + \sum_{l=1}^L \lambda_l \begin{pmatrix} C_{\sim l}(t) \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (3.18)$$

$$\frac{d}{dt} C_{\sim l}(t) = \beta_l \begin{bmatrix} [F_{11}(t)] & [F_{12}(t)] \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \phi_{\sim 1}(t) \\ \phi_{\sim 2}(t) \end{pmatrix} - \lambda_l C_{\sim l}(t). \quad (3.19)$$

3.2 - DISCRETIZAÇÃO NO TEMPO

Para resolver as equações diferenciais ordinárias dependentes do tempo, eqs. (3.18) e (3.19), dois procedimentos de integração numérica foram adotados. O primeiro método integra analiticamente a equação da concentração de precursores (STACEY, 1969, LAWRENCE *et al.*, 1980, AL-CHALABI *et al.*, 1993, HUTT *et al.*, 1993, TAIWO *et al.*, 1993, GINESTAR *et al.*, 1998, ZIMIN *et al.*, 1998), eq. (3.19), enquanto que o outro trata a equação de nêutrons, eq. (3.18), por meio do método de Crank-Nicholson (STACEY, 1969, NAKAMURA, 1977).

3.2.1 - Integração Analítica da Equação da Concentração dos Precursores

Em virtude da presença do inverso da velocidade no termo do fluxo de nêutrons e da constante de decaimento no termo da concentração de precursores, as equações da cinética espacial formam um sistema de equações rígido. Valores típicos de $(1/\nu_g)$ são da ordem de 10^{-7} , enquanto que os menores valores para λ_l são da ordem de 10^{-2} , caracterizando assim escalas diferentes de tempo num mesmo problema.

A aplicação do esquema de integração analítica da equação dos precursores nos métodos da cinética espacial tem como objetivo reduzir a dimensão do sistema de equações pertinentes e conseqüentemente reduzir a rigidez do sistema.

Para integrar analiticamente a equação da concentração dos precursores, eq. (3.19), vamos assumir que a fonte de fissão, dada pelo termo $\sum_{g=1}^2 [F_{1g}(t)] \phi_{\sim g}(t)$, varie linearmente no tempo dentro de cada intervalo de tempo, $[t_\tau, t_{\tau+1}]$, discretizado (Fig. 3.2).

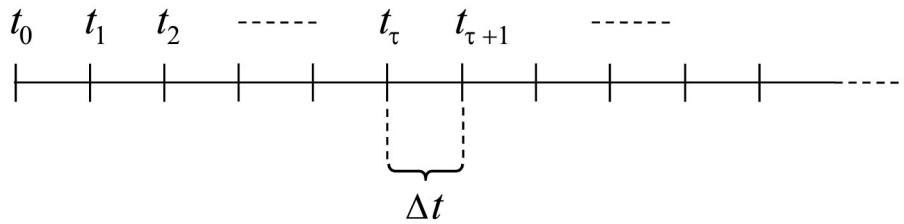


Fig. 3.2 – Esquema de discretização no tempo. O índice τ representa o contador de número de passos.

Com esta aproximação a eq. (3.19) fica na seguinte forma:

$$\frac{d}{dt} C_{\sim l}(t) = -\lambda_l C_{\sim l}(t) + \beta_l \begin{bmatrix} [F_{11}] & [F_{12}] \\ 0 & 0 \end{bmatrix}^\tau \begin{pmatrix} \phi_{\sim 1} \\ \phi_{\sim 2} \end{pmatrix}^\tau + \frac{\beta_l}{\Delta t} (t - t_\tau) \left\{ \begin{bmatrix} [F_{11}] & [F_{12}] \\ 0 & 0 \end{bmatrix}^{\tau+1} \begin{pmatrix} \phi_{\sim 1} \\ \phi_{\sim 2} \end{pmatrix}^{\tau+1} - \begin{bmatrix} [F_{11}] & [F_{12}] \\ 0 & 0 \end{bmatrix}^\tau \begin{pmatrix} \phi_{\sim 1} \\ \phi_{\sim 2} \end{pmatrix}^\tau \right\}. \quad (3.20)$$

Agora, integrando analiticamente a equação (3.20) num intervalo de t_τ a $t_{\tau+1}$, obtemos uma expressão para $C_{\sim l}^{(\tau+1)}(t)$ definida em $t_{\tau+1}$:

$$C_{\sim l}^{(\tau+1)} = C_{\sim l}^{(\tau)} e^{-\lambda_l \Delta t} + \beta_l \left\{ a_l \left[\begin{array}{cc} [F_{11}] & [F_{12}] \\ 0 & 0 \end{array} \right]^{(\tau+1)} \begin{pmatrix} \phi \\ \sim_1 \\ \phi \\ \sim_2 \end{pmatrix}^{(\tau+1)} + b_l \left[\begin{array}{cc} [F_{11}] & [F_{12}] \\ 0 & 0 \end{array} \right]^{(\tau)} \begin{pmatrix} \phi \\ \sim_1 \\ \phi \\ \sim_2 \end{pmatrix}^{(\tau)} \right\}, \quad (3.21)$$

onde os coeficientes são assim definidos:

$$a_l = \frac{(1 + \lambda_l \Delta t)(1 - e^{-\lambda_l \Delta t})}{\lambda_l^2 \Delta t} - \frac{1}{\lambda_l}, \quad b_l = \frac{\lambda_l \Delta t - 1 + e^{-\lambda_l \Delta t}}{\lambda_l^2 \Delta t}.$$

A equação da concentração dos precursores discretizada no tempo, eq. (3.21), será então usada na equação de nêutrons discretizada no tempo na próxima seção.

3.2.2 – Discretização Temporal da Equação de Nêutrons

A discretização usada aqui é a do método de Crank-Nicholson, que pode ser obtido configurando o parâmetro θ igual a 0,5 no método theta (STACEY, 1969, NAKAMURA, 1977, SUTTON *et al.*, 1996). O método de Crank-Nicholson é classificado como um método implícito. No entanto por questões históricas, ele é também considerado como um método semi-implícito.

Usando agora o método de Crank-Nicholson para discretizar a equação (3.18), temos que

$$\left([\mathbf{I}] - \frac{\Delta t}{2} [\mathbf{A}]^{(\tau+1)} \right)^{-1} \Phi_{\sim}^{(\tau+1)} = \left([\mathbf{I}] + \frac{\Delta t}{2} [\mathbf{A}]^{(\tau)} \right) \Phi_{\sim}^{(\tau)} + \nu_1 \Delta t \sum_{l=1}^L \lambda_l c_{\sim}^{(\tau+1)}$$

com

$$\tilde{\Phi} \equiv \begin{pmatrix} \phi \\ \sim_1 \\ \phi \\ \sim_2 \end{pmatrix}, \quad \tilde{c} \equiv \begin{pmatrix} C \\ \sim_l \\ \mathbf{0} \\ \sim \end{pmatrix}$$

e

$$[A] \equiv \begin{bmatrix} \nu_1(-[B_1] + (1-\beta)[F_{11}]) & \nu_1(1-\beta)[F_{12}] \\ \nu_2[S_{21}] & -\nu_2[B_2] \end{bmatrix}.$$

Substituindo a equação (3.21) na expressão acima chegamos, finalmente, ao seguinte sistema de equações lineares:

$$\begin{bmatrix} T_{11} & T_{12} \\ T_{21} & T_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \sim_1 \\ \phi \\ \sim_2 \end{pmatrix}^{(\tau+1)} = \begin{bmatrix} R_{11} & R_{12} \\ R_{21} & R_{22} \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \phi \\ \sim_1 \\ \phi \\ \sim_2 \end{pmatrix}^{(\tau)} + \sum_{l=1}^L \lambda_l e^{-\lambda_l \Delta t} \begin{pmatrix} C \\ \sim_l \\ \mathbf{0} \\ \sim \end{pmatrix}^{(\tau)} \quad (3.22)$$

onde os blocos de matrizes são dados por:

$$[T_{11}] = [I] - \frac{\Delta t}{2} [A_{11}]^{(\tau+1)} - \nu_1 \Delta t \sum_{l=1}^L \lambda_l \beta_l b_l [F_{11}]^{(\tau+1)},$$

$$[T_{12}] = -[A_{12}]^{(\tau+1)} - \nu_1 \Delta t \sum_{l=1}^L \lambda_l \beta_l b_l [F_{12}]^{(\tau+1)},$$

$$[T_{21}] = -[A_{21}]^{(\tau+1)},$$

$$[T_{22}] = [I] - \frac{\Delta t}{2} [A_{22}]^{(\tau+1)},$$

$$[R_{11}] = [I] + \frac{\Delta t}{2} [A_{11}]^{(\tau)} + \nu_1 \Delta t \sum_{l=1}^L \lambda_l \beta_l a_l [F_{11}]^{(\tau)},$$

$$[R_{12}] = \nu_1 \Delta t \sum_{l=1}^L \lambda_l \beta_l a_l [F_{12}]^{(\tau)},$$

$$[R_{21}] = [A_{21}]^{(\tau)} \quad e$$

$$[R_{22}] = [I] + \frac{\Delta t}{2} [A_{22}]^{(\tau)}.$$

O sistema de equações lineares em (3.22) é resolvido diretamente, em cada passo Δt no tempo, por meio da decomposição LU e eliminação progressiva e substituição regressiva (PRESS *et al.*, 1992).

3.3 - O CÓDIGO DO MÉTODO DIRETO

Para implementar o método direto foi criado um programa em linguagem Fortran, e que recebeu o nome de KDFMG3D. Com este código foi possível gerar as soluções de referência nos casos estudados. Na Fig. 3.3 é apresentado um fluxograma com a seqüência geral dos procedimentos do KDFMG3D. O fluxograma do código é o seguinte:

- O fluxo inicial $\phi_g(0)$ é o próprio fluxo obtido na solução do problema estacionário por meio do DFMG e, de acordo com a eq. (3.19), a concentração inicial de precursores $C_l(0)$ é dada por:

$$C_l(0) = \frac{\beta_l}{\lambda_l} \left([F_{11}(t)] \phi_{-1}(0) + [F_{12}(t)] \phi_{-2}(0) \right).$$

- As alterações que o sistema sofre durante um determinado transiente são tratadas, num primeiro momento, pelo NEM, de modo que para cada passo no tempo, um problema estacionário é resolvido por este método.

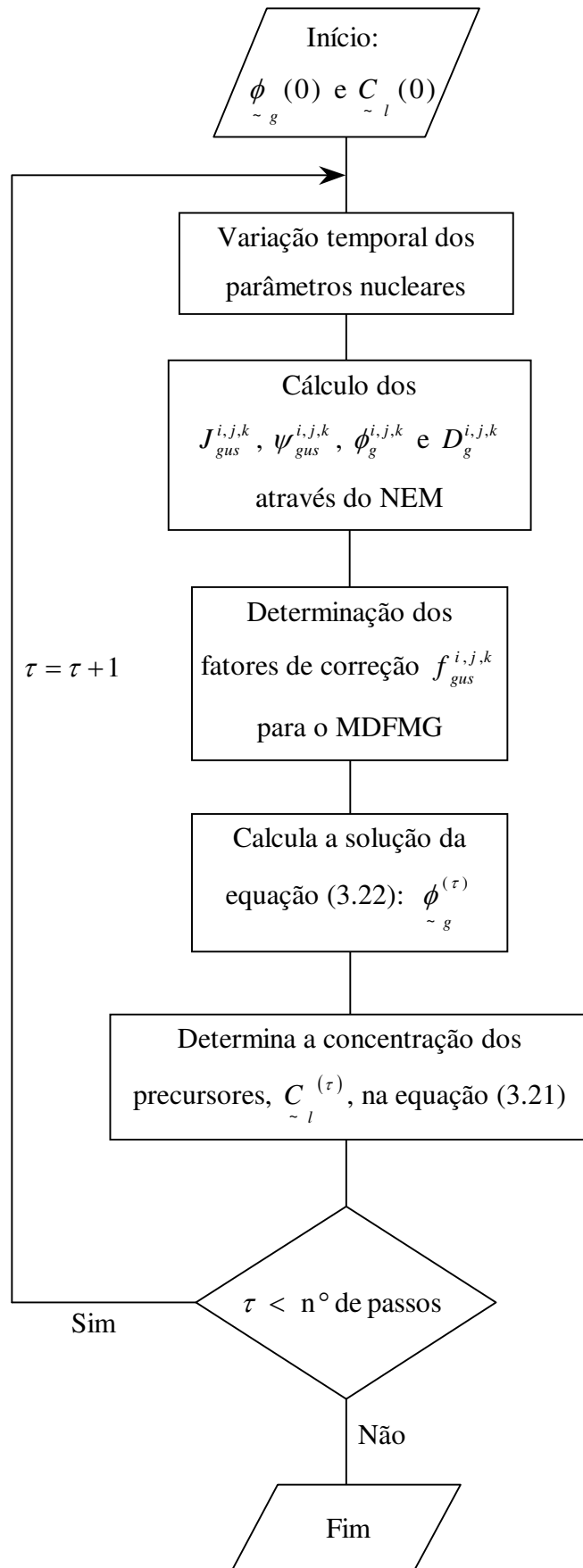


Fig. 3.3 - Fluxograma do código KDFMG3D para o método direto desenvolvido.

- Num segundo momento os fatores de correção de malha grossa $f_{gus}^{i,j,k}$, obtidos por meio das eqs. (3.6) e (3.7), são atualizados com os novos valores de $J_{gus}^{i,j,k}$, $\psi_{gus}^{i,j,k}$, $\phi_g^{i,j,k}$ e $D_g^{i,j,k}$. Na seqüência o sistema linear em (3.22) é resolvido para $\phi_{\sim g}^{(\tau+1)}$, e a concentração dos precursores $C_{\sim l}^{(\tau+1)}$ é atualizada pela eq. (3.21).

Para transientes que envolvam o movimento de barras de controle, a parte espacial do problema é tratada com uma versão modificada do NEM, onde os nodos parcialmente inseridos pela barra de controle são re-homogeneizados. Esta formulação modificada do NEM pode ser vista com mais detalhes no Apêndice B.

CAPÍTULO 4

MÉTODOS MODAIS E DE SÍNTESE

INTRODUÇÃO

Os métodos modais e de síntese (STACEY, 1967 e 1969) são similares no fato de aproximarem o fluxo de nêutrons dependente do tempo em uma expansão em termos de funções pré-determinadas. No caso dos métodos modais, as funções da expansão modal são autofunções de alguma forma da equação de difusão dependente do tempo ou estacionária. Em muitos transientes de interesse as expansões modais requerem um grande número de termos na expansão de autofunções para se conseguir uma boa acurácia. Já, no método de síntese, a expansão é em termos de autofunções que são as soluções da equação de difusão estacionária para um certo conjunto de condições específicas do núcleo. Diferentemente dos métodos modais o método de síntese produz resultados com uma acurácia aceitável com um número muito menor de funções da expansão. Entretanto a escolha dessas funções exige uma experiência considerável, e não se pode garantir que o fluxo reconstruído (sintetizado) é positivo em todo o espaço.

Neste capítulo, os métodos modais e de síntese serão descritos e diferentes tipos de funções para a expansão serão discutidos. Como a teoria envolvida nestes métodos não depende de uma discretização espacial específica, a variável espacial será tratada de forma contínua.

Inicialmente vamos considerar as equações da cinética espacial em (3.1) e (3.2) e escrevê-las na seguinte forma matricial:

$$\frac{1}{[v]} \frac{\partial}{\partial t} \phi(\underline{r}, t) = \left(\nabla [D] \nabla - [R] + [S] + (1 - \beta) \chi [F]^T \right) \phi(\underline{r}, t) + \sum_{l=1}^L \lambda_l \chi_l C_l(\underline{r}, t), \quad (4.1)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} C_l(\underline{r}, t) = \beta_l [F]^T \phi(\underline{r}, t) - \lambda_l C_l(\underline{r}, t), \quad l = 1, \dots, L, \quad (4.2)$$

onde $\phi(\underline{r}, t)$ é um vetor coluna $G \times 1$ dos fluxos em cada grupo de energia, χ e χ_l são

vetores colunas $G \times 1$, representando o espectro de fissão de nêutrons prontos e o espectro de decaimento de precursores de nêutrons retardados, e $[F]^T$ é um vetor linha $1 \times G$ com elementos dados por $\nu \sum_{fg}$. Já as matrizes $[D]$, $[R]$ e $[\nu]^{-1}$ são diagonais ($G \times G$) com os elementos dados, respectivamente, por D_g , Σ_{Rg} e $1/\nu_g$, enquanto a matriz $[S]$ é $G \times G$ com elementos $\Sigma_{sgg'}$.

4.1 - APROXIMAÇÃO SÍNTESE-TEMPO

A aproximação síntese-tempo é derivada expandindo-se o fluxo de nêutrons em uma conhecida distribuição espacial independente do tempo $\varphi_{n,g}(\tilde{r})$, e com os incógnitos coeficientes dependentes do tempo $a_{n,g}(t)$:

$$\tilde{\phi}(\tilde{r}, t) = \sum_{n=1}^N [\varphi_n(\tilde{r})] a_{\tilde{n}}(t), \quad (4.3)$$

onde

$$\tilde{\phi}(\tilde{r}, t) \equiv \begin{bmatrix} \phi_1(\tilde{r}, t) \\ \vdots \\ \phi_G(\tilde{r}, t) \end{bmatrix}, \quad [\varphi(\tilde{r})] \equiv \begin{bmatrix} \varphi_{n,1}(\tilde{r}) & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & \varphi_{n,G}(\tilde{r}) \end{bmatrix} \quad \text{e} \quad a_{\tilde{n}}(t) \equiv \begin{bmatrix} a_{n,1}(t) \\ \vdots \\ a_{n,G}(t) \end{bmatrix}.$$

Para se obter a expressão dos coeficientes da expansão, um procedimento de função peso residual é empregado. O método utiliza um conjunto de matrizes diagonais $[W_n(\tilde{r})]$, onde os elementos não nulos são funções peso por grupo independente do tempo, ou seja

$$[W_n(\tilde{r})] \equiv \begin{bmatrix} W_{n,1}(\tilde{r}) & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & W_{n,G}(\tilde{r}) \end{bmatrix}.$$

Substituindo a expansão indicada pela relação (4.3) na equação de difusão dependente do tempo e na equação dos precursores, equações (4.1) e (4.2), pré-multiplicando o resultado pela função peso $[W_m(\underline{r})]$ e integrando sobre todo o espaço, chegaremos ao seguinte conjunto de equações:

$$\sum_{n=1}^N [T]_{mn} \frac{d}{dt} a_{\sim n}(t) = \sum_{n=1}^N \left(-[A(t)]_{mn} a_{\sim n}(t) + (1-\beta)[F(t)]_{mn}^T a_{\sim n}(t) \right) + \sum_{l=1}^L \lambda_l C_{\sim l, m}(t), \quad (4.4)$$

$$\frac{d}{dt} C_{\sim l, m}(t) = \beta_l \sum_{n=1}^N [F(t)]_{l, mn}^T a_{\sim n}(t) - \lambda_l C_{\sim l, m}(t), \quad (4.5)$$

$$m = 1, \dots, M; \quad l = 1, \dots, L,$$

onde

$$[A(t)]_{mn} \equiv \int d\underline{r} [W_m(\underline{r})] (\nabla[D]\nabla - [R] + [S]) [\varphi_n(\underline{r})],$$

$$[F(t)]_{mn}^T \equiv \int d\underline{r} [W_m(\underline{r})] \chi_{\sim n}^T [\varphi_n(\underline{r})],$$

$$[F(t)]_{l, mn}^T \equiv \int d\underline{r} [W_m(\underline{r})] \chi_{\sim l}^T [\varphi_n(\underline{r})],$$

$$[T]_{mn} \equiv \int d\underline{r} [W_m(\underline{r})] [\nu]^{-1} [\varphi_n(\underline{r})],$$

$$C_{\sim l, m}(t) \equiv \int d\underline{r} [W_m(\underline{r})] \chi_{\sim l} C_l(\underline{r}, t).$$

Este procedimento, de substituir uma expansão em uma determinada equação, depois multiplicar por uma função peso e integrar, é comumente chamado de procedimento de Galerkin ou também de técnica dos resíduos ponderados.

Os sistemas em (4.4) e (4.5) são equações diferenciais ordinárias acopladas, que são resolvidas para $[C(t)]_{l,m}$, e para os coeficientes da expansão, $a_{\tilde{n}}(t)$. E o fluxo de nêutrons dependente do tempo é, então, reconstruído pela equação (4.3).

Na seção 4.3 serão discutidos algumas possíveis escolhas para as funções de base $\varphi_{n,g}(\tilde{r})$ e para a função peso $[W_m(\tilde{r})]$.

4.2 - APROXIMAÇÃO SÍNTESE ESPAÇO -TEMPO

Outro tipo de método de expansão modal é o método síntese espaço-tempo. Neste caso as equações são deduzidas expandindo-se o fluxo de nêutrons dependente do tempo em funções conhecidas $\varphi_{n,g}(x,y)$, de duas dimensões espaciais, combinando com os coeficientes incógnitos $a_{n,g}(z,t)$, que são dependentes do tempo e da dimensão espacial restante. A expansão é dada, então, por

$$\phi(x,y,z,t) = \sum_{n=1}^N [\varphi_n(x,y)] a_{\tilde{n}}(z,t) \quad (4.6)$$

e a função peso é agora definida por

$$[W_n(x,y)] \equiv \begin{bmatrix} W_{n,1}(x,y) & \cdots & 0 \\ \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & \cdots & W_{n,G}(x,y) \end{bmatrix}.$$

Usando o mesmo procedimento descrito anteriormente, mas integrando apenas em x e y , chegamos ao seguinte sistema de equações:

$$\sum_{n=1}^N [T(z)]_{mn} \frac{\partial}{\partial t} a_{\tilde{n}}(z,t) = \sum_{n=1}^N \left(\frac{\partial}{\partial z} [D(z,t)]_{mn} \frac{\partial}{\partial z} a_{\tilde{n}}(z,t) - [A(z,t)]_{mn} a_{\tilde{n}}(z,t) \right) + \sum_{n=1}^N \left((1-\beta) [F(z,t)]_{mn}^T a_{\tilde{n}}(z,t) \right) + \sum_{l=1}^L \lambda_l C_{\tilde{l},m}(z,t) \quad (4.7)$$

$$\frac{\partial}{\partial t} C_{\sim l, m}(z, t) = \beta_l \sum_{n=1}^N [F(z, t)]_{l, mn}^T a_{\sim n}(z, t) - \lambda_l C_{\sim l, m}(z, t), \quad (4.8)$$

$m = 1, \dots, M$; $l = 1, \dots, L$, onde

$$[D(z, t)]_{mn} \equiv \int dx dy [W_m(x, y)] [D] [\varphi_n(z, t)],$$

$$[A(z, t)]_{mn} \equiv \int dx dy [W_m(x, y)] \left(\frac{\partial}{\partial x} [D] \frac{\partial}{\partial x} + \frac{\partial}{\partial y} [D] \frac{\partial}{\partial y} - [R] + [S] \right) [\varphi_n(z, t)],$$

$$[F(z, t)]_{mn}^T \equiv \int dx dy [W_m(x, y)] \chi [F]^T [\varphi_n(z, t)],$$

$$[F(z, t)]_{l, mn}^T \equiv \int dx dy [W_m(x, y)] \chi_{\sim l} [F]^T [\varphi_n(z, t)],$$

$$[T(z)]_{mn} \equiv \int dx dy [W_m(x, y)] [v]^{-1} [\varphi_n(z, t)],$$

$$C_{\sim l, m}(z, t) \equiv \int dx dy [W_m(x, y)] \chi_{\sim l} c_l(r, t).$$

As equações em (4.7) são equações diferenciais parciais acopladas e as equações em (4.8) são equações diferenciais ordinárias acopladas. Com as soluções $a_{\sim n}(z, t)$ e $C_{\sim l, m}(z, t)$ encontradas, o fluxo de nêutrons dependente do tempo é reconstruído pela expressão (4.6).

Um exemplo deste tipo de método de síntese em um problema tridimensional é o uso de duas funções de expansão radiais correspondentes a duas fatias planas bidimensionais com barra inserida e com barra removida. A magnitude relativa dos coeficientes determinará a combinação dessas duas distribuições como uma função do tempo e da coordenada axial. Esta é a idéia básica do código para cinética espacial SYNTH, desenvolvido por BREGA *et al.* (1978 e 1981). Outro exemplo da síntese tempo-espaço é a síntese multicanal, onde funções de expansão separadas são encontradas para sub-regiões radiais do problema.

4.3 - TIPOS DE AUTOFUNÇÕES DE BASE E DE FUNÇÕES PESO

Nos métodos modais a escolha de autofunções para a expansão modal e das funções peso tem um aspecto importante. Várias escolhas de modos (autofunções da expansão) são possíveis. Nas próximas seções descrevemos três classes de autofunções que podem ser utilizadas na expansão modal. Mas antes, para simplificar as eqs. (4.1), (4.2), e os operadores $[A(t)]_{mn}, [F(t)]_{mn}^T$ que aparecem nas eqs. (4.4) e (4.5), definimos os seguintes operadores:

$$[L] \equiv -\nabla[D]\nabla + [R] - [S],$$

$$[M] \equiv \chi[F]^T.$$

4.3.1 - Modos Naturais

Os modos naturais, também chamados de autofunções α , são as autofunções associadas ao operador de balanço de precursores e de nêutrons dependente do tempo, que obedece à seguinte relação:

$$\begin{bmatrix} \{(1-\beta)[M]-[L]\} & \lambda_1\chi_1 & \cdots & \lambda_L\chi_L \\ \beta_1[F]^T & -\lambda_1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \beta_L[F]^T & 0 & \cdots & -\lambda_L \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \Psi_{\sim n} \\ C_{1,n} \\ \vdots \\ C_{L,n} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [v]^{-1} & 0 & \cdots & 0 \\ 0 & 1 & \cdots & 0 \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ 0 & 0 & \cdots & 1 \end{bmatrix} \alpha_n \begin{bmatrix} \Psi_{\sim n} \\ C_{1,n} \\ \vdots \\ C_{L,n} \end{bmatrix}, \quad (4.9)$$

onde $\Psi_{\sim n}$ é um vetor coluna de autofunções por grupo. Podemos escrever a equação (4.9) na forma compacta

$$[H]_{\sim n} \varphi_{\sim n} = \alpha_n [T]_{\sim n} \varphi_{\sim n}.$$

Os modos naturais obedecem a seguinte propriedade de bi-ortogonalidade:

$$\langle \varphi_{\sim m}^* | [T] | \varphi_{\sim n} \rangle = \delta_{mn},$$

onde δ_{mn} é o delta de Kronecker, e a função $\varphi_{\sim m}^*$ é a solução do problema

$$[H]_{\sim n}^* \varphi_{\sim n}^* = \alpha_n [T]_{\sim n} \varphi_{\sim n}^*,$$

com $[H]_{\sim n}^*$ sendo o adjunto Hermitiano do operador $[H]_{\sim n}$.

Tendo em vista que as equações (4.1) e (4.2) podem ser colocadas na seguinte forma matricial

$$[H]_{\sim n} \Psi_{\sim n} = [T]_{\sim n} \Psi_{\sim n},$$

aplicando a propriedade de bi-ortogonalidade e considerando $\varphi_{\sim m}^*$ como sendo a função peso, obtemos o seguinte sistema de equações desacopladas:

$$\langle \varphi_{\sim n}^* | [T] | \varphi_{\sim n} \rangle \alpha_n a_n'(t) = \langle \varphi_{\sim n}^* | [T] | \varphi_{\sim n} \rangle \frac{d}{dt} a_n'(t), \quad (4.10)$$

onde o vetor $a_n'(t)$ é constituído pelos $a_n(t)$ e $C_{\sim l, n}(t)$, soluções das eqs. (4.4) e (4.5).

A característica mais importante da eq. (4.10) é a ausência de modos acoplados, onde a equação para cada coeficiente da expansão modal (ou seja o conjunto $\{ a_n(t), C_{\sim l, n}(t) \}$) é independente dos modos com outros índices n' . Outra característica dos modos naturais é que formam um conjunto completo e são, de modo geral, complexos.

4.3.2 - Modos Ômega

Os modos ômega são as autofunções associadas ao operador de balanço de nêutrons dependente do tempo, mas ignorando os nêutrons retardados. O problema de autovalor é dado por

$$([M] - [L]) \Psi_{\sim n} = \varpi_n [v]^{-1} \Psi_{\sim n}.$$

As autofunções ômega são bi-ortogonais em relação a $\Psi_{\sim n}^*$, que é a solução do problema

$$([M] - [L])^* \Psi_{\sim n}^* = \varpi_n [v]^{-1} \Psi_{\sim n}^*.$$

O uso da relação de bi-ortogonalidade

$$\langle \Psi_{\sim m}^* | [v]^{-1} | \Psi_{\sim n} \rangle = \delta_{mm},$$

conduz a algumas simplificações das equações (4.4) e (4.5), mas não desacopla as diferentes equações modais.

Apesar dos modos ômega envolverem os conhecidos operadores de produção e perdas da teoria de difusão multigrupo, o cálculo desses modos geralmente requer alguma modificação substancial dos códigos computacionais padrões, usados em problemas de difusão estacionário.

4.3.3 - Modos Lambda

Os modos lambda são as autofunções associadas ao operador de balanço de nêutrons estacionário. Estas autofunções e os seus correspondentes autovalores λ_n , satisfazem ao seguinte problema de autovalor:

$$[L] \Psi_{\sim n} = \frac{1}{\lambda_n} [M] \Psi_{\sim n}$$

e obedecem à relação de bi-ortogonalidade

$$\langle \Psi_{\sim m}^* | [M] | \Psi_{\sim n} \rangle = \delta_{mm},$$

com a autofunção $\Psi_{\sim n}^*$ sendo a solução do problema adjunto

$$[L]\Psi_{\sim n}^* = \frac{1}{\lambda_n}[M]\Psi_{\sim n}^* .$$

Em comparação aos outros modos, as autofunções do modo lambda são relativamente mais fáceis de se calcularem, visto que o modo fundamental é justamente o fluxo de nêutrons obtido na solução de problemas de difusão estacionário por meio de códigos tradicionais.

Os harmônicos de alta ordem podem ser computados se condições de simetria forem impostas e aplicando o método de iteração fracionário de Wielandt (WACHSPRESS, 1966), ou eliminando-se os modos de baixa ordem durante o processo iterativo da fonte de fissão (BELCHIOR, 1992).

No caso de se usar apenas uma autofunção do modo lambda, o método pode ser considerado como uma versão do método quase-estático para integrar a equação de difusão de nêutrons.

Os trabalhos de HASHIMOTO *et al.*, (1991 e 1997), VIDAL *et al.* (1997), MIRÓ *et al.* (2002), GINESTAR *et al.* (2002) MUÑOZ-COBOS *et al.* (2000 e 2004) e VERDÚ *et al.* (2005) são exemplos que abordam os modos lambda. Alguns desses trabalhos têm mostrado a utilidade dos modos lambda na análise de transientes com uma interpretação física para as diferentes amplitudes da expansão do fluxo de nêutrons, como por exemplo as que ocorrem no estudo de oscilações em fase e fora de fase em núcleos BWR.

CAPÍTULO 5

MÉTODO DOS PSEUDO-HARMÔNICOS

INTRODUÇÃO

O método dos pseudo-harmônicos surgiu como uma alternativa a alguns métodos da teoria de perturbação que apresentavam limitações em problemas mais complexos.

Gandini (1978) propôs uma metodologia de perturbação explícita, chamada de método padrão ou método dos harmônicos. Nesta metodologia o fluxo de nêutrons perturbado era construído por meio de uma expansão em autofunções associadas ao operador de difusão. O método padrão produzia excelentes resultados quando aplicado em problemas unidimensionais e para um grupo de energia, no entanto em problemas multidimensionais e com mais grupos de energia, dificuldades numéricas e matemáticas eram observadas.

Em vista dessa limitação foi desenvolvido o método dos pseudo-harmônicos (GOMIT *et al.*, 1982), que tem como idéia básica construir o fluxo de nêutrons perturbado por meio de uma expansão em autofunções associadas à parte do operador de difusão que contém apenas a fuga e a remoção. Como esta parte do operador de difusão é representado por uma matriz simétrica, o problema de autovalor associado a esta matriz gera autovalores e autofunções reais. Os pseudo-harmônicos também possuem as seguintes propriedades:

- i. satisfazem às mesmas condições de contorno que o fluxo de nêutrons;
- ii. não é necessário calcular as autofunções adjuntas;
- iii. não há degenerescência nas autofunções;
- iv. são ortogonais entre si;
- v. são calculados grupo a grupo, a partir de equações desacopladas.

Aplicados inicialmente com a discretização em diferenças finitas e posteriormente com a discretização nodal, os pseudo-harmônicos obtiveram excelentes

resultados em variados problemas perturbativos estacionários. Também mostrou a sua acurácia em problemas com fonte fixa, não, necessariamente, perturbativos.

O método dos pseudo-harmônicos tem sido objeto de estudo de forma recorrente no Programa de Engenharia Nuclear da COPPE - UFRJ, onde um número considerável de teses e artigos em periódicos foi publicado com este tema.

Os trabalhos de GOMIT *et al.* (1985), DA SILVA *et al.* (1987 e 1988), CLARO *et al.* (1987, 1991 e 1993), CLARO (1992), DE ABREU (1988, 1989 e 1990), THOMÉ (1997), DE LIMA (2000), DE LIMA *et al.* (2004 e 2005a) são alguns exemplos que abordam o método dos pseudo-harmônicos.

Na próxima seção será discutido como os pseudo-harmônicos são obtidos em problemas estacionários discretizados via o método DFMG.

5.1 - DETERMINAÇÃO DOS PSEUDO-HARMÔNICOS

Para se calcularem os pseudo-harmônicos vamos considerar a equação de difusão de nêutrons independente do tempo discretizada por meio do DFMG, para um sistema tridimensional, para dois grupos de energia, na estrutura compacta bloco-heptadiagonal:

$$[B]\tilde{\Phi} = \frac{1}{K_{eff}}[F]\tilde{\Phi} + [S]\tilde{\Phi}, \quad (5.1)$$

e que pode ser deduzida a partir das eqs. (3.38) e (3.39).

As matrizes $[B]$, $[S]$ e $[F]$ são as matrizes $[B(t)]$, $[S(t)]$ e $[F(t)]$, definidas na seção (3.1.2), independentes do tempo.

A matriz $[B]$, que representa a fuga mais a remoção, presente no lado esquerdo da eq. (5.1), é ligeiramente anti-simétrica. Tendo em vista, que na implementação do método dos pseudo-harmônicos as auto-funções são calculadas a partir de uma matriz simétrica, é conveniente separar a parte simétrica da matriz $[B]$ (CLARO *et al.*, 1991, CLARO, 1992). Para isso podemos escrever a matriz $[B]$ em duas partes, uma simétrica e outra anti-simétrica, na seguinte forma:

$$[B] = [B]^S + [B]^A, \quad (5.2)$$

onde

$$[B]^S \equiv \frac{[B] + [B]^T}{2}$$

é a parte simétrica e

$$[B]^A \equiv \frac{[B] - [B]^T}{2}$$

é a parte anti-simétrica.

Com a matriz $[B]^S$ separada, construímos o seguinte problema de autovalor:

$$[B_g]^S \omega_{\sim g,n} = \lambda_{g,n} \omega_{\sim g,n}, \quad (5.3)$$

$$n = 1, 2, 3, \dots, nph, \quad (nph = \text{número total de auto-funções}),$$

onde as auto-funções $\omega_{\sim g,n}$ são os pseudo-harmônicos do sistema e os $\lambda_{g,n}$ são os correspondentes autovalores. Os pseudo-harmônicos seguem às mesmas condições de contorno do fluxo de nêutrons, formam um conjunto completo em um espaço de funções reais e obedecem à seguinte relação de ortogonalidade:

$$\left\langle \omega_{\sim g,n}^T \omega_{\sim g,m} \right\rangle = \delta_{n,m}, \quad (5.4)$$

onde $\delta_{n,m}$ é o delta de Kronecker.

Na próxima seção será mostrado como podemos aplicar os pseudo-harmônicos na solução de um sistema linear.

5.2 - EXPANSÃO EM PSEUDO-HARMÔNICOS NA SOLUÇÃO DE UM PROBLEMA DE FONTE FIXA

A aplicação dos pseudo-harmônicos em problemas de fonte fixa consiste basicamente em aproximar a solução do problema em uma expansão cujas funções de base são os próprios pseudo-harmônicos (DE LIMA *et al.*, 2005a). A formulação do problema de fonte fixa ou do sistema linear propriamente dito pode ser feita substituindo-se a equação (5.2) na equação (5.1), o que resultará em:

$$[B]^S \tilde{\Phi} = Q, \quad (5.5)$$

onde

$$Q \equiv [S] \tilde{\Phi}_{\sim dir.} + \frac{1}{K_{eff}} [F] \tilde{\Phi}_{\sim dir.} - [B]^A \tilde{\Phi}_{\sim dir.}, \quad (5.6)$$

onde o fluxo $\tilde{\Phi}_{\sim dir.}$ é a solução da equação (5.1), obtida diretamente pelo DFMG. O sistema representado em (5.5) e com a fonte definida em (5.6) será portanto o problema de fonte fixa pertinente ao nosso caso.

Supondo agora que a solução da equação (5.5) seja dada pela seguinte expansão:

$$\tilde{\Phi} = \begin{bmatrix} \phi_{\sim 1} \\ \phi_{\sim 2} \end{bmatrix} = \sum_{n=1}^N \left(a_{n,1} \begin{bmatrix} \omega_{\sim 1,n} \\ 0 \end{bmatrix} + a_{n,2} \begin{bmatrix} 0 \\ \omega_{\sim 2,n} \end{bmatrix} \right), \quad (5.7)$$

onde $\omega_{\sim g,n}$ são os pseudo-harmônicos definidos no problema de auto-valor em (5.3), e

substituindo esta expansão na eq. (5.5) e usando a eq. (5.3), tem-se:

$$[B]^S \tilde{\Phi} = \sum_{n=1}^N \left(a_{n,1} \begin{bmatrix} \lambda_{1,n} \omega_{\sim 1,n} \\ 0 \end{bmatrix} + a_{n,2} \begin{bmatrix} 0 \\ \lambda_{2,n} \omega_{\sim 2,n} \end{bmatrix} \right) = \begin{bmatrix} Q_{\sim 1} \\ Q_{\sim 2} \end{bmatrix}. \quad (5.8)$$

As constantes $a_{n,g}$ são determinadas multiplicando-se a eq. (5.8) por $\omega_{\sim g,m}^T$, integrando-se a equação resultante e fazendo uso da relação de ortogonalidade, eq. (5.4). Com isso chegamos a:

$$a_{n,g} = \frac{\langle \omega_{\sim g,n}^T Q \rangle}{\lambda_{l,i} \langle \omega_{\sim g,n}^T \omega_{\sim g,n} \rangle}; \quad g = 1, 2.$$

Com os coeficientes $a_{n,g}$ determinados o fluxo de nêutrons é então reconstruído por meio da expansão (5.7).

Podemos observar que a discretização no DFMG conduz a uma fácil implementação dos pseudo-harmônicos, onde o operador de fuga + remoção pode ser representado por uma estrutura matricial conveniente para a obtenção dos pseudo-harmônicos, pois o DFMG preserva a estrutura básica do diferenças finitas clássico, com matrizes bem definidas. Em outros métodos nodais, como por exemplo o NEM, essa característica não é observada.

CAPÍTULO 6

APLICAÇÃO DOS PSEUDO-HARMÔNICOS NA EXPANSÃO MODAL

INTRODUÇÃO

Considerando a teoria envolvida nos métodos modais apresentados no capítulo 4, será desenvolvido um método de expansão modal que empregue os pseudo-harmônicos como sendo não só as auto-funções de base mas como também as funções peso. Como visto na seção 4.3, foram apresentadas as seguintes classes de auto-funções de base:

- i. os modos naturais, que são as autofunções associadas ao operador de balanço de precursores e de nêutrons dependente do tempo;
- ii. os modos ômega, que são as autofunções associadas ao operador de balanço de nêutrons dependente do tempo, mas ignorando os nêutrons retardados;
- iii. e os modos lambda que são as autofunções associadas ao operador de balanço de nêutrons estacionário.

Seguindo, portanto, esta linha de classificação, a aplicação dos pseudo-harmônicos na expansão modal será denominada de pseudo modos. O método proposto foi previamente apresentado em (DE LIMA *et al.*, 2005b).

É bom ressaltar que, diferentemente do capítulo 4, onde a variável espacial foi tratada como sendo contínua, agora a variável espacial será tratada de forma discretizada.

6.1 - EXPANSÃO EM PSEUDO MODOS

Partindo-se das equações da cinética espacial semi-discretizadas pelo método DFMG, eqs. (3.16) e (3.17):

$$[v]^{-1} \frac{d}{dt} \Phi(t) + [B(t)] \Phi(t) = [S(t)] \Phi(t) + (1 - \beta) [F(t)] \Phi(t) + \sum_{l=1}^L \lambda_l c_{\sim l}(t), \quad (6.1)$$

$$\frac{d}{dt} c_{\sim l}(t) = \beta_l [F(t)] \Phi(t) - \lambda_l c_{\sim l}(t), \quad (6.2)$$

podemos definir as seguintes expansões modais:

$$\Phi(t) = \sum_{m=1}^{nph} \left(\varphi_{1,m}(t) W_{\sim 1,m} + \varphi_{2,m}(t) W_{\sim 2,m} \right), \quad (6.3)$$

$$c_{\sim l}(t) = \sum_{m=1}^{nph} \left(\mathcal{E}_{1,m}^l(t) W_{\sim 1,m} + \mathcal{E}_{2,m}^l(t) W_{\sim 2,m} \right), \quad nph = \text{número de pseudo-harmônicos} \quad (6.4)$$

onde as funções de base são dadas pelos pseudo-harmônicos calculados no estado estacionário, conforme mostrado no capítulo 5. Comparando as duas expansões com a expansão (5.7) observa-se que a forma é a mesma, onde a diferença é que agora os coeficientes incógnitos $\varphi_{g,m}(t)$ e $\mathcal{E}_{g,m}^l(t)$ são dependentes do tempo e que os pseudo-harmônicos estão organizados em super-vetores:

$$W_{\sim 1,m} \equiv \begin{bmatrix} \omega_{1,m}^1 \\ \vdots \\ \omega_{1,m}^N \\ \hline 0 \\ \vdots \\ 0 \end{bmatrix} \Rightarrow W_{\sim 1,m} = \begin{bmatrix} \omega_{\sim 1,m} \\ 0 \end{bmatrix}, \quad W_{\sim 2,m} \equiv \begin{bmatrix} 0 \\ \vdots \\ 0 \\ \hline \omega_{2,m}^1 \\ \vdots \\ \omega_{2,m}^N \end{bmatrix} \Rightarrow W_{\sim 2,m} = \begin{bmatrix} 0 \\ \omega_{\sim 2,m} \end{bmatrix}.$$

Para se chegar no sistema de equações modal, usa-se a técnica dos resíduos ponderados. Substituindo, então, as eqs. (6.3) e (6.4) em (6.1) e (6.2), temos que

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_{m=1}^{nph} \sum_{k=1}^2 \varphi_{k,m}(t) [\mathbf{v}]^{-1} \mathbf{W}_{\sim k,m} \right) + \sum_{m=1}^{nph} \sum_{k=1}^2 \varphi_{k,m}(t) ([\mathbf{B}(t)] - [\mathbf{S}(t)]) \mathbf{W}_{\sim k,m} - \quad (6.5)$$

$$(1 - \beta) \sum_{m=1}^{nph} \sum_{k=1}^2 \varphi_{k,m}(t) [\mathbf{F}(t)] \mathbf{W}_{\sim k,m} = \sum_{m=1}^{nph} \sum_{k=1}^2 \sum_{l=1}^L \lambda_l \mathcal{E}_{k,m}^l(t) \mathbf{W}_{\sim g,m},$$

$$\frac{d}{dt} \sum_{m=1}^{nph} \sum_{k=1}^2 \mathcal{E}_{k,m}^l(t) \mathbf{W}_{\sim k,m} = \beta_l \sum_{m=1}^{nph} \sum_{k=1}^2 \varphi_{k,m}(t) [\mathbf{F}(t)] \mathbf{W}_{\sim k,m} - \lambda_l \sum_{k=1}^2 \mathcal{E}_{k,m}^l(t) \mathbf{W}_{\sim k,m}. \quad (6.6)$$

Adotando como função peso o transposto dos $\mathbf{W}_{\sim g,n}$ e, portanto, multiplicando as eqs.

(6.5) e (6.6) pelo super-vetor transposto, $\mathbf{W}_{\sim g,n}^T$, chegamos à

$$\frac{d}{dt} \left(\sum_{m=1}^{nph} \sum_{k=1}^2 \varphi_{k,m}(t) \mathbf{W}_{\sim g,n}^T [\mathbf{v}]^{-1} \mathbf{W}_{\sim k,m} \right) + \sum_{m=1}^{nph} \sum_{k=1}^2 \varphi_{k,m}(t) \mathbf{W}_{\sim g,n}^T ([\mathbf{B}(t)] - [\mathbf{S}(t)]) \mathbf{W}_{\sim k,m} - \quad (6.7)$$

$$(1 - \beta) \sum_{m=1}^{nph} \sum_{k=1}^2 \varphi_{k,m}(t) \mathbf{W}_{\sim g,n}^T [\mathbf{F}(t)] \mathbf{W}_{\sim k,m} = \sum_{m=1}^{nph} \sum_{k=1}^2 \sum_{l=1}^L \lambda_l \mathcal{E}_{k,m}^l(t) \mathbf{W}_{\sim g,n}^T \mathbf{W}_{\sim g,m},$$

$$\frac{d}{dt} \sum_{m=1}^{nph} \sum_{k=1}^2 \mathcal{E}_{k,m}^l(t) \mathbf{W}_{\sim g,n}^T \mathbf{W}_{\sim k,m} = \quad (6.8)$$

$$\beta_l \sum_{m=1}^{nph} \sum_{k=1}^2 \varphi_{k,m}(t) \mathbf{W}_{\sim g,n}^T [\mathbf{F}(t)] \mathbf{W}_{\sim k,m} - \lambda_l \sum_{k=1}^2 \mathcal{E}_{k,m}^l(t) \mathbf{W}_{\sim g,n}^T \mathbf{W}_{\sim k,m}.$$

As matrizes $[\mathbf{B}(t)]$, $[\mathbf{S}(t)]$ e $[\mathbf{F}(t)]$ operando nos super-vetores, fornecem as seguintes relações:

$$([\mathbf{B}(t)] - [\mathbf{S}(t)]) \mathbf{W}_{\sim 1,m} = \begin{bmatrix} [\mathbf{B}_1(t)] & -[\mathbf{S}_{12}(t)] \\ -[\mathbf{S}_{21}(t)] & [\mathbf{B}_2(t)] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \omega_{\sim 1,m} \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [\mathbf{B}_1(t)] \omega_{\sim 1,m} \\ -[\mathbf{S}_{21}(t)] \omega_{\sim 1,m} \end{bmatrix}, \quad (6.9)$$

$$([B(t)]-[S(t)])\mathbf{W}_{\sim 2,m} = \begin{bmatrix} [B_1(t)] & -[S_{12}(t)] \\ -[S_{21}(t)] & [B_2(t)] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ \omega_{\sim 2,m} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -[S_{12}(t)]\omega_{\sim 2,m} \\ [B_1(t)]\omega_{\sim 2,m} \end{bmatrix}, \quad (6.10)$$

$$[F(t)]\mathbf{W}_{\sim 1,m} = \begin{bmatrix} [F_{11}(t)] & [F_{12}(t)] \\ [F_{21}(t)] & [F_{22}(t)] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \omega_{\sim 1,m} \\ 0 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [F_{11}(t)]\omega_{\sim 1,m} \\ [F_{21}(t)]\omega_{\sim 1,m} \end{bmatrix} \quad (6.11)$$

e

$$[F(t)]\mathbf{W}_{\sim 2,m} = \begin{bmatrix} [F_{11}(t)] & [F_{12}(t)] \\ [F_{21}(t)] & [F_{22}(t)] \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ \omega_{\sim 2,m} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} [F_{12}(t)]\omega_{\sim 2,m} \\ [F_{22}(t)]\omega_{\sim 2,m} \end{bmatrix}, \quad (6.12)$$

enquanto que as formas bilineares são dadas por:

$$\mathbf{W}_{\sim 1,n}^T ([B(t)]-[S(t)])\mathbf{W}_{\sim k,m} = \begin{cases} \omega_{\sim 1,n}^T [B_1(t)]\omega_{\sim 1,m}, & \text{para } k=1 \\ -\omega_{\sim 1,n}^T [S_{12}(t)]\omega_{\sim 2,m}, & \text{para } k=2, \end{cases} \quad (6.13)$$

$$\mathbf{W}_{\sim 2,n}^T ([B(t)]-[S(t)])\mathbf{W}_{\sim k,m} = \begin{cases} \omega_{\sim 2,n}^T [S_{21}(t)]\omega_{\sim 1,m}, & \text{para } k=1 \\ -\omega_{\sim 2,n}^T [B_2(t)]\omega_{\sim 2,m}, & \text{para } k=2, \end{cases} \quad (6.14)$$

$$\mathbf{W}_{\sim 1,n}^T [F(t)]\mathbf{W}_{\sim k,m} = \begin{cases} \omega_{\sim 1,n}^T [F_{11}(t)]\omega_{\sim 1,m}, & \text{para } k=1 \\ -\omega_{\sim 1,n}^T [F_{12}(t)]\omega_{\sim 2,m}, & \text{para } k=2, \end{cases} \quad (6.15)$$

$$\mathbf{W}_{\sim 2,n}^T [F(t)] \mathbf{W}_{\sim k,m} = \begin{cases} \omega_{\sim 2,n}^T [F_{21}(t)] \omega_{\sim 1,m}, & \text{para } k=1 \\ -\omega_{\sim 2,n}^T [F_{22}(t)] \omega_{\sim 2,m}, & \text{para } k=2, \end{cases} \quad (6.16)$$

$$\mathbf{W}_{\sim 1,n}^T [\mathbf{v}]^{-1} \mathbf{W}_{\sim k,m} = \begin{cases} \nu_1^{-1} \omega_{\sim 1,n}^T \omega_{\sim 1,m}, & \text{para } k=1 \\ 0, & \text{para } k=2 \end{cases} \quad (6.17)$$

$$\mathbf{W}_{\sim 2,n}^T [\mathbf{v}]^{-1} \mathbf{W}_{\sim k,m} = \begin{cases} 0, & \text{para } k=1 \\ \nu_2^{-1} \omega_{\sim 2,n}^T \omega_{\sim 2,m}, & \text{para } k=2. \end{cases} \quad (6.18)$$

Substituindo as relações de (6.13) à (6.18) nas eqs. (6.7) e (6.8), e com auxílio da relação de ortogonalidade dos pseudo modos, eq. (5.4):

$$\left\langle \omega_{\sim g,n}^T \omega_{\sim g,m} \right\rangle = \delta_{n,m},$$

temos o seguinte sistema modal de equações diferenciais ordinárias:

$$\begin{aligned} \frac{1}{\nu_1} \frac{d}{dt} \varphi_{1,n}(t) + \sum_{m=1}^{nph} \left\{ \left(\omega_{\sim 1,n}^T [B_1(t)] \omega_{\sim 1,m} \right) \varphi_{1,m}(t) - \left(\omega_{\sim 1,n}^T [S_{12}(t)] \omega_{\sim 2,m} \right) \varphi_{2,m}(t) \right\} - \\ (1-\beta) \sum_{m=1}^{nph} \left\{ \left(\omega_{\sim 1,n}^T [F_{11}(t)] \omega_{\sim 1,m} \right) \varphi_{1,m}(t) + \left(\omega_{\sim 1,n}^T [F_{22}(t)] \omega_{\sim 2,m} \right) \varphi_{2,m}(t) \right\} = \sum_{l=1}^L \lambda_l \mathcal{E}_{1,n}^l(t) \end{aligned} \quad (6.19)$$

$$\begin{aligned} \frac{1}{\nu_2} \frac{d}{dt} \varphi_{2,n}(t) + \sum_{m=1}^{nph} \left\{ \left(\omega_{\sim 2,n}^T [B_2(t)] \omega_{\sim 2,m} \right) \varphi_{2,m}(t) - \left(\omega_{\sim 2,n}^T [S_{21}(t)] \omega_{\sim 1,m} \right) \varphi_{1,m}(t) \right\} - \\ (1-\beta) \sum_{m=1}^{nph} \left\{ \left(\omega_{\sim 2,n}^T [F_{21}(t)] \omega_{\sim 1,m} \right) \varphi_{1,m}(t) + \left(\omega_{\sim 2,n}^T [F_{22}(t)] \omega_{\sim 2,m} \right) \varphi_{2,m}(t) \right\} = \sum_{l=1}^L \lambda_l \mathcal{E}_{2,n}^l(t) \end{aligned} \quad (6.20)$$

$$\frac{d}{dt} \mathcal{E}_{1,n}^l(t) = \beta_l \sum_{m=1}^{nph} \left\{ \left(\omega_{\sim 1,n}^T [F_{11}(t)] \omega_{\sim 1,m} \right) \varphi_{1,m}(t) + \left(\omega_{\sim 1,n}^T [F_{12}(t)] \omega_{\sim 2,m} \right) \varphi_{2,m}(t) \right\} - \lambda_l \mathcal{E}_{1,n}^l(t) \quad (6.21)$$

e

$$\frac{d}{dt} \mathcal{E}_{2,n}^l(t) = \beta_l \sum_{m=1}^{nph} \left\{ \left(\omega_{\sim 2,n}^T [F_{21}(t)] \omega_{\sim 1,m} \right) \varphi_{1,m}(t) + \left(\omega_{\sim 2,n}^T [F_{22}(t)] \omega_{\sim 2,m} \right) \varphi_{2,m}(t) \right\} - \lambda_l \mathcal{E}_{2,n}^l(t). \quad (6.22)$$

Se considerarmos as mesmas simplificações da seção 3.1.3 quais sejam: $\chi_1 = 1.0$, $\chi_2 = 0.0$, $\chi_{1,l}^r = 1.0$, $\chi_{2,l}^r = 0.0$ e ausência de “upscattering”, as eqs. de (6.19) à (6.22) são colocadas na seguinte forma compacta:

$$[\mathbf{v}]^{-1} \frac{d}{dt} \begin{pmatrix} \varphi_1(t) \\ \sim \\ \varphi_2(t) \\ \sim \end{pmatrix} + \begin{bmatrix} \langle B_{11} \rangle - (1-\beta) \langle F_{11} \rangle & -(1-\beta) \langle F_{12} \rangle \\ -\langle S_{21} \rangle & \langle B_{22} \rangle \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1(t) \\ \sim \\ \varphi_2(t) \\ \sim \end{pmatrix} = \sum_{l=1}^L \lambda_l \begin{pmatrix} \mathcal{E}_{\sim 1}^l(t) \\ 0 \end{pmatrix} \quad (6.23)$$

e

$$\frac{d}{dt} \mathcal{E}_{\sim 1}^l(t) = \beta_l \begin{bmatrix} \langle F_{11}(t) \rangle & \langle F_{12}(t) \rangle \\ 0 & 0 \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_1(t) \\ \sim \\ \varphi_2(t) \\ \sim \end{pmatrix} - \lambda_l \mathcal{E}_{\sim 1}^l(t). \quad (6.24)$$

onde a notação $\langle \text{matriz} \rangle$ representa as matrizes das formas bilineares:

$$\langle B_{gg}(t) \rangle = \sum_{n=1}^{nph} \sum_{m=1}^{nph} \omega_{\sim g,n}^T [B_g(t)] \omega_{\sim g,m}, \quad g=1,2, \quad ,$$

$$\langle F_{gg'}(t) \rangle = \sum_{n=1}^{nph} \sum_{m=1}^{nph} \omega_{\sim g,n}^T [F_{gg'}(t)] \omega_{\sim g',m}, \quad g=1, \quad , g'=1,2$$

e

$$\langle S_{21}(t) \rangle = \sum_{n=1}^{nph} \sum_{m=1}^{nph} \omega_{\sim 2,n}^T [S_{21}(t)] \omega_{\sim 1,m},$$

enquanto que os vetores são definidos por:

$$\varphi_{\sim g}(t) = \begin{pmatrix} \varphi_{g,1}(t) \\ \vdots \\ \varphi_{g,n}(t) \\ \vdots \\ \varphi_{g,nph}(t) \end{pmatrix}, \quad g=1,2, \quad \mathcal{E}_{\sim 1}^l(t) = \begin{pmatrix} \mathcal{E}_{1,1}^l(t) \\ \vdots \\ \mathcal{E}_{1,n}^l(t) \\ \vdots \\ \mathcal{E}_{1,nph}^l(t) \end{pmatrix}.$$

6.2 – SOLUÇÃO DO SISTEMA MODAL

Para que possamos determinar o fluxo de nêutrons e a concentração de precursores por intermédio das expansões modais em (6.3) e (6.4), temos que resolver o sistema modal em (6.23) e (6.24).

Comparando a equação modal dos nêutrons, eq. (6.23) com a (3.18) e a equação modal da concentração, (6.24), com a (3.19), verifica-se a semelhança entre as equações. Por questão de comparação é de interesse que tanto o método de referência como o método modal tenham o mesmo tratamento na dependência do tempo, pelo menos em um primeiro estudo. Com isso será utilizado o mesmo procedimento da seção 3.3 para resolver as eqs. (6.23) e (6.24). Ou seja a eq. (6.24) será integrada analiticamente enquanto que a eq. (6.23) será resolvida por meio do método de Crank-Nicholson.

6.2.1 – Integração Analítica da Equação Modal da Concentração

A integração analítica da equação modal da concentração dos precursores, eq. (6.24), é feita assumindo-se que o termo $\sum_{g=1}^2 \langle F_{1g} \rangle \varphi_{\sim g}(t)$ varie linearmente no tempo em cada intervalo de tempo, $[t_\tau, t_{\tau+1}]$.

Esta aproximação conduz à seguinte equação:

$$\begin{aligned} \frac{d}{dt} \mathcal{E}_{\sim 1}^l(t) = & -\lambda_l \mathcal{E}_{\sim 1}^l(t) + \beta_l \begin{bmatrix} \langle F_{11} \rangle & \langle F_{12} \rangle \\ 0 & 0 \end{bmatrix}^\tau \begin{pmatrix} \varphi_{\sim 1} \\ \varphi_{\sim 2} \end{pmatrix}^\tau + \\ & \frac{\beta_l}{\Delta t} (t - t_\tau) \left\{ \begin{bmatrix} \langle F_{11} \rangle & \langle F_{12} \rangle \\ 0 & 0 \end{bmatrix}^{\tau+1} \begin{pmatrix} \varphi_{\sim 1} \\ \varphi_{\sim 2} \end{pmatrix}^{\tau+1} - \begin{bmatrix} \langle F_{11} \rangle & \langle F_{12} \rangle \\ 0 & 0 \end{bmatrix}^\tau \begin{pmatrix} \varphi_{\sim 1} \\ \varphi_{\sim 2} \end{pmatrix}^\tau \right\}. \end{aligned} \quad (6.25)$$

Integrando analiticamente a equação (6.25) num intervalo de t_τ a $t_{\tau+1}$, chegamos à seguinte equação discretizada no tempo:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\sim 1}^{l(\tau+1)} = & \mathcal{E}_{\sim 1}^{l(\tau)} e^{-\lambda_l \Delta t} + \beta_l \left\{ a_l \begin{bmatrix} \langle F_{11} \rangle & \langle F_{12} \rangle \\ 0 & 0 \end{bmatrix}^{\tau+1} \begin{pmatrix} \varphi_{\sim 1} \\ \varphi_{\sim 2} \end{pmatrix}^{\tau+1} + \right. \\ & \left. b_l \begin{bmatrix} \langle F_{11} \rangle & \langle F_{12} \rangle \\ 0 & 0 \end{bmatrix}^\tau \begin{pmatrix} \varphi_{\sim 1} \\ \varphi_{\sim 2} \end{pmatrix}^\tau \right\}, \end{aligned} \quad (6.26)$$

onde os coeficientes a_l e b_l são definidos da mesma maneira que na seção 3.3:

$$a_l = \frac{(1 + \lambda_l \Delta t)(1 - e^{-\lambda_l \Delta t})}{\lambda_l^2 \Delta t} - \frac{1}{\lambda_l}, \quad b_l = \frac{\lambda_l \Delta t - 1 + e^{-\lambda_l \Delta t}}{\lambda_l^2 \Delta t}.$$

6.2.2 – Discretização Temporal da Equação Modal de Nêutrons

Aplicando o método de Crank-Nicholson para resolver a eq. (6.21), temos que:

$$\left([I] - \frac{\Delta t}{2} \langle A \rangle^{(\tau+1)} \right)^{-1} \tilde{\Psi}^{(\tau+1)} = \left([I] + \frac{\Delta t}{2} \langle A \rangle^{(\tau)} \right) \tilde{\Psi}^{(\tau)} + \nu_1 \Delta t \sum_{l=1}^L \lambda_l \tilde{c}^{(\tau+1)}$$

com

$$\tilde{\Psi} \equiv \begin{pmatrix} \varphi_{\sim 1} \\ \varphi_{\sim 2} \end{pmatrix}, \quad \tilde{c} \equiv \begin{pmatrix} \mathcal{E}^l_{\sim 1} \\ 0 \end{pmatrix}$$

e

$$\langle A \rangle \equiv \begin{bmatrix} \nu_1 (-\langle B_1 \rangle + (1-\beta)\langle F_{11} \rangle) & \nu_1 (1-\beta)\langle F_{12} \rangle \\ \nu_2 \langle S_{21} \rangle & -\nu_2 \langle B_2 \rangle \end{bmatrix}.$$

Fazendo a substituição da eq. (6.26) no último termo da equação acima, chegamos no seguinte sistema linear, análogo ao da eq. (3.44):

$$\begin{bmatrix} \langle T_{11} \rangle & \langle T_{12} \rangle \\ \langle T_{21} \rangle & \langle T_{22} \rangle \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{\sim 1} \\ \varphi_{\sim 1} \end{pmatrix}^{(\tau+1)} = \begin{bmatrix} \langle R_{11} \rangle & \langle R_{12} \rangle \\ 0 & \langle R_{22} \rangle \end{bmatrix} \begin{pmatrix} \varphi_{\sim 1} \\ \varphi_{\sim 1} \end{pmatrix}^{(\tau)} + \sum_{l=1}^L \lambda_l e^{-\lambda_l \Delta t} \begin{pmatrix} \mathcal{E}^l_{\sim 1} \\ 0 \end{pmatrix}^{(\tau)}, \quad (6.27)$$

onde

$$\langle T_{11} \rangle = [I] - \frac{\Delta t}{2} \langle A_{11} \rangle^{(\tau+1)} - \nu_1 \Delta t \sum_{l=1}^L \lambda_l \beta_l b_l \langle F_{11} \rangle^{(\tau+1)},$$

$$\langle T_{12} \rangle = -\langle A_{12} \rangle^{(\tau+1)} - \nu_1 \Delta t \sum_{l=1}^L \lambda_l \beta_l b_l \langle F_{12} \rangle^{(\tau+1)},$$

$$\langle T_{21} \rangle = -\langle A_{21} \rangle^{(\tau+1)},$$

$$\langle T_{22} \rangle = [I] - \frac{\Delta t}{2} \langle A_{22} \rangle^{(\tau+1)},$$

$$\langle R_{11} \rangle = [I] + \frac{\Delta t}{2} \langle A_{11} \rangle^{(\tau)} + \nu_1 \Delta t \sum_{l=1}^L \lambda_l \beta_l a_l \langle F_{11} \rangle^{(\tau)},$$

$$\langle R_{12} \rangle = \nu_1 \Delta t \sum_{l=1}^L \lambda_l \beta_l a_l \langle F_{12} \rangle^{(\tau)},$$

$$\langle R_{21} \rangle = \langle A_{21} \rangle^{(\tau)} \quad \mathbf{e}$$

$$\langle R_{22} \rangle = [I] + \frac{\Delta t}{2} \langle A_{22} \rangle^{(\tau)}.$$

O sistema de equações lineares em (6.27) também é resolvido diretamente, em cada passo Δt no tempo, por meio da decomposição LU e eliminação progressiva e substituição regressiva (PRESS *et al.*, 1992).

6.3 - O CÓDIGO DO MÉTODO MODAL

Com o objetivo de testar o método proposto, foi criado um código em Linguagem Fortran, no qual denominamos de KMODPH3D.

Antes de executar o KMODPH3D, os pseudo modos são determinados a partir do problema de autovalor definido na eq. (5.4):

$$[B_g]^S \omega_{\sim g,n} = \lambda_{g,n} \omega_{\sim g,n},$$

lembrando que a matriz $[B_g]^S$ vem da discretização pelo método DFMG. De modo que, em um problema de transiente, o KMODPH3D utiliza os pseudo modos que são calculados apenas uma vez, no estado estacionário. A Fig. 6.1 mostra o fluxograma esquemático do KMODPH3D.

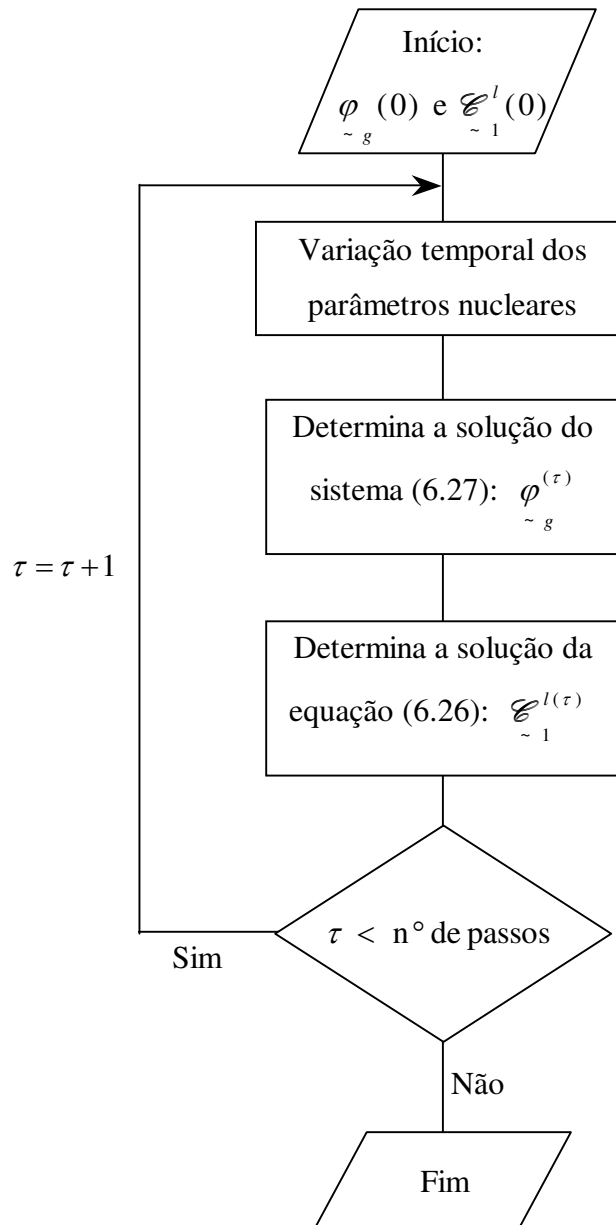


Fig. 6.1 - Fluxograma do código KMODPH3D para o método modal.

- Os vetores iniciais $\varphi_{\tilde{g}}(0)$ e $\mathcal{E}_{\tilde{1}}^l(0)$ são determinados multiplicando-se as expansões (6.3) e (6.4) por $\mathbf{W}_{\tilde{g},n}^T$ e com auxílio da relação de ortogonalidade (5.4).

Fazendo isso temos que:

$$\varphi_{\tilde{g},n}(0) = \mathbf{W}_{\tilde{g},n}^T \varphi_{\tilde{g}}(0)$$

e

$$\mathcal{E}_{\tilde{1},n}^l(0) = \mathbf{W}_{\tilde{1},n}^T c_{\tilde{1}}(0)$$

onde

$$c_{\tilde{1}}(0) = \frac{\beta_{\tilde{1}}}{\lambda_{\tilde{1}}} \left(\langle F_{11}(0) \rangle \varphi_{\tilde{1}}(0) + \langle F_{12}(0) \rangle \varphi_{\tilde{2}}(0) \right).$$

Para os problemas com transientes que envolvem o movimento de bancos de barras de controle (BBC), os nodos com BBC parcialmente inseridos, são re-homogeneizados pelo volume ponderado.

CAPÍTULO 7

RESULTADOS NUMÉRICOS

INTRODUÇÃO

O primeiro caso consiste de uma verificação da validade da técnica de expansão em pseudo-harmônicos na solução de problemas de fonte fixa que foi teoricamente desenvolvida no capítulo 5. Para este caso é usado o problema Benchmark IAEA-3D.

Nos outros casos o código KMODPH3D desenvolvido para o método proposto é testado e comparado com o método de referência, o código KDFMG3D desenvolvido no capítulo 3. Os dois métodos são aplicados em diferentes problemas de transientes. O primeiro é uma perturbação mudança de passo em um reator cubo homogêneo (FERGUSON *et al.*, 1973), em seguida o conhecido problema de transiente operacional de Langenbuch (LANGENBUCH *et al.*, 1977a) e depois o transiente operacional de Langenbuch modificado (AVILES, 1994) para tratar o desarme do reator. Finalmente o mesmo reator de Langenbuch é analisado em um problema de ejeção de barra de controle com nível de potência zero (CHAO, *et al.*, 1993). Neste problema é considerado um simples modelo de realimentação térmica.

Nos casos testados foram utilizados todos os pseudo-harmônicos disponíveis, de modo que o número de pseudo-harmônicos corresponde ao número de nodos em que o núcleo foi discretizado. Para os métodos espaciais (DFMG e NEM) os parâmetros de convergência que foram adotados são dados na Tabela 7.1.

7.1 – BENCHMARK IAEA-3D

O propósito do teste é comparar o fluxo de nêutrons dado pela expansão em pseudo-harmônicos na eq. 5.7 que é solução do problema de fonte fixa dada pela eq. 5.5, com o fluxo de nêutrons calculado diretamente pelo método DFMG, $\Phi_{\sim dir.}$, considerando este último como a solução de referência.

Tabela 7.1
Parâmetros de convergência

Método	DFMG	NEM
Tolerância ^a no fluxo (internas)	10^{-5}	10^{-6}
Tolerância ^a no K_{eff} (externas)	10^{-7}	10^{-7}
Tolerância ^a na fonte (externas)	10^{-6}	—
Omega ^b (acel. no SOR)	1,45	—

a - tolerância para os desvios relativos;

b - Omega é o parâmetro de aceleração usado no Sobre-Relaxação Sucessiva (SOR).

No teste utilizamos a configuração do núcleo IAEA-3D em simetria de $\frac{1}{4}$ a dois grupos de energia. A Fig. 7.1 mostra esta simetria no plano 3 (ver Fig.7.2) em xy do núcleo do reator, bem como as dimensões dos nodos. Na Fig. 7.2 é mostrado um plano em $x-z$, com as posições dos bancos de barra de controle (BBC) e também as condições de contorno e continuidade que foram adotadas. A discretização espacial dividi este $\frac{1}{4}$ de núcleo em 1311 nodos e em dezenove planos radiais de 20 cm de altura. Já os parâmetros nucleares para dois grupos de energia são mostrados na Tabela 7.2, onde temos a seguinte classificação: Tipos 1 e 2 representam o combustível sem BBC, Tipo 3 o combustível com BBC, Tipo 4 o refletor superior, inferior e lateral sem o BBC e Tipo 5 é o refletor superior com BBC.

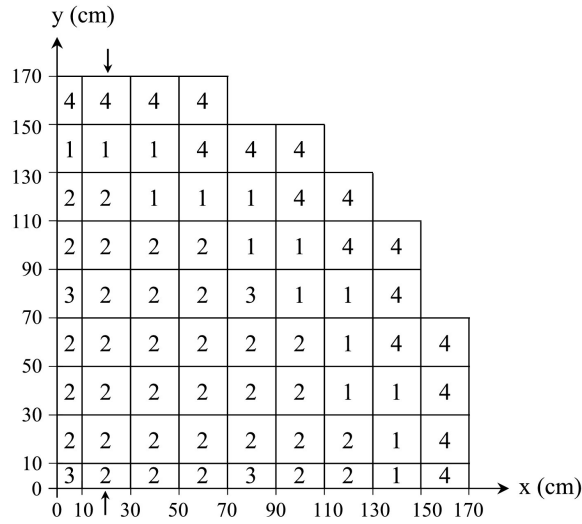


Fig. 7.1 - Configuração para simetria de 1/4 do IAEA-3D no plano 3 (ver Fig. 7.2).

As setas indicam a fileira associada ao gráfico da Fig.7.3.

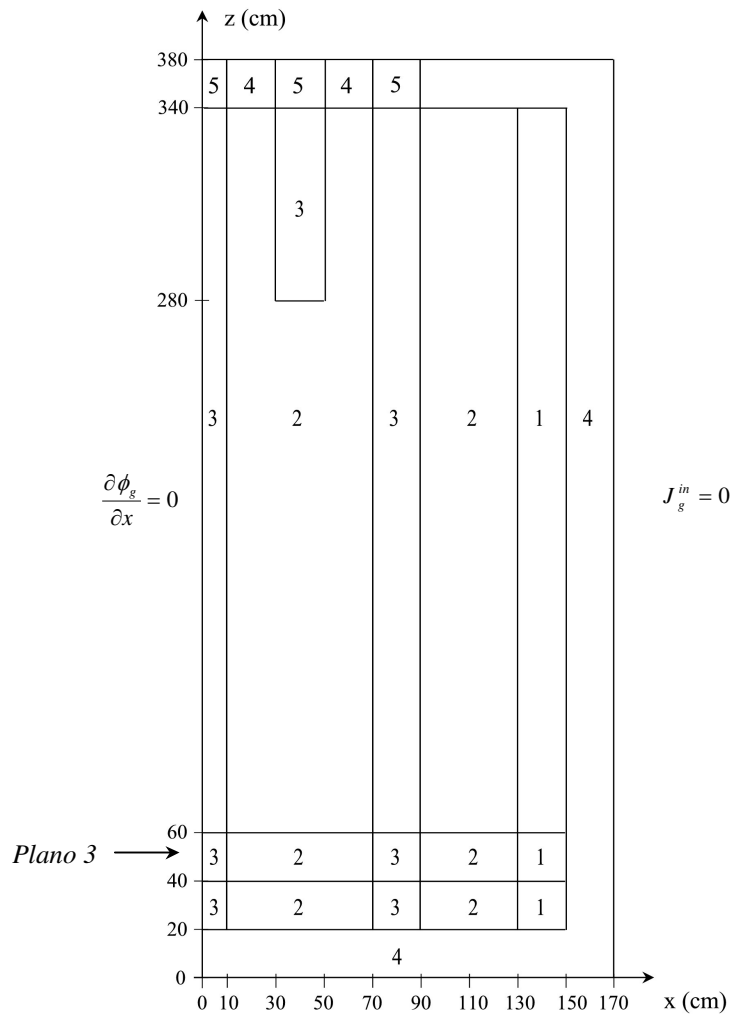


Fig. 7.2 - Configuração do IAEA-3D em um dos planos xz.

Tabela 7.2
Parâmetros Nucleares de Multigrupo - IAEA-3D

Tipos	g	$D_g (cm)$	$\Sigma_{ag} (cm)^{-1}$	$\nu \Sigma_{fg} (cm)^{-1}$	$\Sigma_{gg'} (cm)^{-1}$
1	1	1,5	0,01	0,0	0,02
	2	0,4	0,08	0,135	0,0
2	1	1,5	0,01	0,0	0,02
	2	0,4	0,085	0,135	0,0
3	1	1,5	0,01	0,0	0,02
	2	0,4	0,13	0,135	0,0
4	1	2,0	0,0	0,0	0,04
	2	0,3	0,01	0,0	0,0
5	1	2,0	0,0	0,0	0,04
	2	0,3	0,055	0,0	0,0

Com a aplicação da expansão em pseudo-harmônicos os valores obtidos para a solução do sistema linear, representado pela equação 5.5, foram praticamente iguais aos valores de referência, calculados com o DFMG. O maior desvio relativo percentual verificado foi, aproximadamente, $10^{-5} \%$, no grupo térmico e localizado na fileira em destaque na Fig. 7.1. A Fig. 7.3 mostra o desvio relativo percentual nesta fileira.

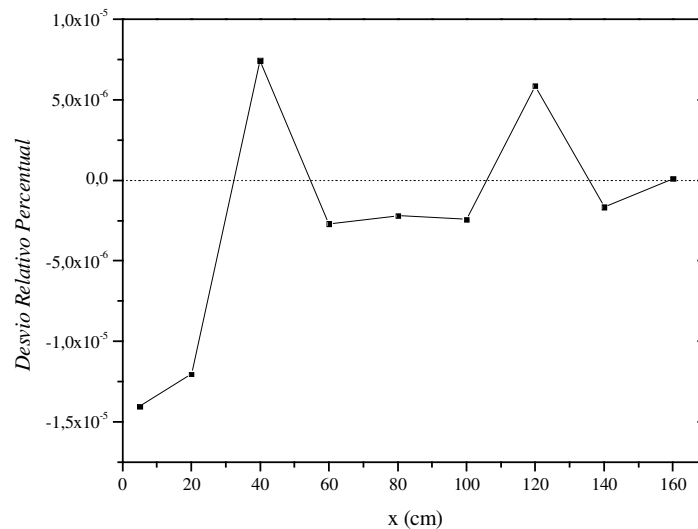


Fig. 7.3. Desvio relativo percentual na fileira destacada na Fig 7.1. Nesta fileira foi observado o maior desvio ($\approx 10^{-5}$).

Nas figuras 7.4 e 7.5 são mostrados, respectivamente, os gráficos de superfície 3D para o fluxo de nêutrons rápidos e térmicos no plano central do reator, obtidos pelo DFMG. A unidade dos fluxos é arbitrária.

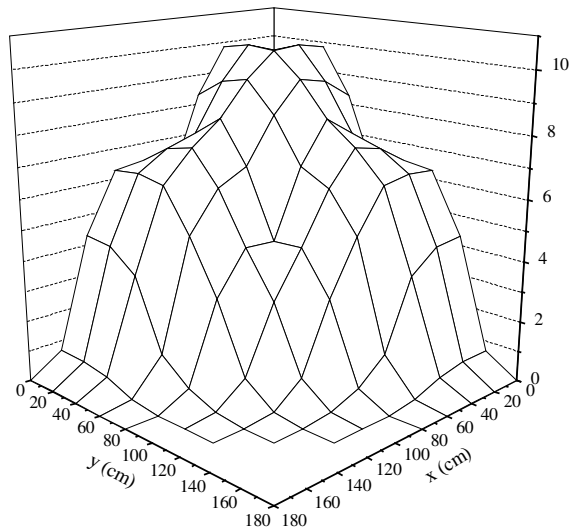


Fig. 7.4 - IAEA-3D - Fluxo de nêutrons rápidos no plano central.

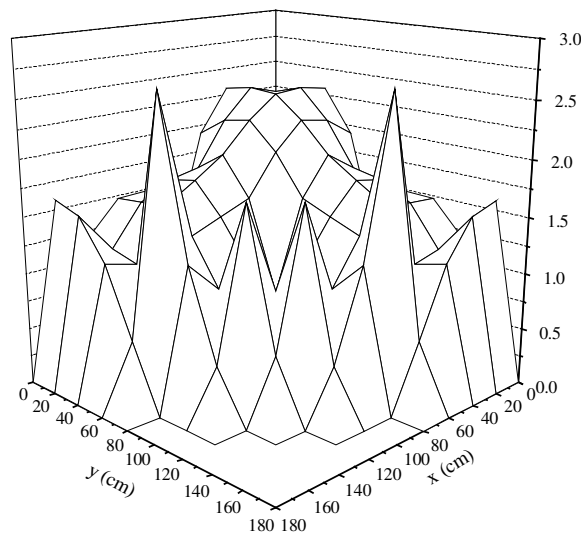


Fig. 7.5 - IAEA-3D - Fluxo de nêutrons térmicos no plano central.

7.2 - REATOR HOMOGÊNIO

Este problema consiste de um cubo homogêneo sem refletor de 200 cm de aresta, com dois grupos de energia e uma família de precursores (FERGUSON *et al.*, 1973). É considerada a simetria de $\frac{1}{4}$ de núcleo. A discretização nodal divide o reator

em 225 nodos, com nove planos radiais, cada plano com 25 nodos, sendo que nos planos superior e inferior os nodos são de $20 \times 20 \times 20 \text{ cm}^3$, e nos outros planos são de $20 \times 20 \times 22,86 \text{ cm}^3$, conforme é mostrado na Fig. 7.6. As propriedades nucleares para apenas um tipo de material e os dados cinéticos são dadas na Tabela 7.3. O transiente consiste de uma perturbação degrau uniforme, onde a seção de choque de absorção no grupo térmico é diminuída de um valor de $0,369 \times 10^{-4} \text{ cm}^{-1}$.

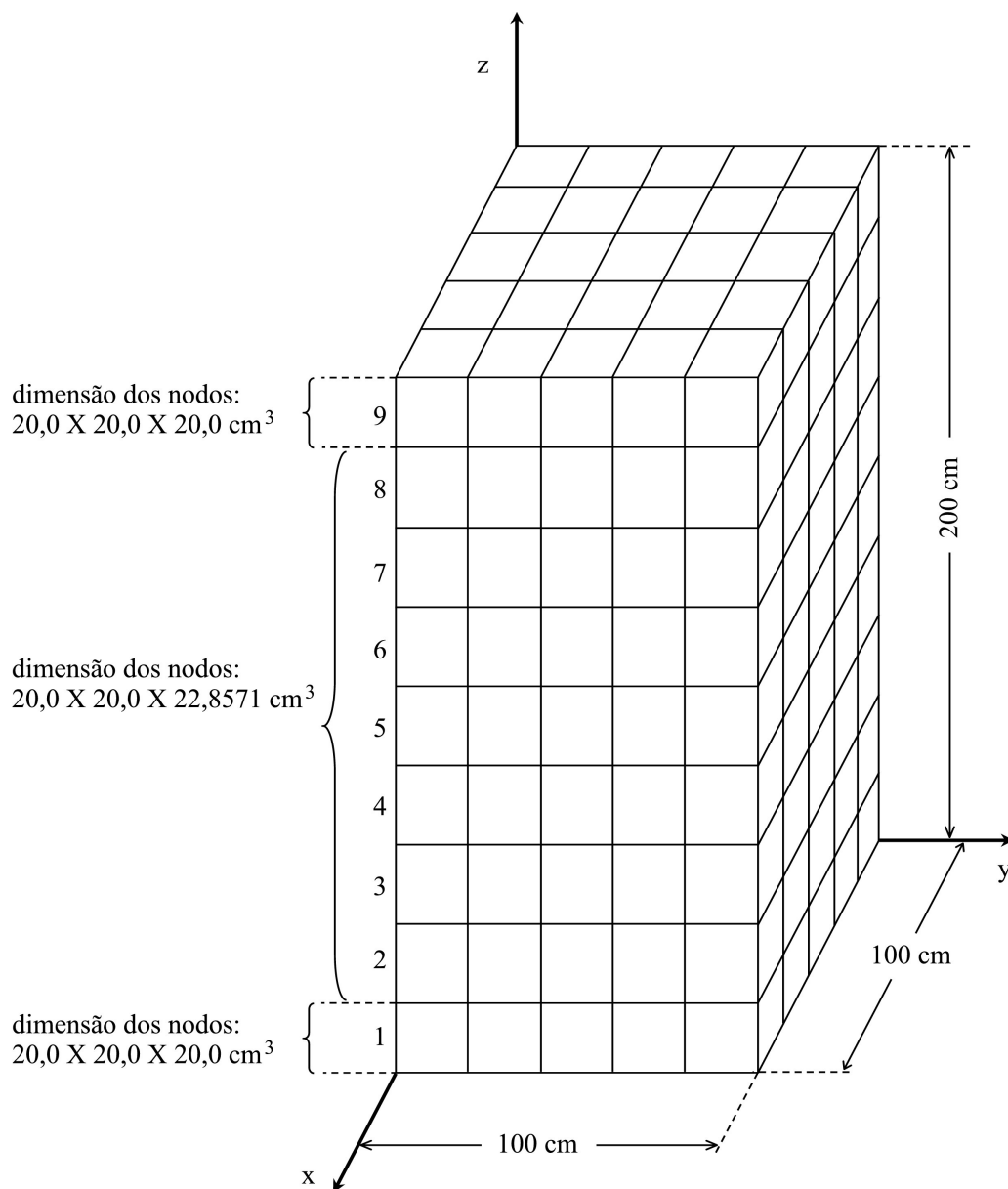


Fig. 7.6 – Discretização do reator cubo homogêneo na simetria de 1/4.

Tabela 7.3
Reator Homogêneo - Parâmetros Nucleares e Cinéticos de Multigrupo

Tipo	g	$D_g (cm)$	$\Sigma_{ag} (cm)^{-1}$	$\nu \Sigma_{fg} (cm)^{-1}$	$\Sigma_{gg'} (cm)^{-1}$	$\nu_g (cm/s)$
1	1	1,35062	0,001382	0,00058322	0,0023	$3,0 \times 10^7$
	2	1,08085	0,0054869	0,0098328	0,0	$2,2 \times 10^5$

$$\lambda_1 = 0,08 \text{ s}^{-1}, \quad \beta_1 = 0,0064$$

$$\nu = 2,41 \text{ nêutrons / fissão}$$

O transiente tem a duração de 0,4 s e para comparar o comportamento da convergência em cada um dos métodos, são obtidas soluções com diferentes passos no tempo. A comparação é feita considerando o erro de truncamento temporal do fluxo de nêutrons em cada ponto espacial durante o transiente, e que pode ser dado por

$$\text{erro de truncamento} = \left| \phi_{n,g}^{(\Delta t)} - \phi_{n,g}^{(\Delta t/2)} \right|, \quad (7.1)$$

onde $\phi_{n,g}^{(\Delta t)}$ e $\phi_{n,g}^{(\Delta t/2)}$ são os fluxos em um nodo n e grupo g calculados, respectivamente, nos passos Δt e $\Delta t/2$. Na Tabela 7.4 temos o comportamento da convergência de cada um dos métodos bem como o tempo de CPU. O erro de truncamento máximo é obtido de (7.1). Podemos notar que tanto o código KDFMG3D como o KMODPH3D apresentam a mesma convergência, de modo que um mesmo passo de 0,0025 s produz soluções bem convergidas para ambos os códigos.

O máximo desvio percentual no fluxo calculado pelo KMODPH3D em relação ao KDFMG3D é de 0,13% e ocorre no grupo rápido.

Na Tabela 7.5 ambos os métodos são comparados com a solução exata que pode ser encontrada em (FERGUSON *et al.*, 1973). A comparação é feita com o fluxo térmico no ponto central do reator, onde que, no instante inicial, este fluxo é normalizado à unidade (segunda coluna). Tanto o KDFMG3D como o KMODPH3D apresentaram o mesmo desvio relativo percentual, listados na terceira coluna.

Os gráficos nas figuras 7.7 e 7.8 mostram a evolução no tempo do fluxo de nêutrons em uma fileira que inclui o ponto central do reator.

Tabela 7.4

Reator Homogêneo - Comportamento do erro de truncamento na discretização temporal

KDFMG3D			KMODPH3D		
Erro Trunc. Máximo	Passo (s)	Tempo de CPU (s)	Erro Trunc. Máximo	Passo (s)	Tempo de CPU (s)
$1,40 \times 10^{-2}$	0,02	1,56	$1,40 \times 10^{-2}$	0,02	1,59
$6,78 \times 10^{-3}$	0,01	3,14	$6,78 \times 10^{-3}$	0,01	3,10
$3,47 \times 10^{-3}$	0,005	6,25	$3,47 \times 10^{-3}$	0,005	6,20
$1,65 \times 10^{-3}$	0,0025	12,53	$1,65 \times 10^{-3}$	0,0025	12,45
$9,39 \times 10^{-4}$	0,00125	24,96	$9,38 \times 10^{-4}$	0,00125	24,80
$8,80 \times 10^{-4}$	0,000625	50,11	$8,80 \times 10^{-4}$	0,000625	49,70
	0,0003125	100,14		0,0003125	99,61

Tabela 7.5

Reator Homogêneo - Comparação com a solução exata

Método	Exato	KDFMG ou KMODPH3D
Tempo (s)	Fluxo	Desvio (%)
0,00	1,0000	0,00
0,05	1,3811	0,02
0,10	1,7243	0,02
0,15	2,0343	0,03
0,20	2,3162	0,09
0,30	2,8039	0,13
0,40	3,2108	0,14

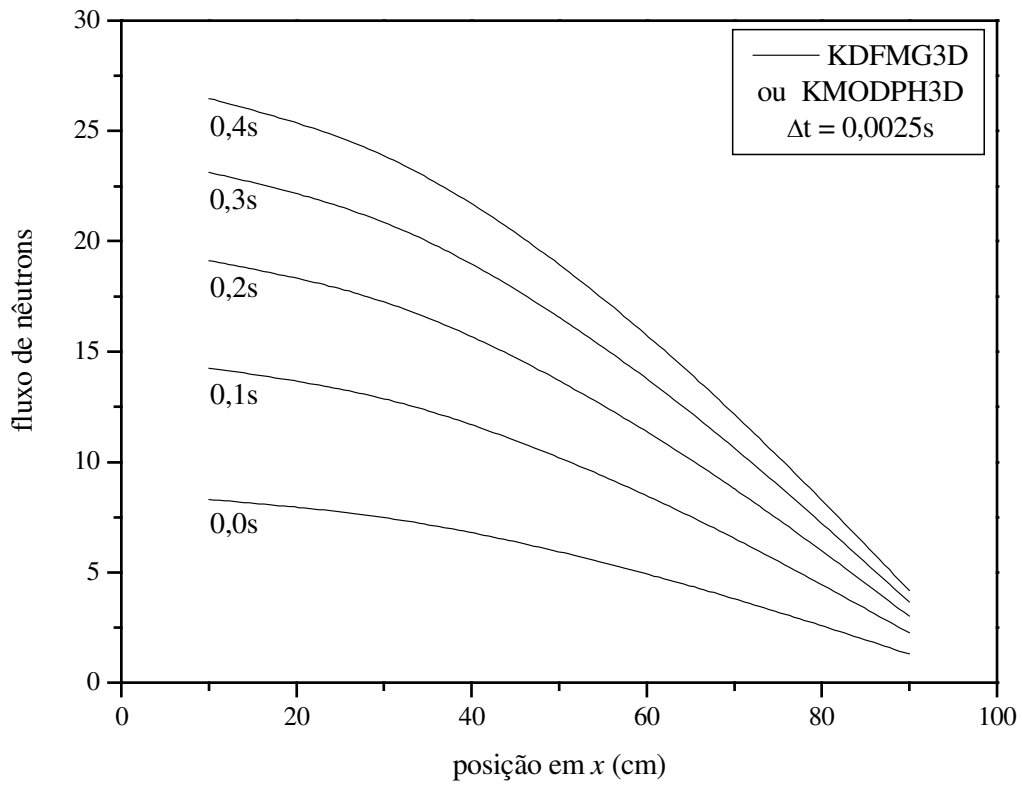


Fig. 7.7 - Evolução temporal do fluxo de nêutrons no grupo rápido na fileira central do reator homogêneo.

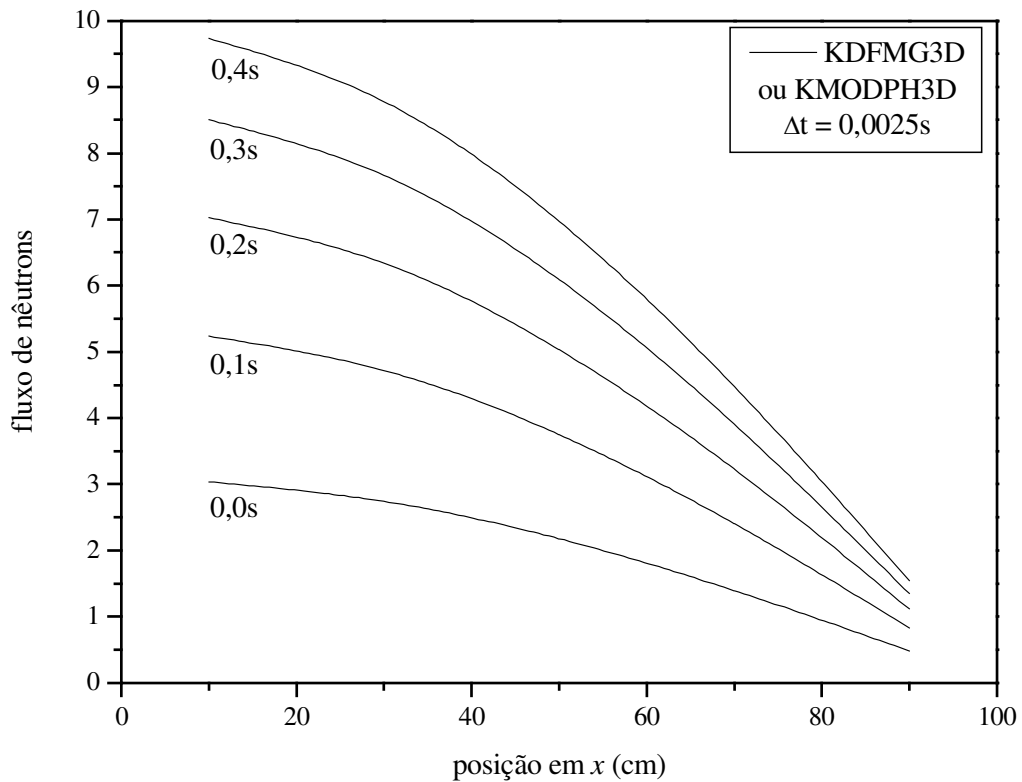


Fig. 7.8 - Evolução temporal do fluxo de nêutrons no grupo térmico na fileira central do reator homogêneo.

7.3 - TRANSIENTE OPERACIONAL LMW TRIDIMENSIONAL

Este problema foi introduzido por Langenbuch, Maurer e Werner (LMW) representando um modelo simplificado de PWR 3D com 77 "assemblies" de combustíveis, que simula um transiente operacional com movimento de barras de controle (LANGENBUCH *et al.*, 1977a). São considerados dois grupos de energia, seis famílias de precursores de nêutrons retardados e simetria de ¼ de núcleo. A composição do núcleo e os dados cinéticos são apresentados na Tabela 7.6. A configuração do núcleo e a posição das barras de controle são mostradas nas figuras 7.9, 7.10 e 7.11. È utilizada uma malha espacial de 20 cm de largura nas três direções x, y e z.

No instante inicial as barras de controle do banco 1 estão inseridas do refletor superior até a meia altura do reator e as barras de controle do banco 2 estão posicionadas no refletor superior.

Tabela 7.6
Reator LMW - Parâmetros Nucleares e Cinéticos de Multigrupo

Tipo	g	D_g (cm)	Σ_{ag} (cm) ⁻¹	$\nu\Sigma_{fg}$ (cm) ⁻¹	$\Sigma_{gg'}$ (cm) ⁻¹	ν_g (cm/s)
1	1	1,423913	0,01040206	0,006477691	0,01755555	$1,25 \times 10^7$
	2	0,356306	0,08766217	0,1127328	0,0	$2,5 \times 10^5$
2	1	1,425611	0,01099263	0,007503284	0,01717768	$1,25 \times 10^7$
	2	0,350574	0,09925634	0,1378004	0,0	$2,5 \times 10^5$
3	1	1,423913	0,01095206	0,006477691	0,01755555	$1,25 \times 10^7$
	2	0,356306	0,09146217	0,1127328	0,0	$2,5 \times 10^5$
4	1	1,634227	0,002660573	0,0	0,02759693	$1,25 \times 10^7$
	2	0,264002	0,04936351	0,0	0,0	$2,5 \times 10^5$
Prec.	grupo 1	grupo 2	grupo 3	grupo 4	grupo 5	grupo 6
β_l	0,000247	0,0013845	0,001222	0,0026455	0,000832	0,000169
λ_l (s ⁻¹)	0,0127	0,0317	0,115	0,311	1,4	3,87

Energia liberada por fissão: $3,204 \times 10^{-11}$ (Ws)

$\nu = 2,5$ nêutrons / fissão

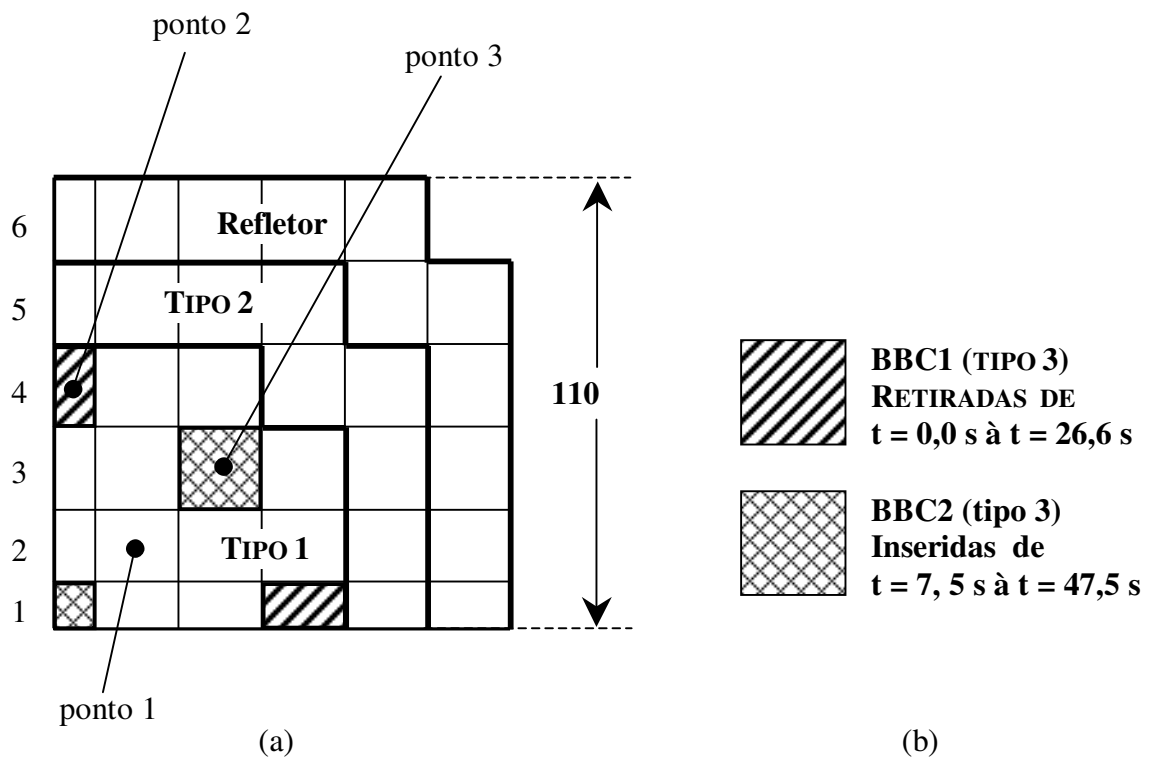


Fig. 7.9 - Reator LMW.

(a) Geometria radial; (b) Movimento dos bancos de barras de controle.

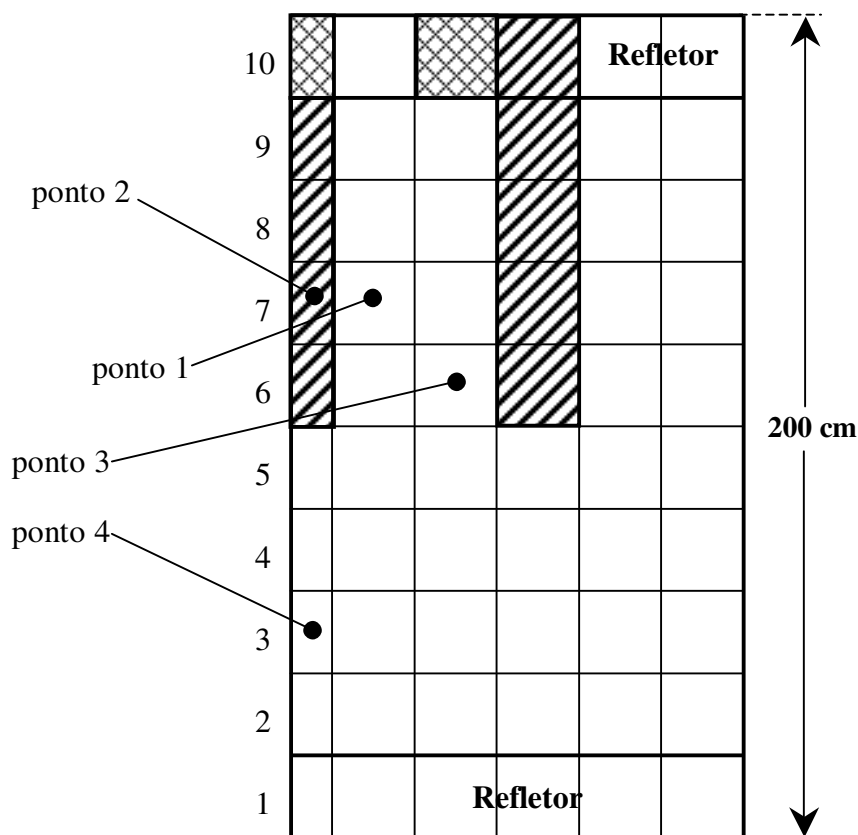


Fig. 7.10 - Reator LMW - Geometria axial no instante inicial.

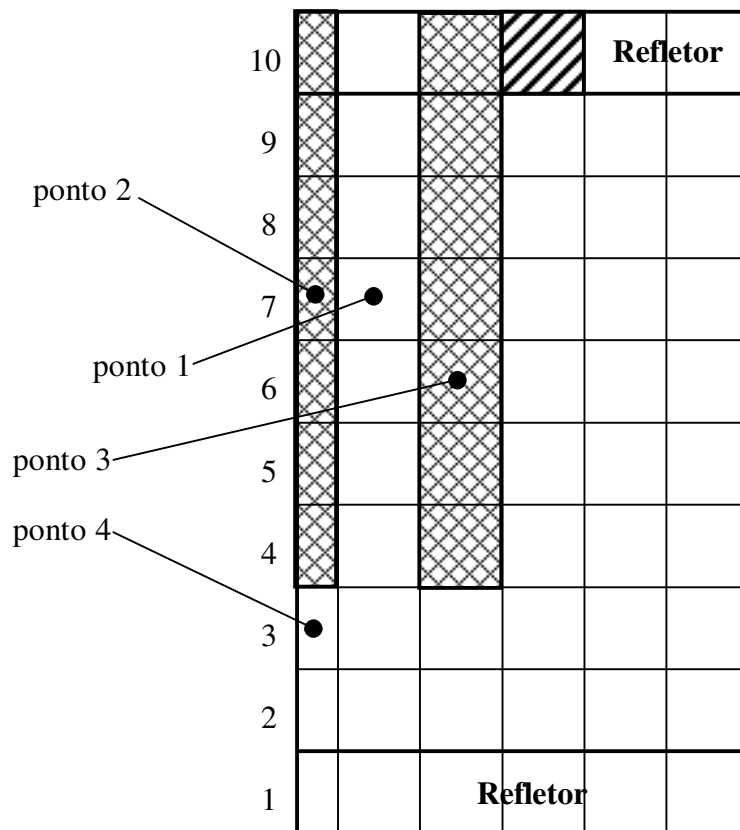


Fig. 7.11 - Reator LMW - Geometria axial ao fim do transiente.

O transiente é iniciado com a retirada das barras de controle do banco 1 numa taxa constante de 3 cm/s até que sejam completamente retiradas (em 26,7 s). Em 7,5 s as barras de controle do banco 2 são inseridas durante 40 s. O transiente tem a duração de 60 s.

A análise da convergência está colocada na Tabela 7.7, onde o erro de truncamento máximo é dado pela eq. 7.1. Observa-se que os métodos convergem de forma diferente, onde para o KDFMG3D podemos estimar uma solução convergida com um passo de 0,5 s, enquanto que para o KMODPH3D podemos estimar um passo de 0,125 s. Comparando as duas soluções convergidas obtemos um máximo desvio relativo percentual de 7,78% no fluxo térmico. Na Figura 7.12 é mostrada a evolução da densidade de potência das mesmas soluções. Enquanto que na Figura 7.13 temos os desvios relativos percentuais das densidades de potência no KMODPH3D em comparação com o KDFMG3D.

Tabela 7.7

Reator LMW - Comportamento do erro de truncamento na discretização temporal

KDFMG3D			KMODPH3D		
Erro Trunc. Máximo	Passo (s)	Tempo de CPU (s)	Erro Trunc. Máximo	Passo (s)	Tempo de CPU (s)
$4,71 \times 10^{-2}$	1,0	55,1	0,45	1,0	15,3
	0,5	103,7		0,16	0,5
$5,89 \times 10^{-3}$	0,25	197,7	0,15	0,25	61,0
	0,125	377,5		$3,93 \times 10^{-2}$	0,125
$2,83 \times 10^{-3}$	0,0625	723,0	$3,86 \times 10^{-2}$	0,0625	244,4
	0,03125	1080		0,03125	487,3

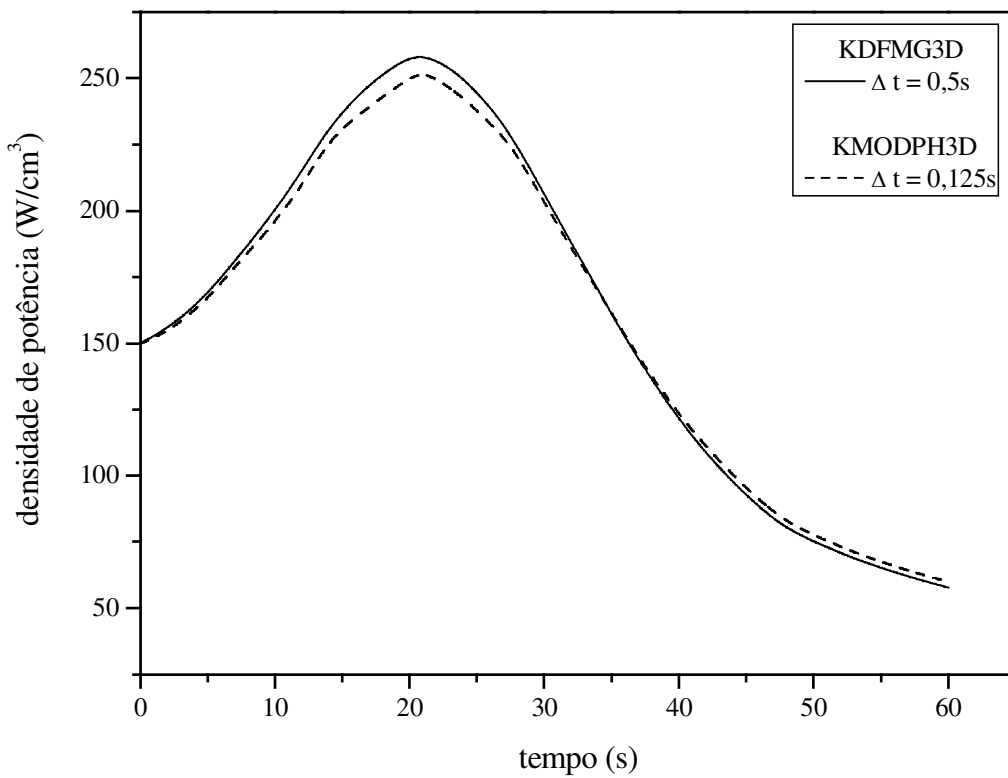


Fig. 7.12 - Reator LMW - Variação da densidade de potência média.

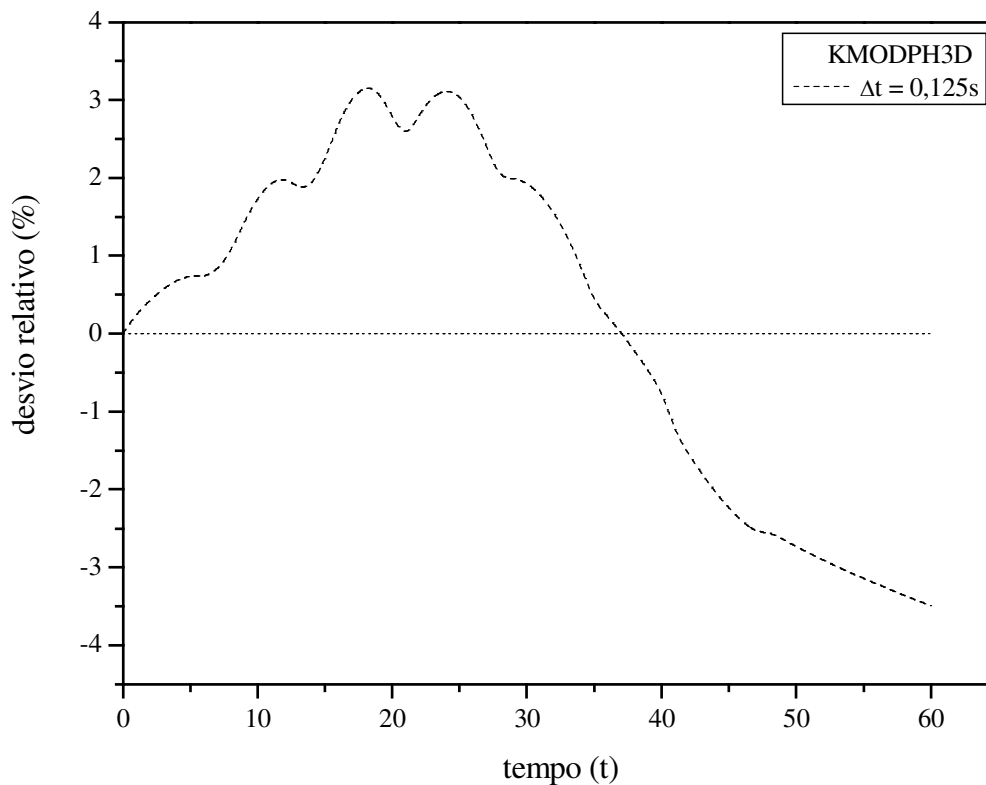


Fig. 7.13 - Reator LMW - Variação do desvio relativo da densidade de potência.

Na fig 7.12 podemos observar uma diferença no comportamento das curvas, principalmente na região próxima ao máximo. Pelo método direto a curva tem uma aparência mais suave, enquanto que no método modal a curva tem uma forma mais pontiaguda. Essa distinção deve estar relacionada com o esquema diferenciado para tratar a barra parcialmente inserida num nodo, em cada um dos métodos. O método direto faz uma re-homogeneização do nodo usando o NEM, já o método modal não faz uso de um esquema mais elaborado, apenas faz uma média ponderada nos parâmetros nucleares. É possível que a origem das oscilações notadas na fig 7.13 também esteja relacionada com o diferente tratamento da barra parcialmente inserida no nodo. Provavelmente a diferença entre os métodos seja mais acentuada quando a barra esta posicionada numa altura próxima à metade da altura de um nodo, e menos acentuada quando a barra esta posicionada numa altura próxima à altura de um nodo.

Os instantes da ocorrência da máxima densidade de potência em cada passo e os desvios relativos percentuais em relação ao método de referência são listados na Tabela 7.8. Na Tabela 7.9 os dois métodos são comparados com CUBBOX (LANGENBUCH *et al.*, 1977a). É listada a densidade de potência média calculada com o CUBBOX e os desvios relativos percentuais do KDFMG3D e KMODPH3D quando comparados com o CUBBOX. Na Figura 7.14 é mostrada a posição aproximada das barras de controle no instante correspondente a máxima densidade de potência média, em 20,5 s.

Tabela 7.8
Reator LMW - Máxima Densidade de Potência

Método	KDFMG3D	KMODPH3D
Passo no tempo (s)	0,5	0,125
Instante em que ocorre a máx. dens. de potência (s)	20,5	20,875
Máxima densidade de potência (W/cm ³)	258,32	252,00
Desvio rel. na máx. dens. de potência (%)	—	2,45

Tabela 7.9
Reator LMW - Densidade de Potência; comparação com o CUBBOX

Método	CUBBOX ($\Delta t = 0,125 s$)	KDFMG3D ($\Delta t = 0,5 s$)	KMODPH3D ($\Delta t = 0,125 s$)
Tempo (s)	Dens. de Potência (W/cm ³)	Desvio Rel. (%)	Desvio Rel. (%)
0,0	150,00	0,00	0,00
1,0	152,39	-0,20	0,29
2,0	155,54	-0,23	0,48
5,0	168,79	-0,16	0,98
10,0	201,11	0,34	2,51
15,0	239,63	1,04	3,56
20,0	260,03	0,91	3,78
25,0	248,79	1,69	4,44
30,0	211,26	2,28	3,67
40,0	125,46	3,09	1,71
50,0	77,07	2,33	-0,71
60,0	58,94	2,07	-1,63

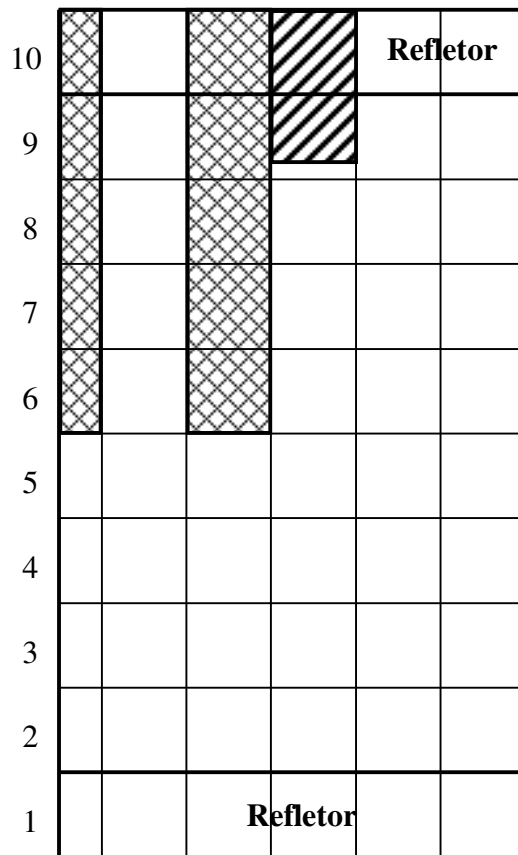


Fig. 7.14 - Reator LMW - Geometria axial no instante que ocorre a máxima densidade de potência média, em 20,5 s.

Na Figura 7.15 é mostrada a distribuição de potência média normalizada, calculada pelo KDFMG3D, em três instantes: no instante inicial, no instante de máxima potência média ($t = 21$ s) e no instante final do transiente ($t = 60$ s). As figuras 7.16 e 7.17, que mostram a comparação da distribuição da densidade de potência média normalizada, se referem aos instantes $t = 20,5$ s e $t = 60$ s, respectivamente. A célula em destaque ao lado direito das figuras 7.16 e 7.17 representa o desvio absoluto médio.

1,39966 2,48151 0,57089	1,36549 2,38662 0,54643	1,21165 2,08410 0,47368	0,83048 1,41899 0,32208	
2,11191 3,79469 0,86597	2,10350 3,66303 0,82720	1,90508 3,25744 0,72375	1,66812 2,84509 0,63809	0,83048 1,41899 0,32208
2,80086 4,84174 1,08792	2,71424 4,65379 1,03305	2,42059 4,09600 0,87179	1,90508 3,25744 0,72375	1,21165 2,08410 0,47368
3,21907 5,46584 1,20200	3,09296 5,26600 1,16554	2,71424 4,65379 1,03305	2,10350 3,66303 0,82720	1,36549 2,38662 0,54643
3,35386 5,62557 1,18538	3,21907 5,46584 1,20200	2,80086 4,84174 1,08792	2,11191 3,79469 0,86597	1,39966 2,48151 0,57089

t = 0,0 s
t = 20,5 s
t = 60,0 s

Fig. 7.15 - Reator LMW - Distribuição da Densidade de Potência Média Normalizada em três instantes.

XXXXXX
XXXXXX

Referência: KDFMG3D ($\Delta t = 0,5$ s)

Desvio Rel. Percentual - KMODPH3D ($\Delta t = 0,125$ s)

2,48151	2,38662	2,08410	1,41899	
2,86957	2,71369	2,54406	2,37946	
3,79469	3,66303	3,25744	2,84509	1,41899
0,85384	2,29129	2,40962	2,30567	2,37946
4,84174	4,65379	4,09600	3,25744	2,08410
2,90445	2,72276	3,30278	2,40962	2,54406
5,46584	5,26600	4,65379	3,66303	2,38662
2,61959	2,63285	2,72276	2,29129	2,71369
5,62557	5,46584	4,84174	3,79469	2,48151
2,95978	2,61959	2,90445	0,85384	2,86957

D. A. Médio
2,49241

Fig. 7.16 - Reator LMW - Comparação da Distribuição da Densidade de Potência Média Normalizada no instante de máxima potência (em 20,5 s).

0,57089	0,54643	0,47368	0,32208		D. A. Médio 3,61340 2,96700
-3,48549	-3,75685	-3,65248	-4,25181		
0,86597	0,82720	0,72375	0,63809	0,32208	
-5,53129	-4,18398	-3,66961	-4,39693	-4,25181	
1,08792	1,03305	0,87179	0,72375	0,47368	
-2,78284	-3,38065	0,73223	-3,66961	-3,65248	
1,20200	1,16554	1,03305	0,82720	0,54643	
-3,57497	-3,80119	-3,38065	-4,18398	-3,75685	
1,18538	1,20200	1,08792	0,86597	0,57089	
-1,25121	-3,57497	-2,78284	-5,53129	-3,48549	

Fig. 7.17 - Reator LMW - Comparação da Distribuição da Densidade de Potência Média Normalizada no instante final (60 s).

A evolução no tempo das densidades de potência locais, definidas nos pontos 1, 2, 3 e 4 (ver figs. 7.9 e 7.10) e obtidas pelo KDFMG3D são mostradas na Fig. 7.18. A comparação do KMODPH3D com o KDFMG3D para os cálculos das densidades de potências localizadas nos pontos 1, 2, 3 e 4, é mostrada nas figuras 7.19, 7.21, 7.23 e 7.25, respectivamente. Já os desvios relativos percentuais para cada um desses pontos são dados pelos gráficos das figuras 7.20, 7.22, 7.24 e 7.26.

Finalmente, nas figuras 7.27 e 7.28 são mostrados os gráficos de superfície 3D para os fluxos de nêutrons rápidos e térmicos no plano nº 6 (ver Fig. 7.14) nos instantes $t = 0,0$ s, $t = 20,5$ s e em $t = 60,0$ s, obtidos pelo KDFMG3D.

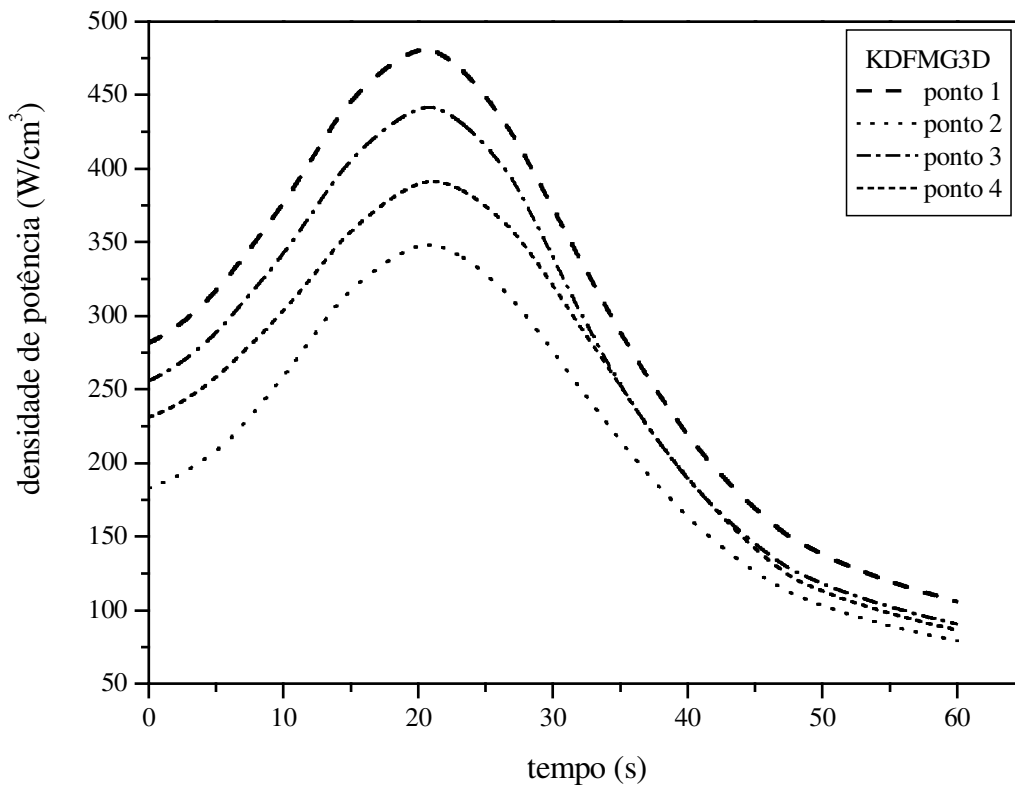


Fig. 7.18 - Reator LMW - Variação das densidades de potências localizadas nos pontos 1, 2, 3 e 4.

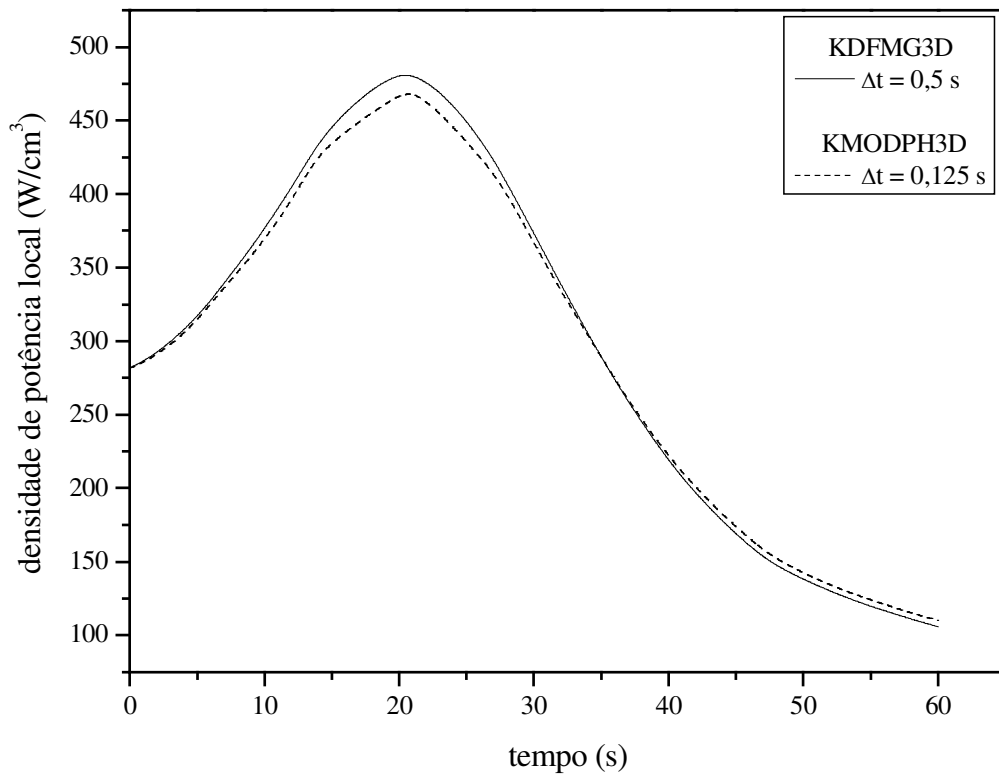


Fig. 7.19 - Reator LMW - Variação da densidade de potência localizada no ponto 1.

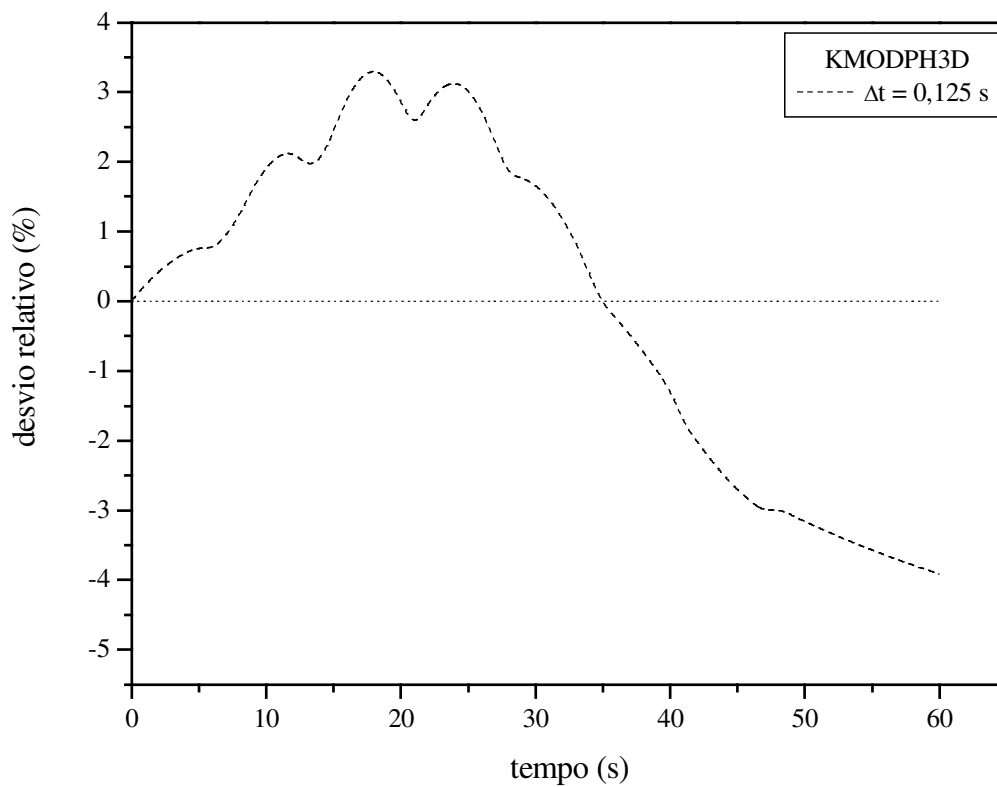


Fig. 7.20-Reator LMW-Variação do desvio relativo da densidade de potência localizada no ponto 1.

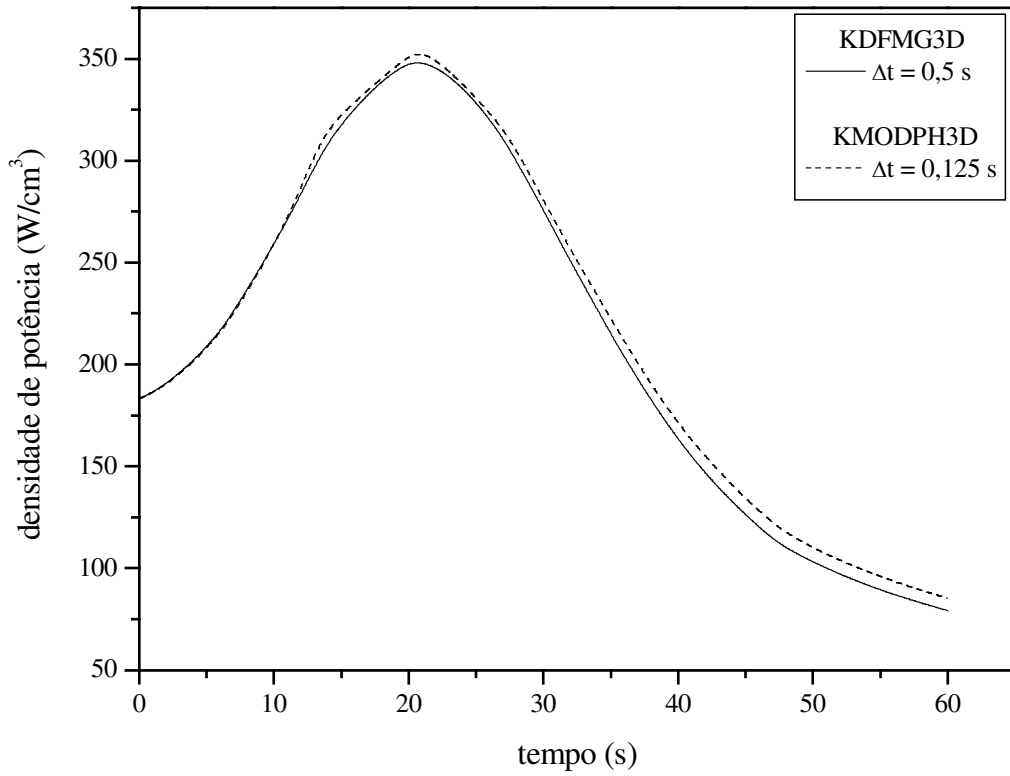


Fig. 7.21 - Reator LMW - Variação da densidade de potência localizada no ponto 2.

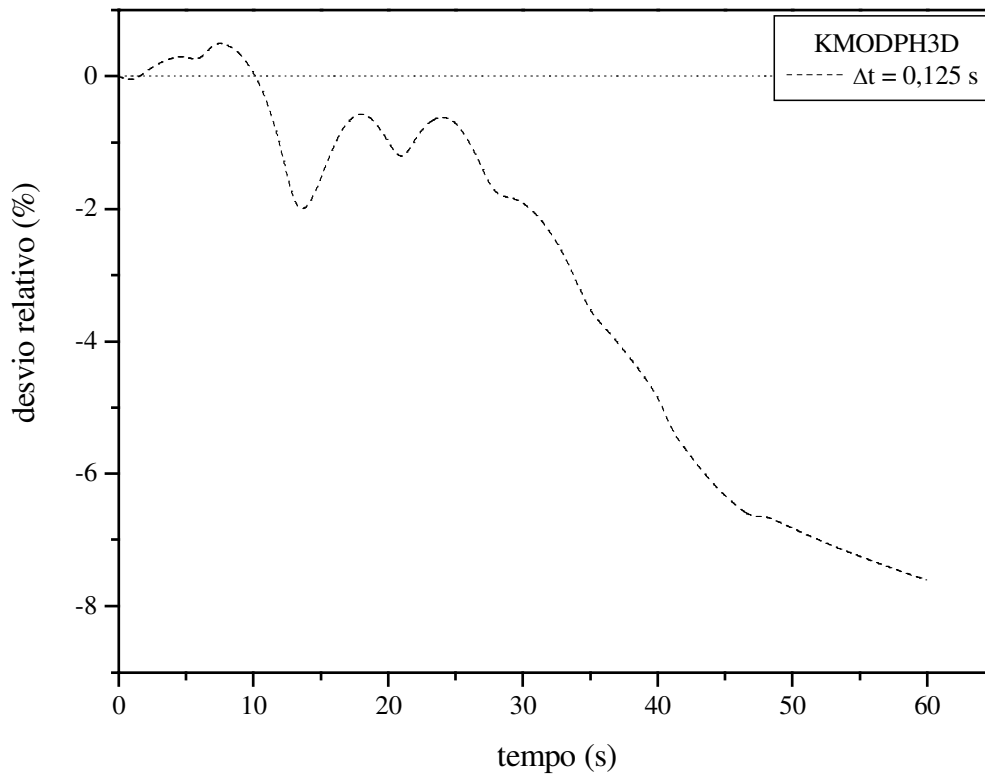


Fig. 7.22-Reator LMW-Variação do desvio relativo da densidade de potência localizada no ponto 2.

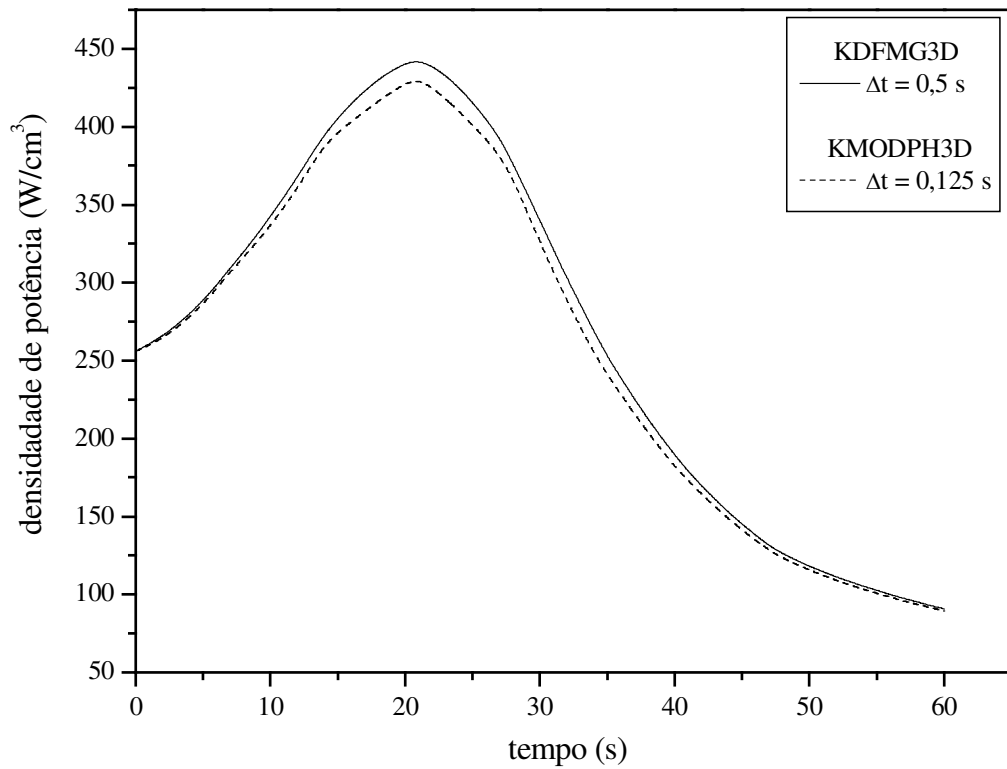


Fig. 7.23 - Reator LMW - Variação da densidade de potência localizada no ponto 3.

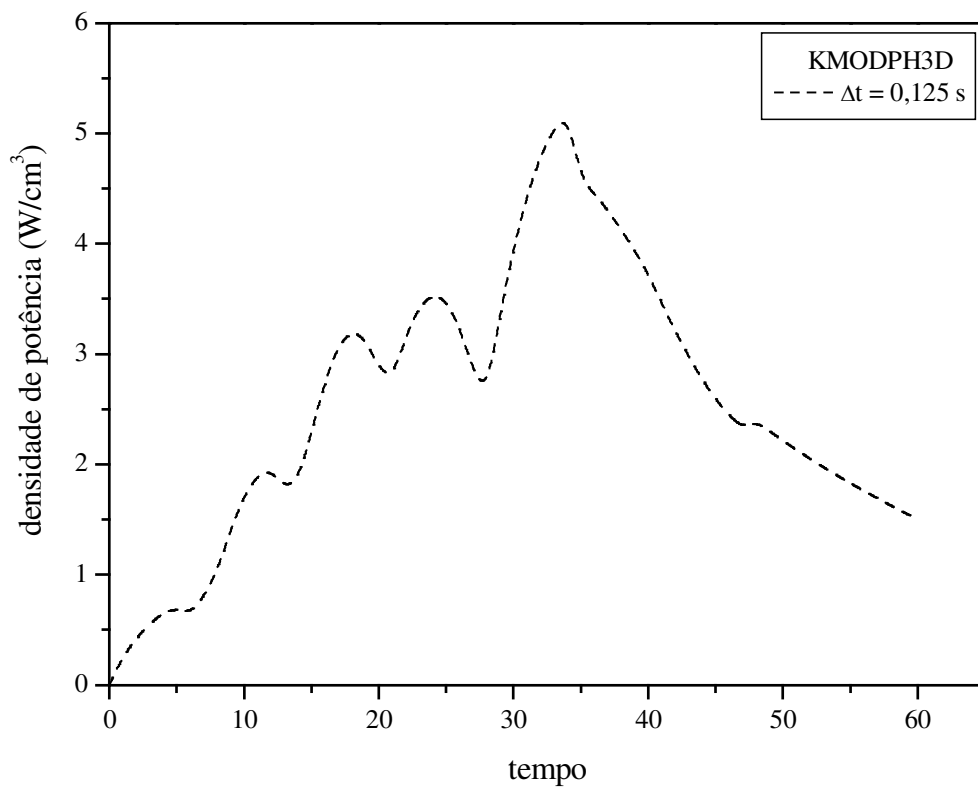


Fig. 7.24-Reator LMW-Variação do desvio relativo da densidade de potência localizada no ponto 3.

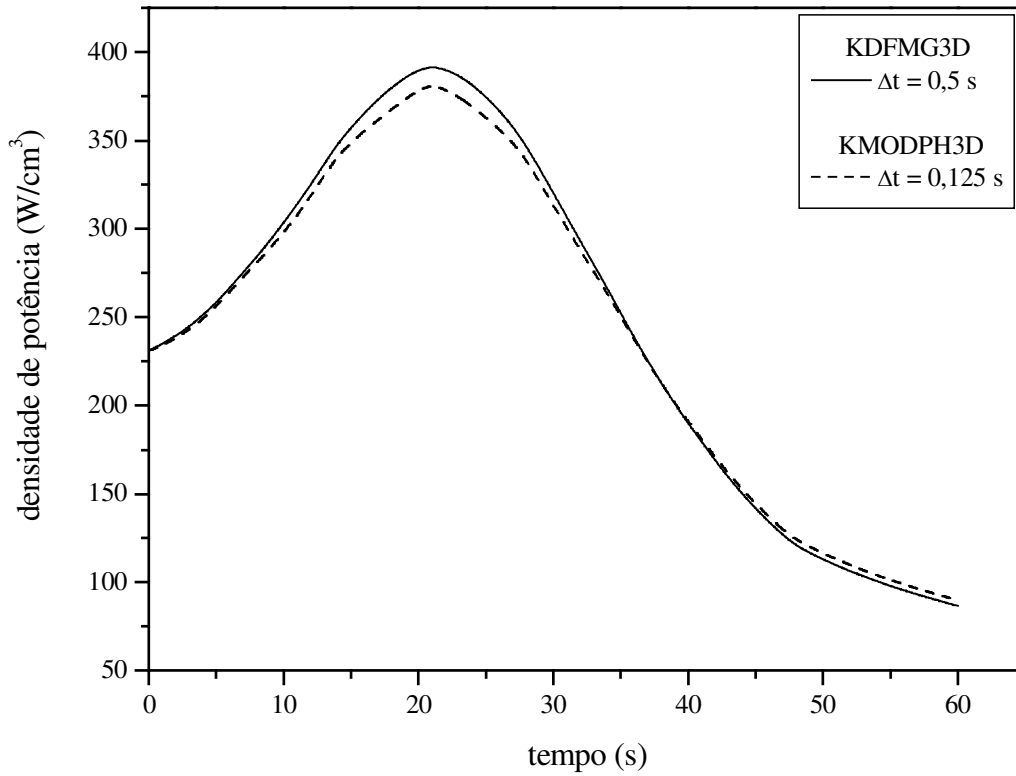


Fig. 7.25 - Reator LMW - Variação da densidade de potência localizada no ponto 4.

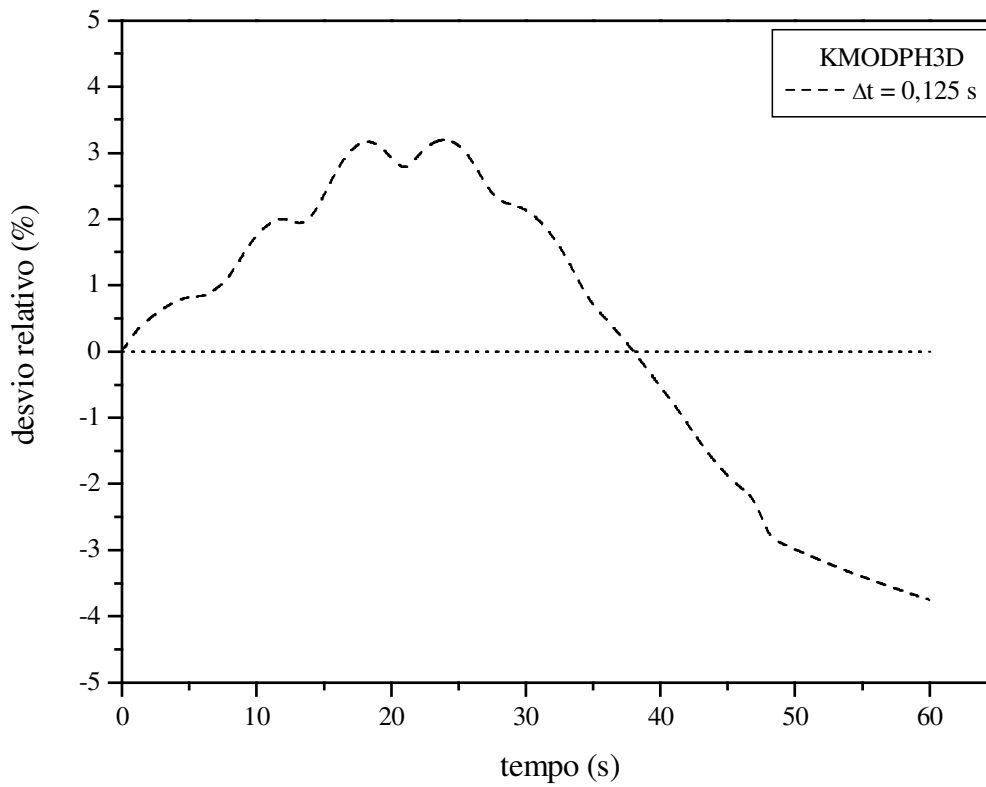


Fig. 7.26-Reator LMW- Variação do desvio relativo da densidade de potência localizada no ponto 4.

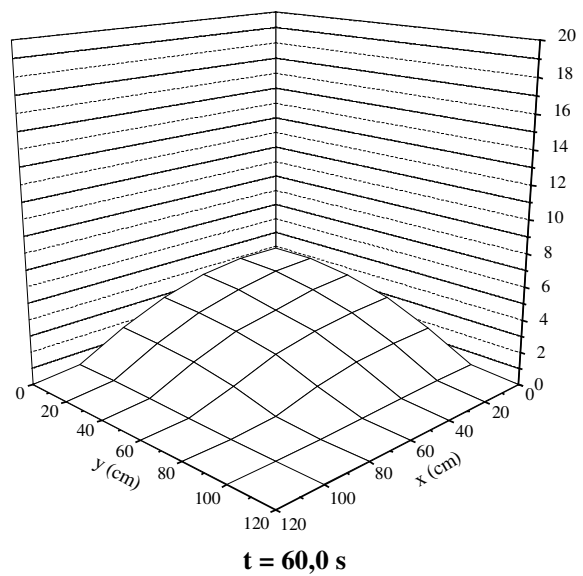
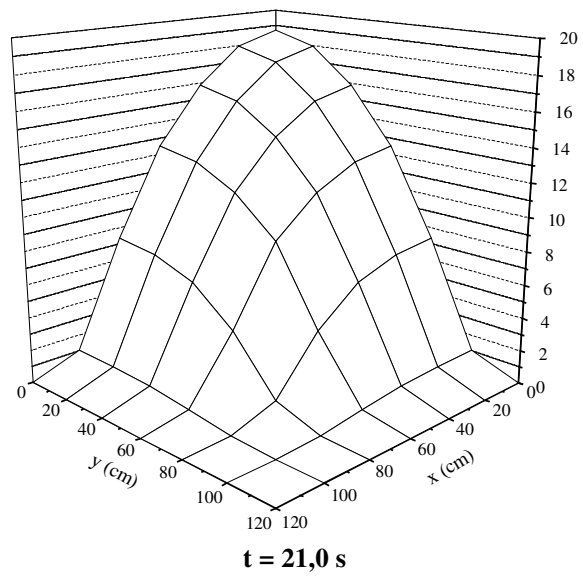
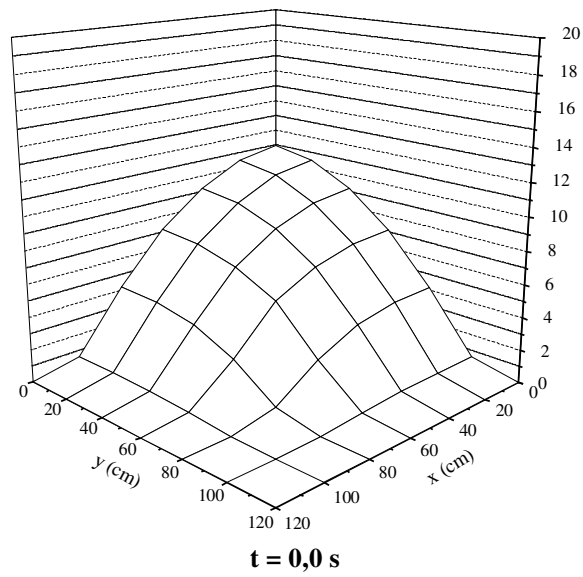
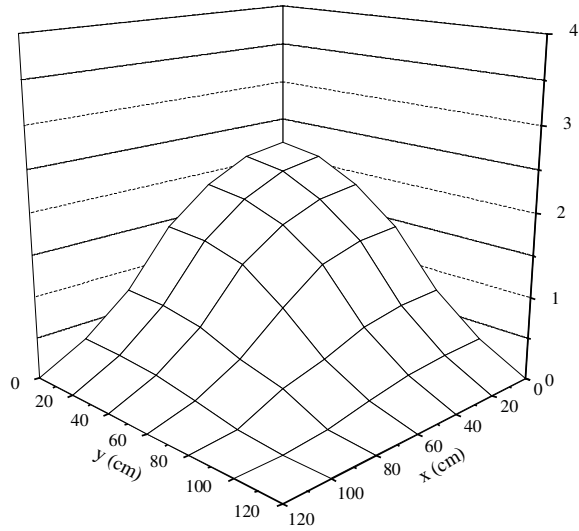
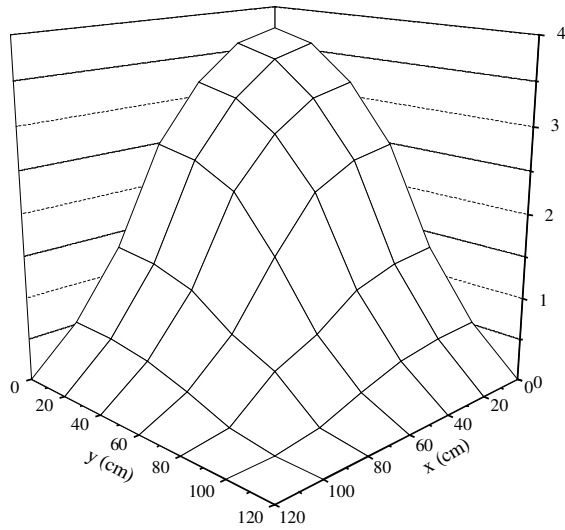


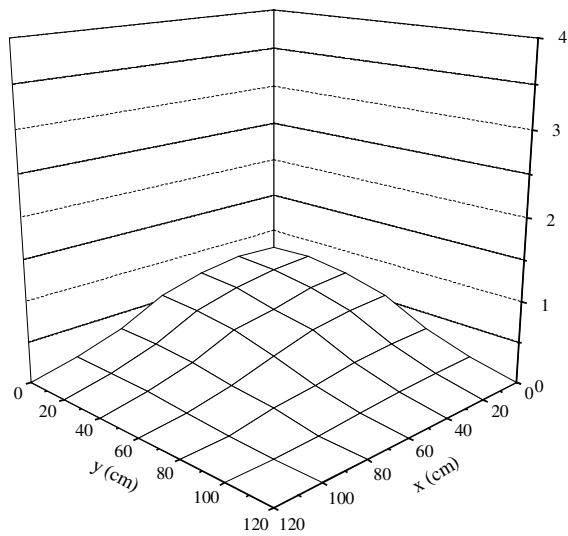
Fig. 7.27 - Reator LMW - Variação do fluxo de nêutrons rápidos no plano nº 6.



t = 0,0 s



t = 21,0 s



t = 60,0 s

Fig. 7.28 - Reator LMW - Variação do fluxo de nêutrons térmicos no plano nº 6.

7.4 - TRANSIENTE OPERACIONAL TRIDIMENSIONAL COM DESARME (LMWD)

Este problema é o mesmo apresentado na seção anterior, sendo que agora o transiente envolve um desligamento involuntário do reator (Desarme). A simulação do transiente modificado é realizada com a inserção de todos os bancos de barras de controle. Quando a densidade de potência média alcança o valor de 225 W/cm^3 os bancos são inseridos numa velocidade de 60 cm/s e são parados quando atingem o refletor inferior, ou seja as barras são totalmente inseridas. Um transiente semelhante a este teste foi aplicado em (AVILES, 1994) para verificar a eficiência dos códigos que usam o controle variável do passo temporal.

A discretização espacial é a mesma do caso anterior: 350 nodos distribuídos em uma malha de 20 cm de largura, nas três direções. O transiente é observado durante $20,0 \text{ s}$. Na Tabela 7.10 temos a convergência dos métodos. Pelos erros de truncamento máximos, eq. 7.1, listados, podemos estimar que ambos os métodos convergem para as soluções calculadas em um passo de $0,02 \text{ s}$. O máximo desvio relativo percentual no fluxo calculado no instante final ($20,0 \text{ s}$) nos dois métodos é de $8,7\%$ e ocorre no grupo rápido. Na Tabela 7.11 temos outros resultados em dois momentos do transiente em estudo: no instante em que o Desarme é iniciado, t_d , e no instante $t = 20,0 \text{ s}$. A Figura 7.29 mostra a posição aproximada dos bancos de barras para o instante t_d .

Tabela 7.10
Reator LMWD - Comportamento do erro de truncamento na discretização temporal

KDFMG3D			KMODPH3D		
Erro Trunc. Máximo	Passo (s)	Tempo de CPU (s)	Erro Trunc. Máximo	Passo (s)	Tempo de CPU (s)
0,37	0,08	235,5	0,46	0,08	63,7
	0,04	466,0		0,04	127,4
0,18	0,02	922,7	0,17	0,02	254,4
	0,01	1832,9		0,01	509,4
$3,19 \times 10^{-3}$	0,005	2825,0	$9,07 \times 10^{-2}$	0,005	1016,1
$5,41 \times 10^{-3}$			$7,48 \times 10^{-2}$		

Tabela 7.11
Resultados para o transiente com Desarme

Método	KDFMG3D	KMODPH3D
Passo no tempo (s)	0,02	0,02
Instante t_d em que ocorre o Desarme (s)	13,22	13,68
Densidade de potência (W/cm^3) em t_d	225,06	225.11
Desvio rel. na dens. de potência em t_d (%)	—	-0,02
Densidade de potência (W/cm^3) em $t = 20,0$ s	52,39	57,36
Desvio rel. na dens. de potência em $t = 20,0$ s (%)	—	-9,5
Tempo de CPU relativo (s)	1	0,28

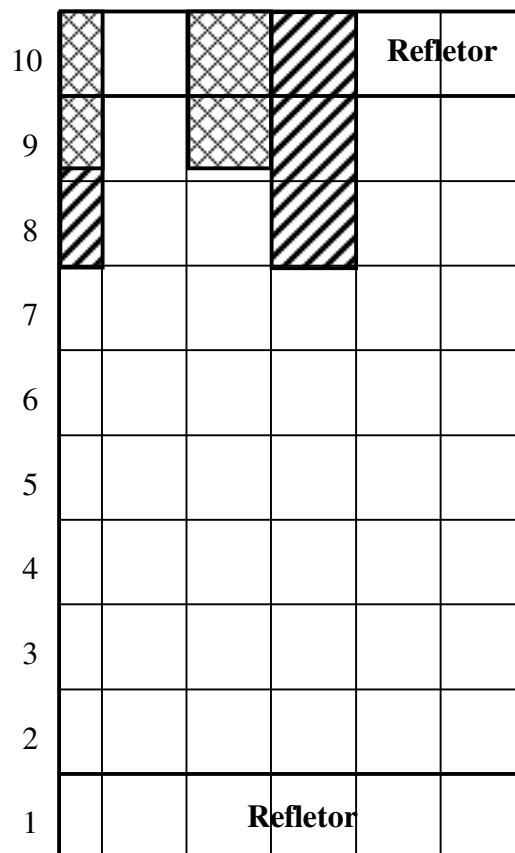


Fig. 7.29 -Geometria axial no instante da ocorrência do Desarme, $t = t_d$.

A evolução da densidade de potência média no transiente é mostrada na Figura 7.30. Na Figura 7.31 são mostrados os desvios relativos percentuais das densidades de potência no KMODPH3D em relação com o KDFMG3D.

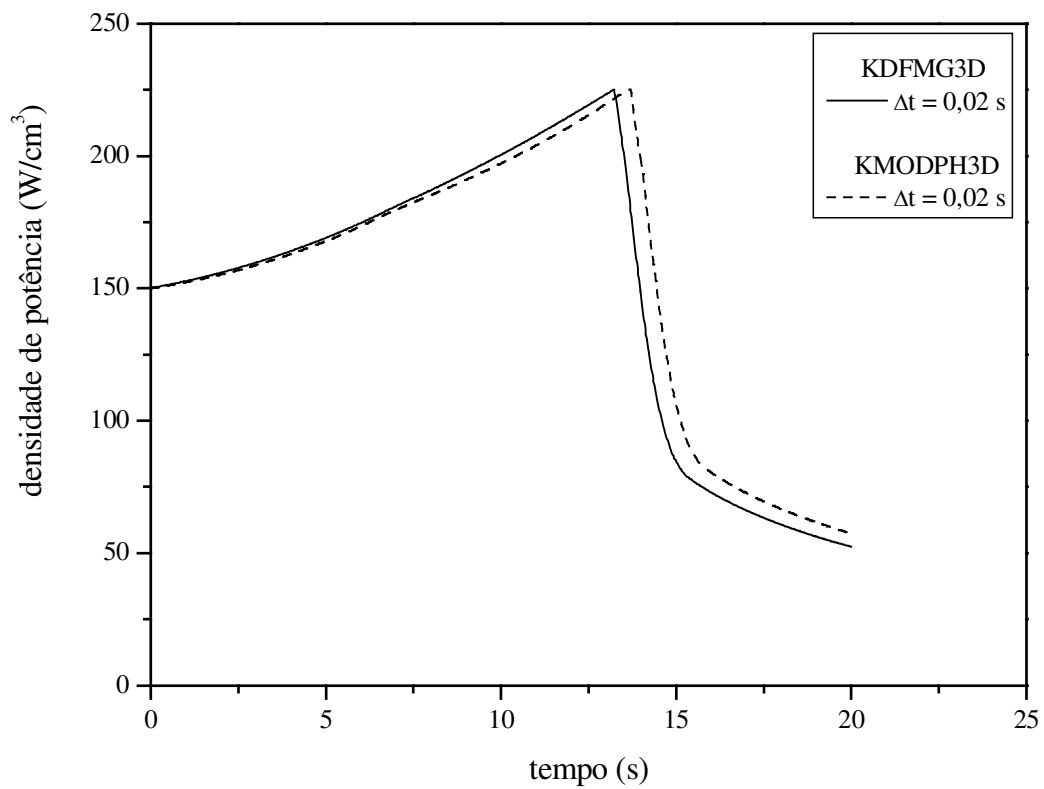


Fig. 7.30 - Reator LMWD -Variação da Densidade de Potência Média.

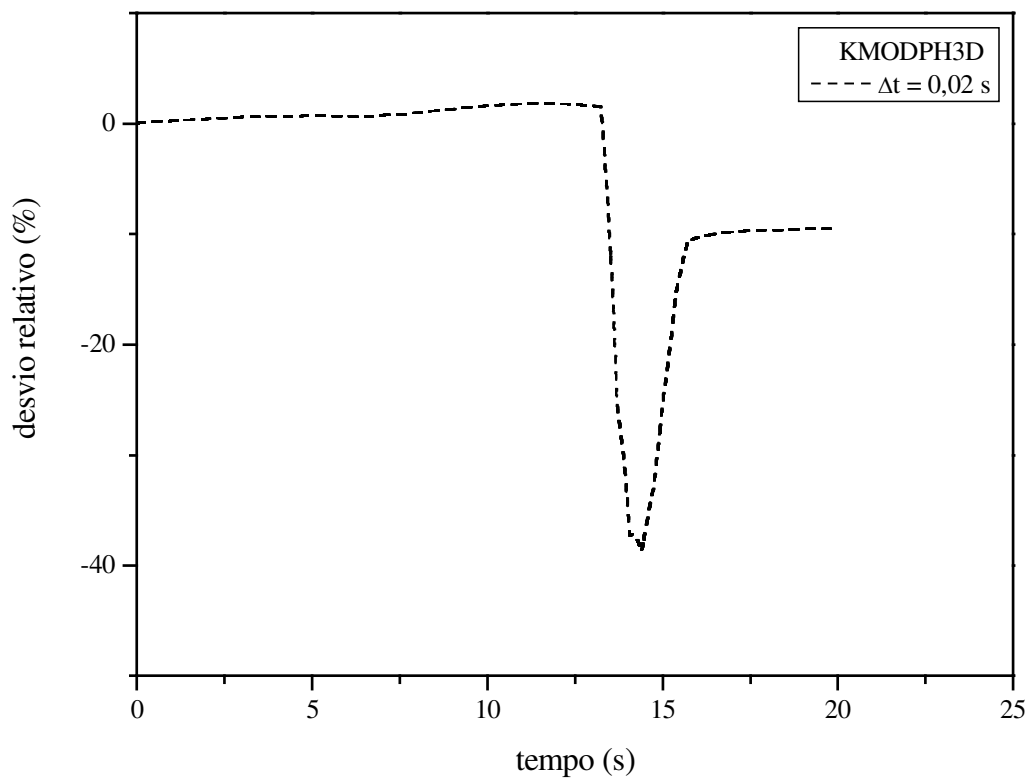


Fig. 7.31 - Reator LMWD - Variação do desvio relativo da densidade de potência.

Na Fig. 7.32 é mostrada a evolução no tempo das densidades de potência locais, nos pontos 1, 2, 3 e 4, que foram calculadas pelo KDFMG3D. Enquanto que nas figuras 7.33, 7.35, 7.37 e 7.39, é mostrada para os pontos 1, 2, 3 e 4, respectivamente, as mesmas potências locais calculadas por ambos métodos, enquanto que os desvios relativos percentuais são dados pelas figuras 7.34, 7.36, 7.38 e 7.40.

Os fluxos de nêutrons rápidos e térmicos no plano nº 6 (ver Fig. 7.29) e nos instantes $t = 0,0$ s, $t = 13,0$ s e $t = 20,0$ s, calculados pelo KDFMG3D, são mostrados pelos gráficos de superfície 3D nas figuras 7.41 e 7.42.

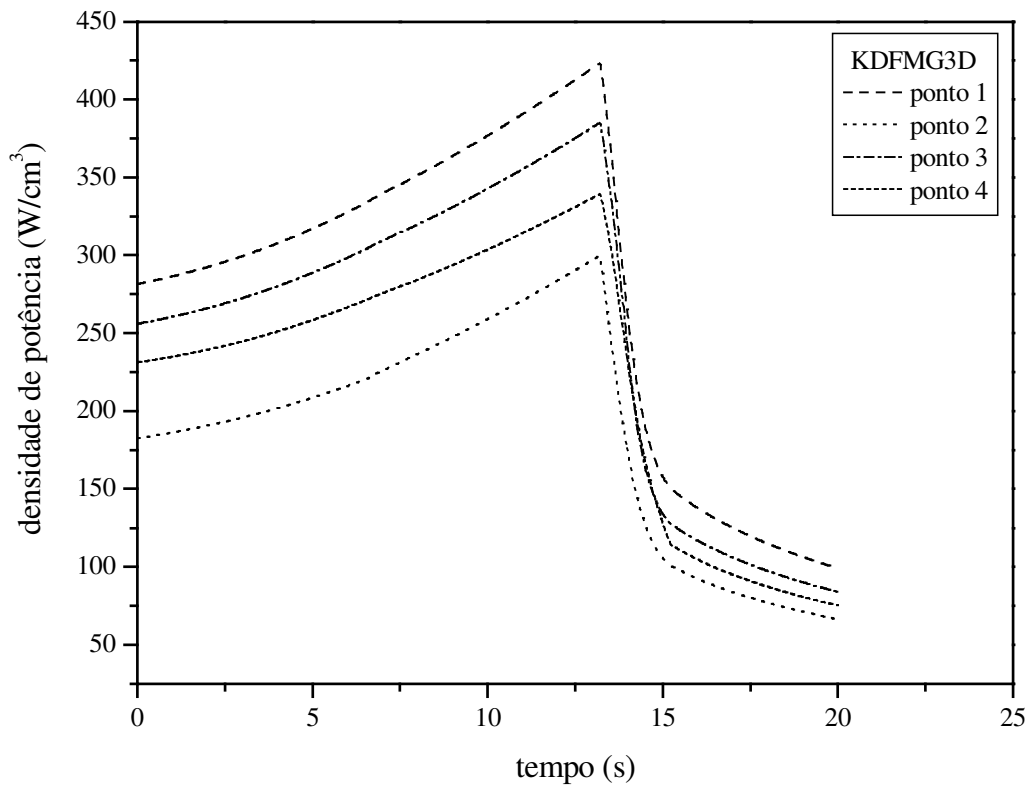


Fig. 7.32 - Reator LMWD - Variação das densidades de potência localizadas nos pontos 1, 2, 3 e 4.

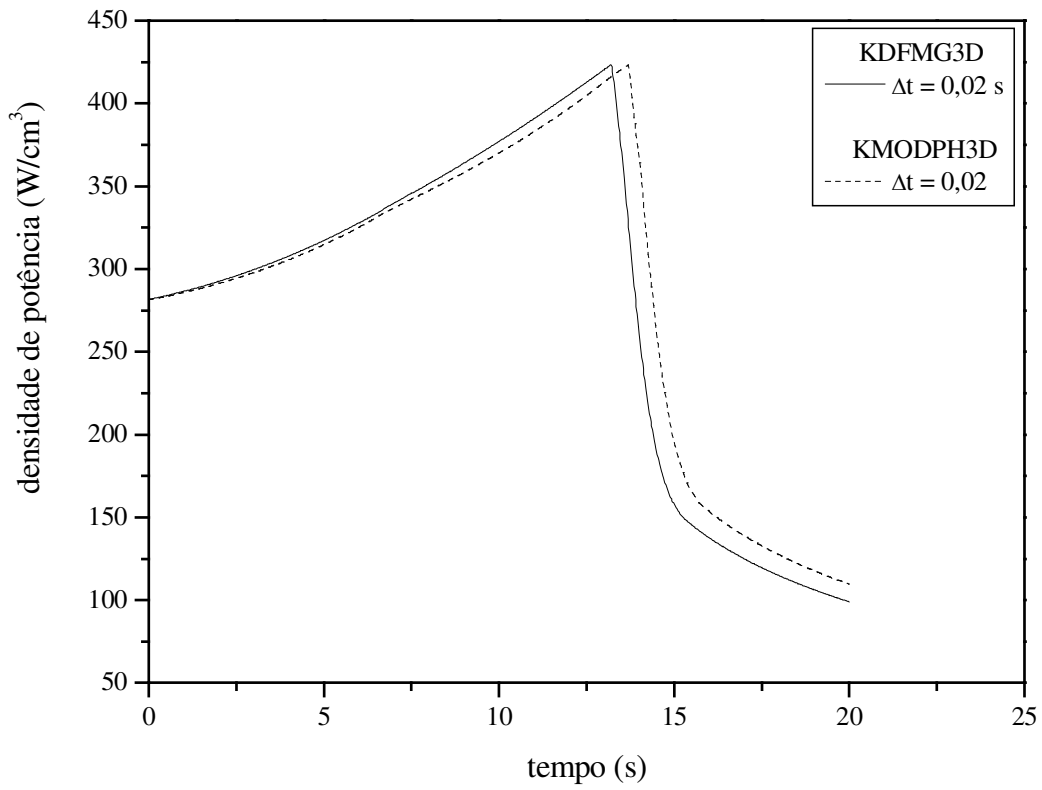


Fig. 7.33 - Reator LMWD -Variação da densidade de potência localizada no ponto 1.

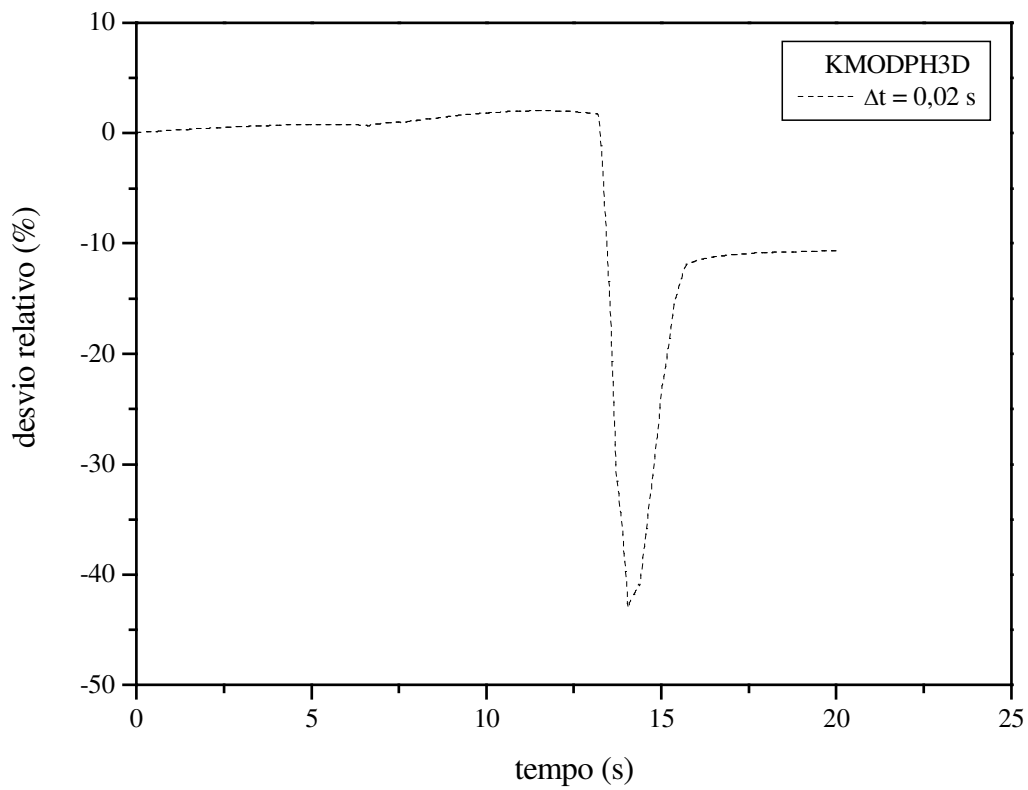


Fig. 7.34 - Reator LMWD - Variação do desvio relativo da densidade de potência localizada no ponto 1.

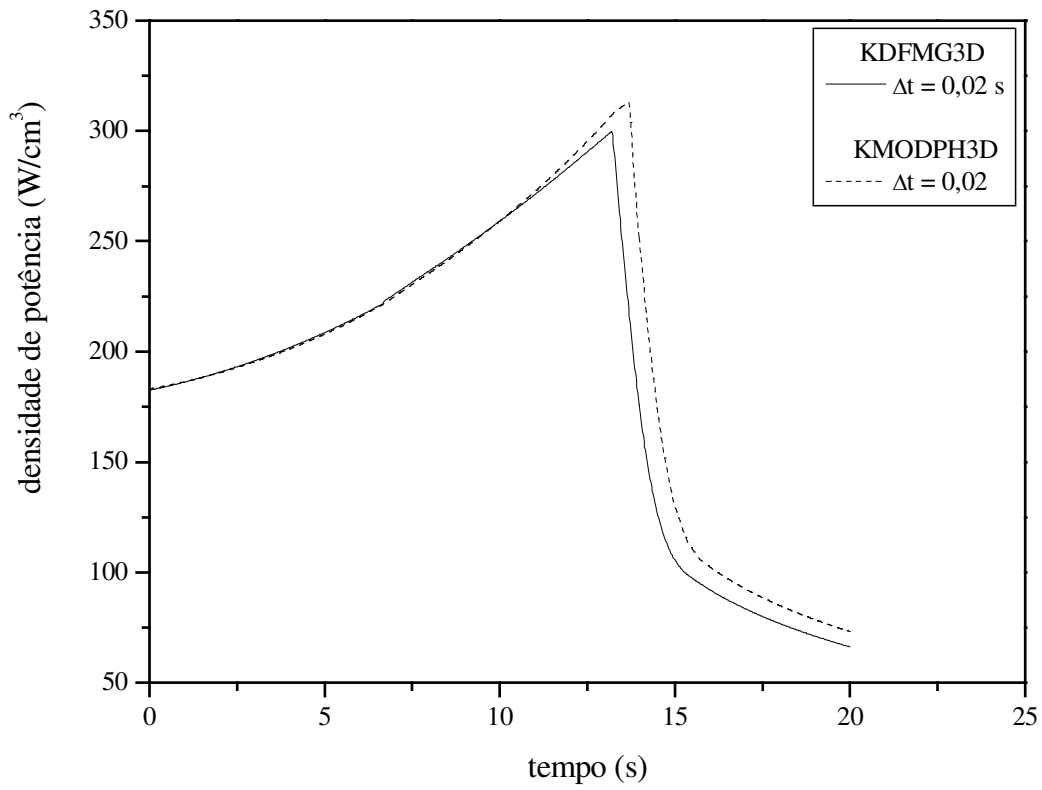


Fig. 7.35 - Reator LMWD -Variação da densidade de potência localizada no ponto 2.

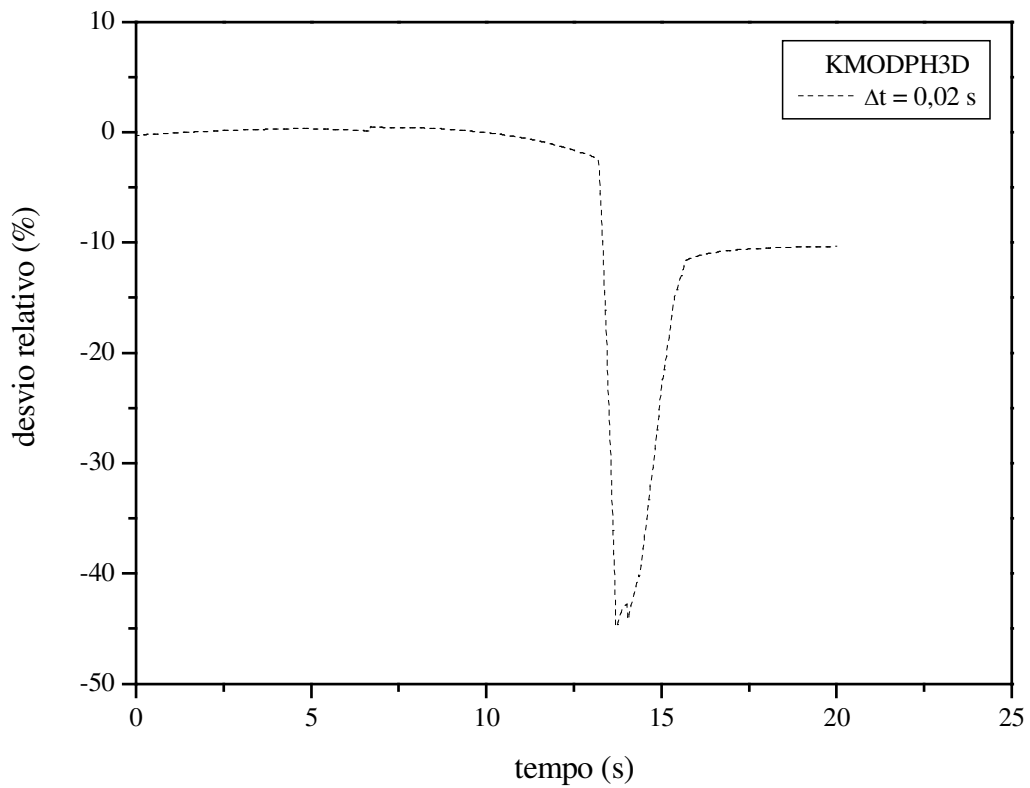


Fig. 7.36 - Reator LMWD -Variação do desvio relativo da densidade de potência localizada no ponto 2.

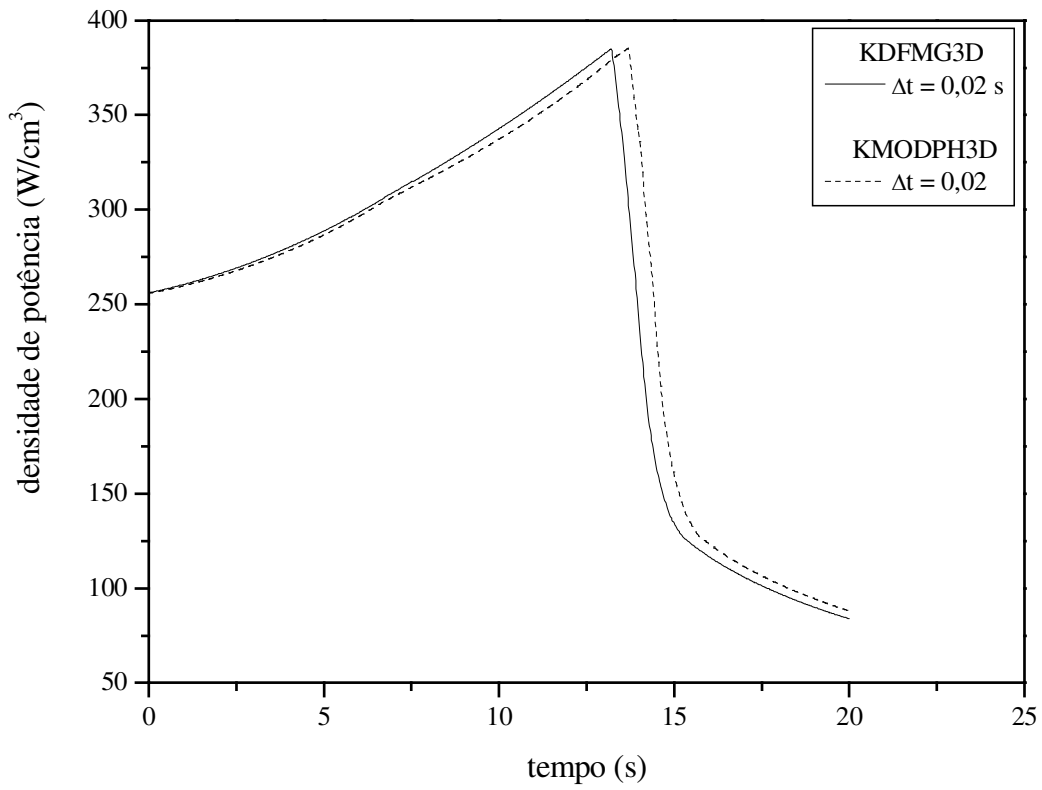


Fig. 7.37 - Reator LMWD -Variação da densidade de potência localizada no ponto 3.

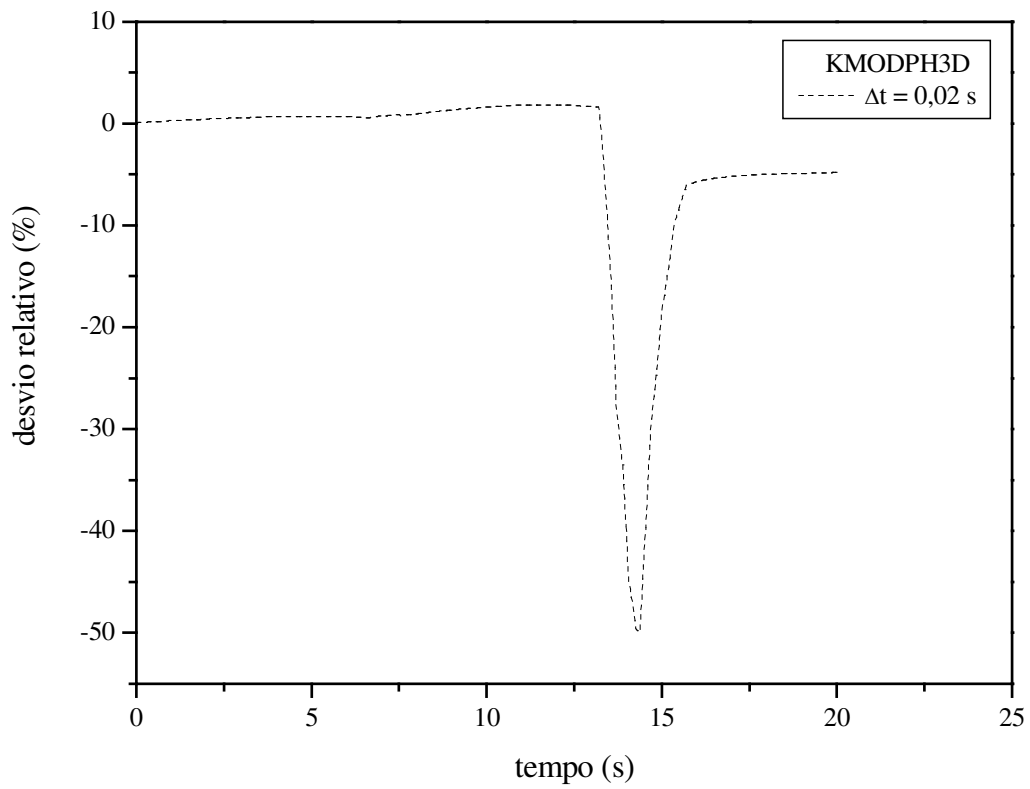


Fig. 7.38 - Reator LMWD -Variação do desvio relativo da densidade de potência localizada no ponto 3.

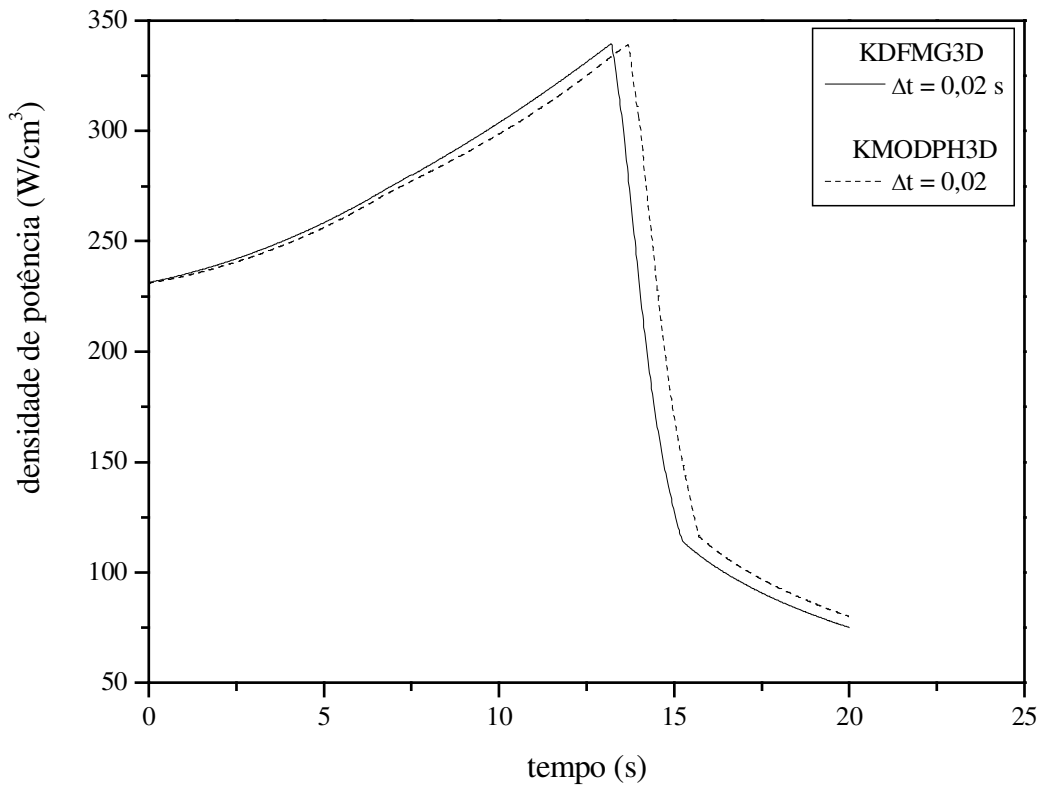


Fig. 7.39 - Reator LMWD -Variação da densidade de potência localizada no ponto 4.

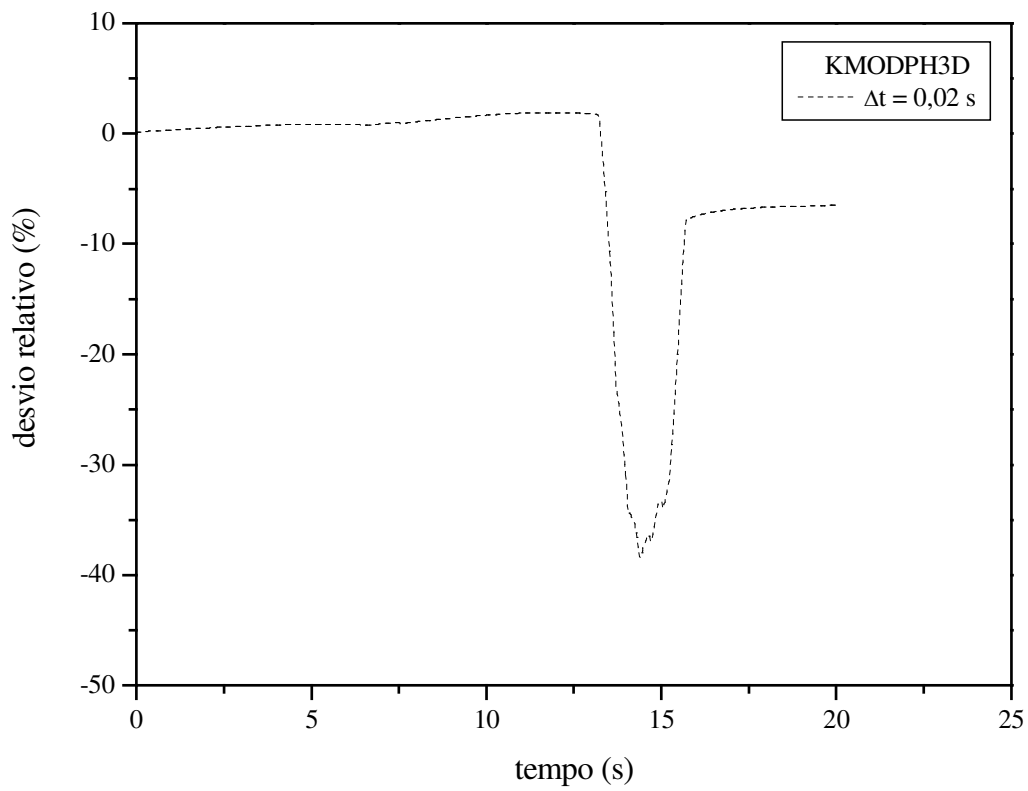


Fig. 7.40 - Reator LMWD -Variação do desvio relativo da densidade de potência localizada no ponto 4.

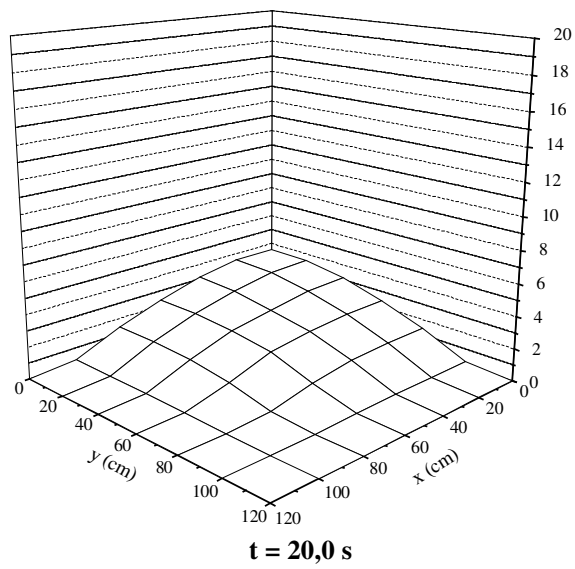
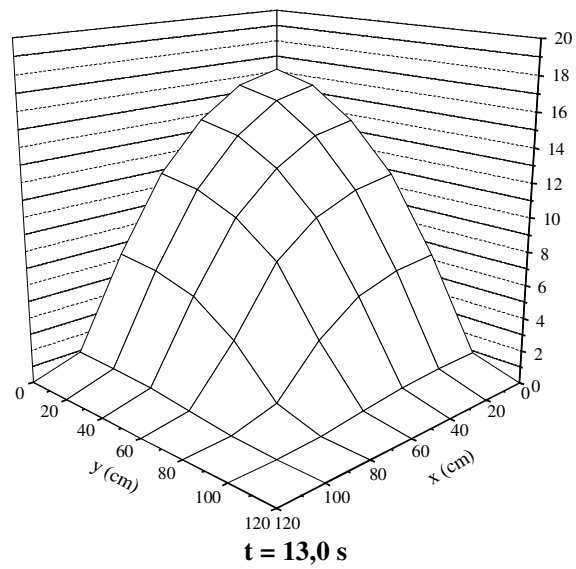
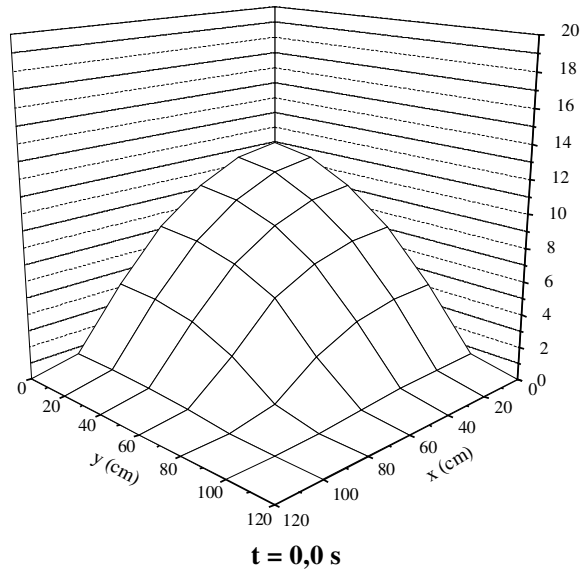


Fig. 7.41 - Reator LMWD -Variação do fluxo de nêutrons rápidos no plano nº 6.

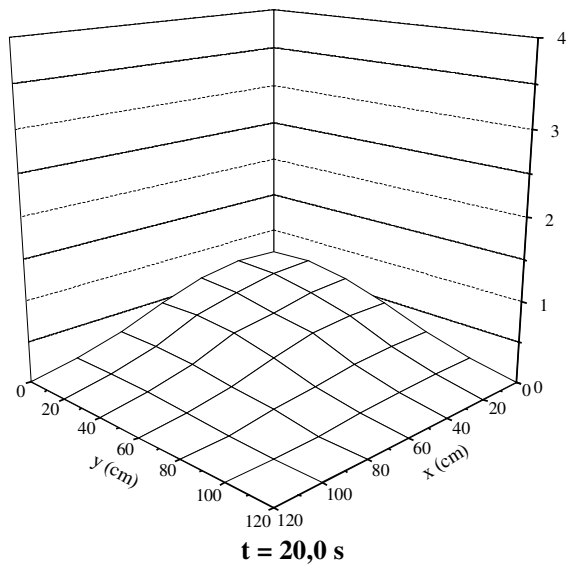
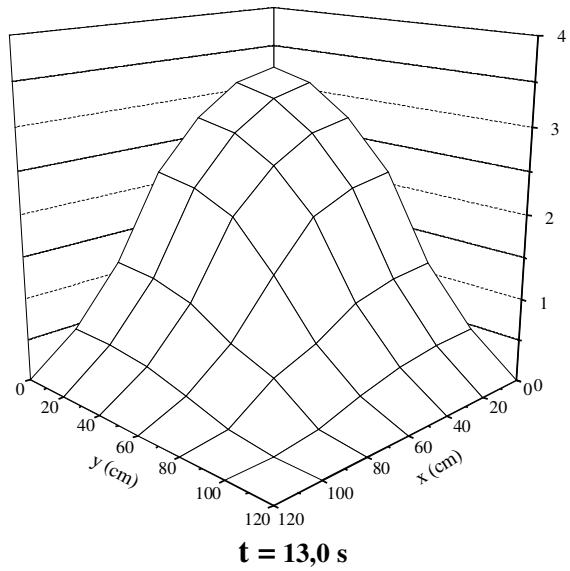
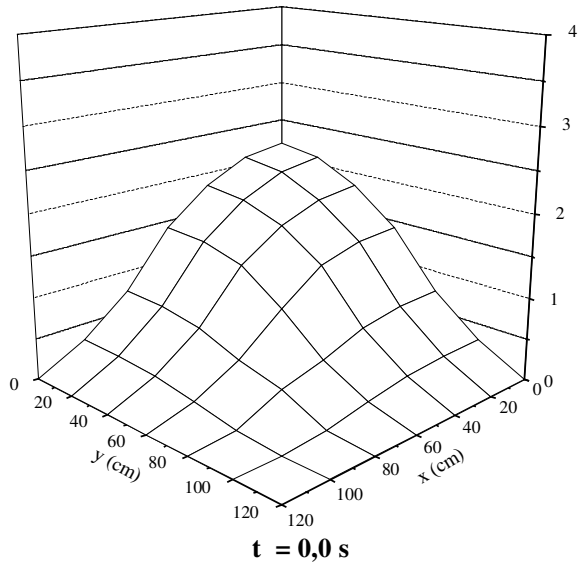


Fig. 7.42 - Reator LMWD -Variação do fluxo de nêutrons térmicos no plano nº 6.

7.5 - LMW TRIDIMENSIONAL COM EJEÇÃO DE BARRA DE CONTROLE (EBC)

Este problema utiliza o mesmo reator de Langenbuch (LMW) já apresentado, mas agora com modificações na posição e na seção de choque de absorção das BBCs (CHAO, *et al.*, 1993). Na configuração inicial as BBCs estão totalmente inseridas. De acordo com a Tabela 7.12 o valor da seção de choque de absorção rápida das BBCs é o mesmo do material combustível, enquanto que o valor da seção de choque de absorção térmica das BBCs corresponde ao valor da seção de choque de absorção térmica do material combustível acrescida em 25%. Na Tabela 7.13 é descrito o simples modelo de realimentação térmica que foi adotado (BREGA *et al.*, 1981). Nesta Tabela a equação para a temperatura do combustível é calculada em cada nodo, a temperatura inicial, T_0 , é 300 °K, enquanto que ε é a energia liberada por fissão, α é o fator de conversão da densidade de potência para a temperatura do combustível e γ é a constante de realimentação.

O transiente consiste da ejeção da barra de controle identificada pelo ponto 3 da Fig. 7.9a durante 0,1 s em condição de potência zero (10^{-6}W/cm^3). A discretização, como nos casos anteriores, usa 350 nodos.

Tabela 7.12
EBC - Parâmetros Nucleares e Cinéticos de Multigrupo

Tipo	g	D_g (cm)	Σ_{ag} (cm) ⁻¹	$\nu\Sigma_{fg}$ (cm) ⁻¹	$\Sigma_{gg'}$ (cm) ⁻¹	ν_g (cm/s)
1	1	1,423913	0,01040206	0,006477691	0,01755555	$1,25 \times 10^7$
	2	0,356306	0,08766217	0,1127328	0,0	$2,5 \times 10^5$
2	1	1,425611	0,01099263	0,007503284	0,01717768	$1,25 \times 10^7$
	2	0,350574	0,09925634	0,1378004	0,0	$2,5 \times 10^5$
3	1	1,423913	0,01040206	0,006477691	0,01755555	$1,25 \times 10^7$
	2	0,356306	0,10957771	0,1127328	0,0	$2,5 \times 10^5$
4	1	1,634227	0,002660573	0,0	0,02759693	$1,25 \times 10^7$
	2	0,264002	0,04936351	0,0	0,0	$2,5 \times 10^5$
Prec.	grupo 1	grupo 2	grupo 3	grupo 4	grupo 5	grupo 6
β_l	0,000247	0,0013845	0,001222	0,0026455	0,000832	0,000169
λ_l (s ⁻¹)	0,0127	0,0317	0,115	0,311	1,4	3,87

Tabela 7.13
EBC - Modelo de Realimentação Térmica

$$\frac{\partial T(t)}{\partial t} = \alpha \varepsilon \left(\sum_{f_1} \phi_1(t) + \sum_{f_2} \phi_2(t) \right)$$

$$\Sigma_{a_1}(t) = \Sigma_{a_1}(0) \left(1 + \gamma \left(\sqrt{T} - \sqrt{T_o} \right) \right)$$

$$\varepsilon = 3,204 \times 10^{-11} \text{ Ws}$$

$$\alpha = 1,1954 \text{ Kcm}^3 / \text{J}$$

$$\gamma = 0,003034 \text{ K}^{-1/2}$$

Na Tabela 7.14 temos o comportamento da convergência dos métodos. Pelo observado os dois métodos tendem a convergirem com uma discretização no tempo muito mais fina do que as adotadas aqui.

Tabela 7.14
EBC - Comportamento do erro de truncamento na discretização temporal

KDFMG3D			KMODPH3D		
Erro Trunc. Máximo	Passo (s)	Tempo de CPU (s)	Erro Trunc. Máximo	Passo (s)	Tempo de CPU (s)
9,31	0,002	112,8	39,78	0,002	38,1
	0,001	212,9		25,97	0,001
4,36	0,0005	403,0	29,4		0,0005
	0,00025	763,0		16,34	0,00025
1,03	0,000125	1455	8,59		0,000125
					0,0000625

Apesar de não termos as soluções convergidas, vamos apresentar alguns resultados para este caso teste. Na Fig. 7.43 é mostrada a variação da potencia relativa (potência/potência inicial). Um gráfico com uma escala para melhor visualizar o pico é mostrado na Fig. 7.44, enquanto que a variação da temperatura média do combustível é apresentada na Fig.7.45. Nas figs. 7.46 e 7.47 temos os gráficos de superfície 3D para os fluxos de nêutrons rápidos e térmicos nos instantes $t = 0,0$ s, $t = 0,97$ s e $t = 0,5$ s, no plano nº 6 (ver Fig. 7.29), obtidos pelo KDFMG3D.

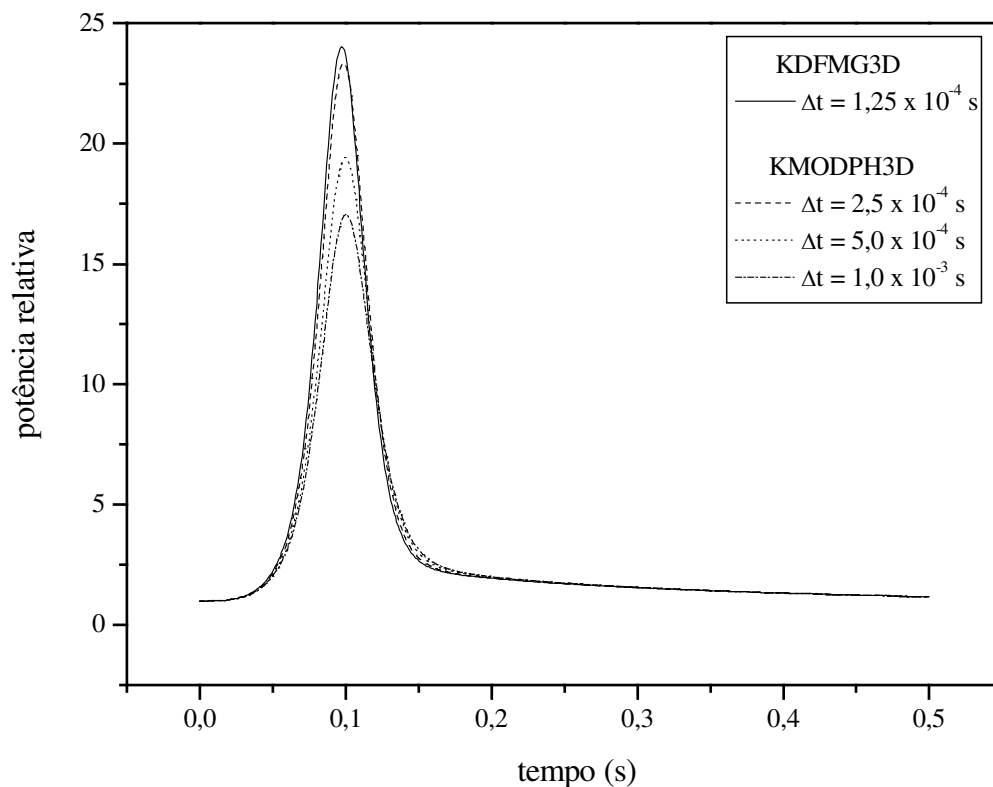


Fig. 7.43 - EBC - Variação da potência relativa.

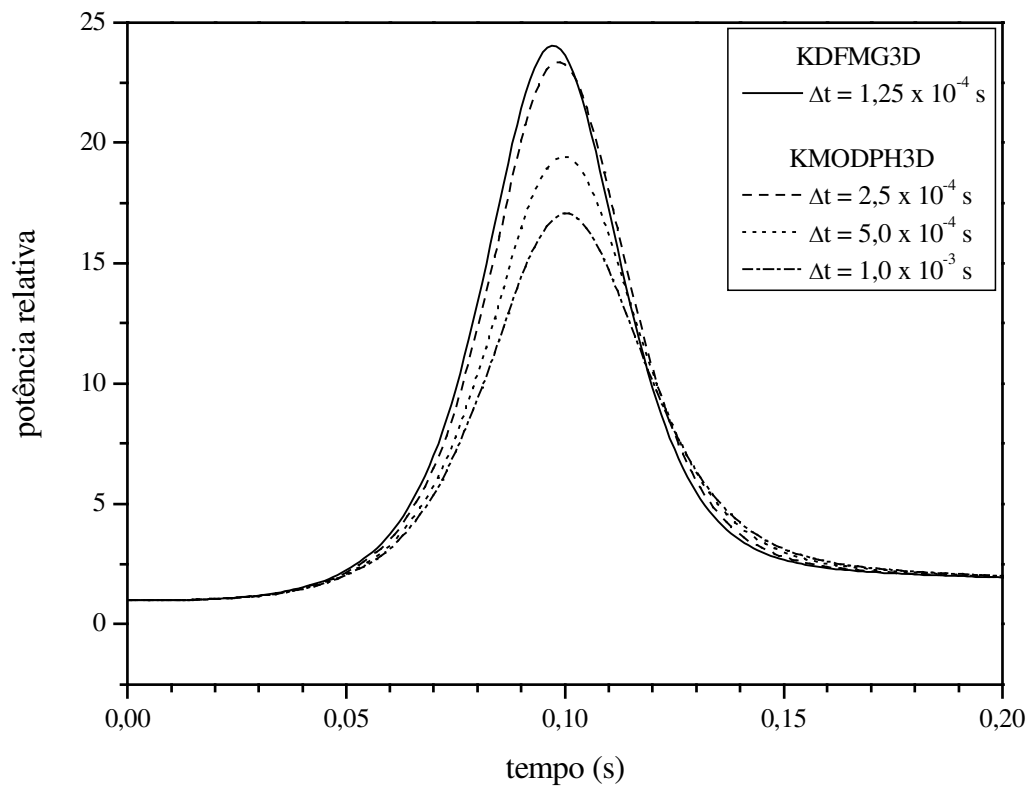


Fig. 7.44 - EBC - Variação da potência relativa - escala ampliada

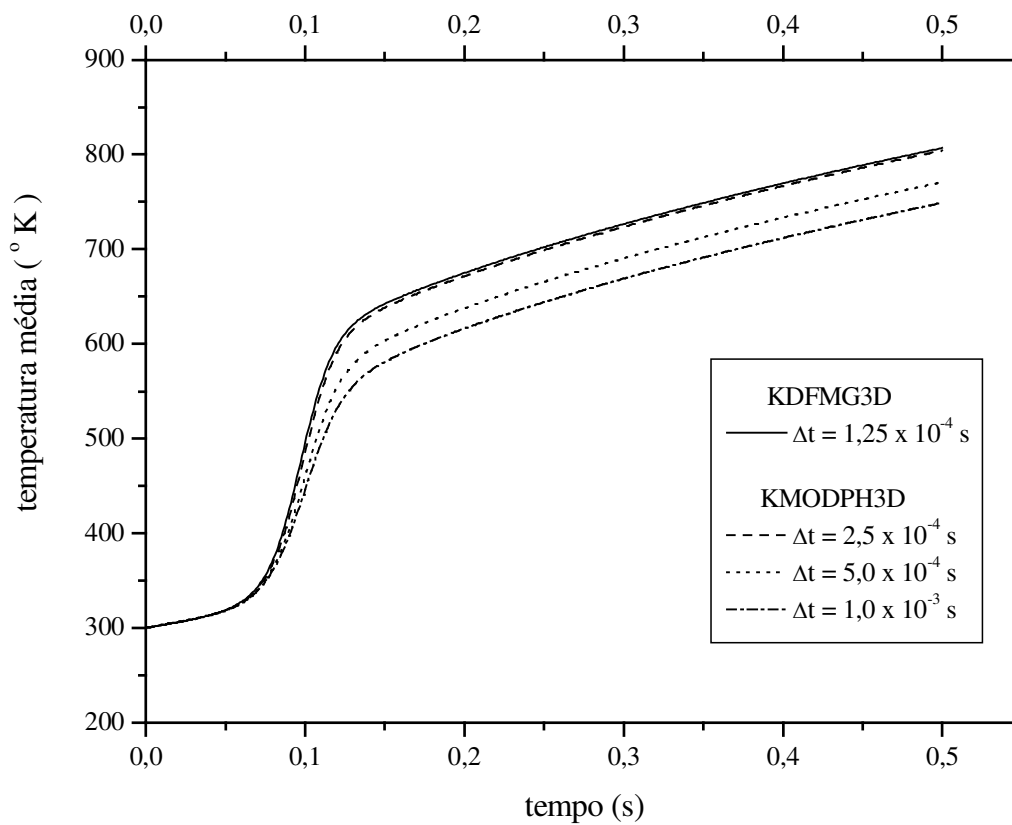
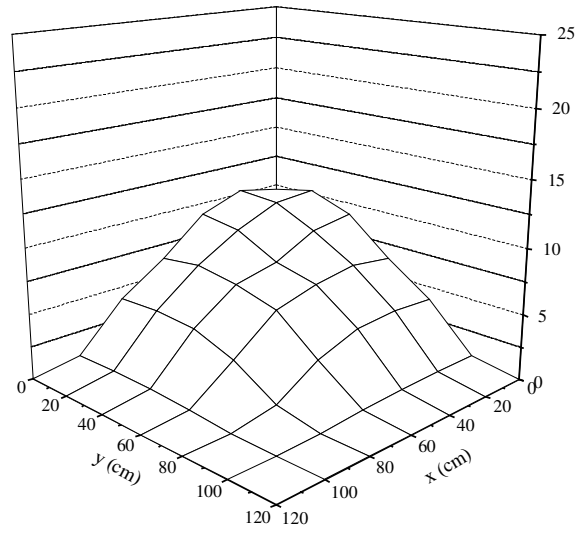
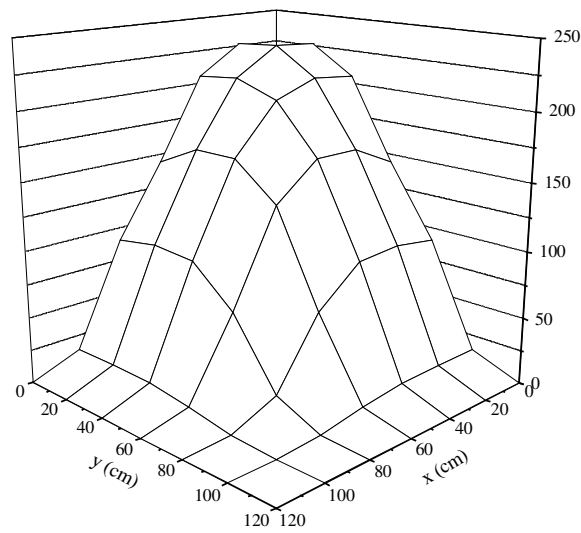


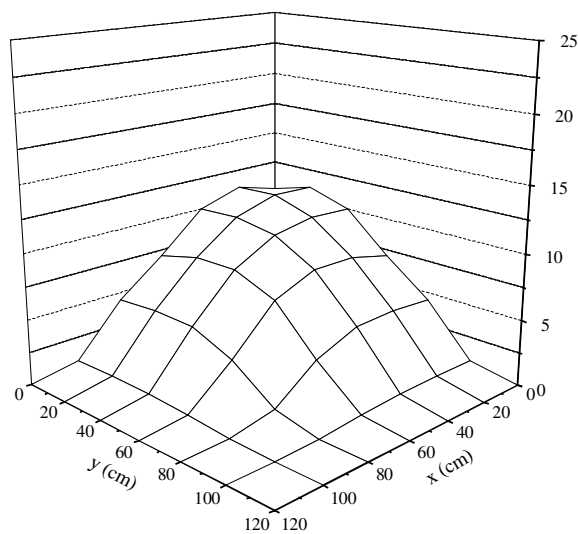
Fig. 7.45 - EBC - Variação da temperatura média do núcleo.



t = 0,0 s



t = 0,097 s



t = 0,5 s

Fig. 7.46 - EBC - Variação do fluxo de nêutrons rápidos no plano nº 6.

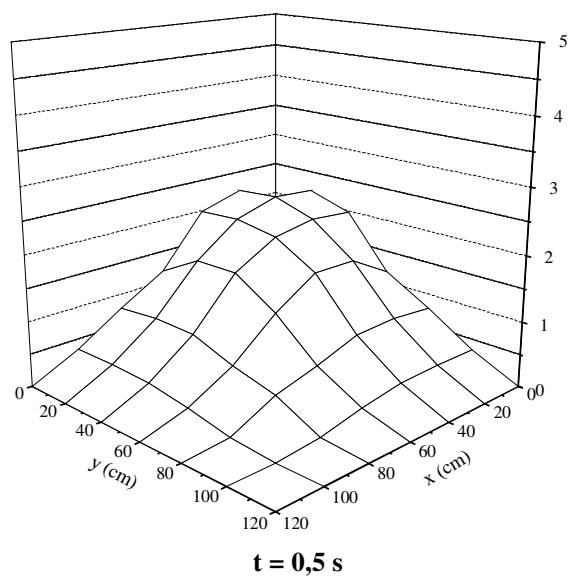
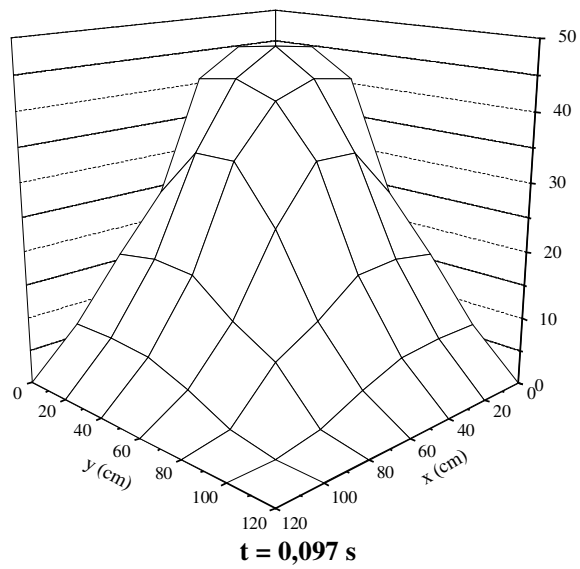
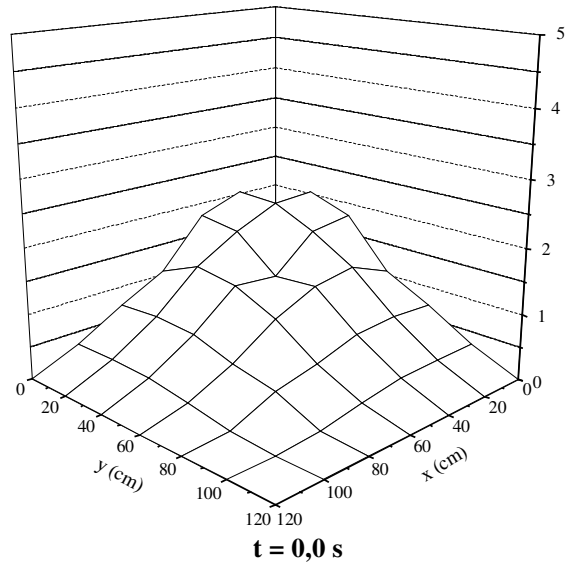


Fig. 7.47 - EBC - Variação do fluxo de nêutrons térmicos no plano nº 6.

CAPÍTULO 8

CONCLUSÕES E SUGESTÕES

Um método modal com base nos pseudo-harmônicos foi desenvolvido para a solução das equações da cinética espacial em três dimensões e dois grupos de energia. Os pseudo-harmônicos são determinados no esquema de discretização espacial do DFMG. O método modal utiliza os pseudo-harmônicos como sendo as funções peso e as autofunções da expansão modal. A dependência no tempo do sistema modal resultante é resolvida por um procedimento semi-implícito combinado com a integração analítica da equação modal da concentração dos precursores.

Para fins de comparação um método de referência também foi desenvolvido. Este método, inicialmente, trata a parte espacial por meio do NEM em conexão com o DFMG. Em seguida as equações semi-discretizadas são resolvidas no tempo de forma análoga a do método proposto: aplica-se um procedimento semi-implícito em combinação com a integração analítica da equação da concentração dos precursores.

Na implementação do método modal proposto e do método de referência foram criados programas em linguagem Fortran. Para o método modal o código foi denominado de KMODPH3D, enquanto que para o método de referência foi criado o KDFMG3D. Em problemas com transientes que envolvem o movimento de BBC, o KDFMG3D faz a homogeneização dos nodos com BBC parcialmente inseridas com auxílio de uma versão modificada do NEM. Já o KMODPH3D trata estes nodos usando uma homogeneização ponderada no volume.

Quatro problemas de transientes foram utilizados para testar o método direto e o método proposto. O primeiro caso tratou de um transiente com perturbação mudança de passo na absorção térmica num reator homogêneo. Neste caso ambos os métodos apresentaram a mesma convergência no tempo e praticamente um mesmo tempo de processamento. Com um desvio relativo muito pequeno no fluxo de nêutrons os dois métodos praticamente se equivalem. O segundo caso foi o conhecido problema de Langenbuch. No teste foi observado que o método modal precisou de um passo no tempo quatro vezes menor que o passo utilizado no método direto para convergir no tempo. Na solução convergida o método direto usa menos tempo de processamento do

que o método modal. O terceiro caso estudado foi o problema de Langenbuch modificado com Desarme. Aqui os dois métodos convergiram no tempo usando a mesma malha de discretização temporal. Sendo que o método modal apresentou um tempo de processamento muito inferior ao do método direto. O último caso analisado foi a simulação de uma ejeção de barra de controle com realimentação térmica. Neste caso foi observado a dificuldade em transientes desse tipo. Ambos os métodos mostram uma tendência em convergirem usando-se uma malha mais fina do que as utilizadas aqui.

Em relação ao tempo de processamento o método direto, por realizar iterações que são próprias do NEM e do DFMG, geralmente usa mais tempo de cálculo em cada passo, e, dependendo do problema o tempo por passo pode variar. Já o método modal, por não fazer iterações, geralmente apresenta um tempo de processamento menor do que no método direto, e o tempo de processamento por passo é geralmente constante.

Podemos afirmar que, apesar do método direto convergir no tempo com mais facilidade, o método proposto pode ser vantajoso em determinados problemas de transientes.

O método modal foi implementado com todos os pseudo-harmônicos disponíveis. Em vista disso, futuros estudos podem focalizar a questão do número de pseudo-harmônicos a serem adotados na expansão modal. O ponto de partida pode ser o trabalho de CLARO *et al.* (1993), onde é descrita uma metodologia de escolha do número de pseudo-harmônicos em problemas estacionários perturbativos. No entanto, com os recursos computacionais disponíveis atualmente, talvez a busca pelo número de pseudo-harmônicos possa ser estendida para uma pesquisa de uma combinação de pseudo-harmônicos otimizada.

Já o método direto pode ser otimizado usando-se o procedimento de iteração não linear que acelera o NEM.

Com respeito à abordagem na dependência no tempo, pode-se aperfeiçoar ambos os métodos aplicando-se o procedimento de transformação de frequência (FERGUSON *et al.*, 1973) no método de Crank-Nicholson. Na transformação de frequência se faz uma mudança de variável de modo que a dependência no tempo fique concentrada numa função exponencial. Também se pode pesquisar a implementação de métodos que controlem automaticamente o tamanho do passo no tempo, monitorando o erro de truncamento temporal, como por exemplo o método de passos duplicados (PRESS *et al.*, 1992) que pode ser aplicado no método de Crank-Nicholson. Neste método a

solução da equação dependente do tempo é calculada, num determinado instante, duas vezes: uma com o passo Δt e a outra com o passo $\Delta t/2$. Um novo passo no tempo é então estimado a partir do erro de truncamento obtido com as duas soluções.

Como foi visto na seção (2.3.1) o método de Crank-Nicholson é um caso particular do método theta. Talvez a implementação do próprio método theta, procurando por valores otimizados do parâmetro θ (NAKAMURA, 1977), seja também viável.

Aparentemente essas mudanças nos códigos KDFMG3D e KMODPH3D não são complicadas. Com tais modificações esperamos ser possível tratar os problemas de transientes mais complicados, como por exemplo o da ejeção de barra, com uma melhor convergência.

Outras alterações mais substanciais podem ser efetuadas em ambos os métodos. Como por exemplo o método de direções alternadas implícito (ADI), o método de confinamento da rigidez e o método de Runge-Kutta Generalizado, que foram apresentados na seção (2.3), podem ser implementados. É bom ressaltar que não é necessário aplicar no método direto e no modal o mesmo método de solução no tempo, como foi feito no presente trabalho.

APÊNDICE A

MÉTODO DE EXPANSÃO NODAL (NEM)

Nos métodos nodais o volume total do núcleo do reator, V , é dividido em N nodos de volume V^n , com $n=1, \dots, N$, onde $\cup V^n = V$. Em geometria cartesiana a divisão é feita com vários planos paralelos que são perpendiculares em relação a cada direção x , y e z . O coeficiente de difusão e as seções de choque macroscópicas são considerados uniformes através do volume de cada nodo.

O NEM pertence ao grupo dos métodos nodais de integração transversa (LAWRENCE, 1986). Estes métodos são caracterizados pelo uso de um procedimento de integração dentro de cada volume de nodo que produz três conjuntos de equações unidimensionais acopladas, a partir da equação de difusão de nêutrons. As soluções das três equações unidimensionais fornecem as relações entre os fluxos médios nodais e as correntes parciais ou líquidas médias nas interfaces dos nodos. Com essas relações podemos resolver as equações de balanço nodal.

O formalismo do NEM apresentado nesta seção tem como base o desenvolvimento dado por (DA SILVA *et al.*, 2003).

Para obtermos as equações unidimensionais, iniciamos com a equação de continuidade independente do tempo tridimensional que pode ser obtida a partir da eq. (3.1) na formulação cartesiana em dois grupos de energia:

$$\sum_{u=x,y,z} \frac{\partial}{\partial u} J_g(x, y, z) + \Sigma_{Rg}(x, y, z) \phi_g(x, y, z) = \frac{1}{K_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 \nu \Sigma_{fg'}(x, y, z) \phi_{g'}(x, y, z) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^2 \Sigma_{sgg'}(x, y, z) \phi_{g'}(x, y, z) \quad (\text{A.1})$$

com a corrente de nêutrons definida pela Lei de Fick:

$$J_g(x, y, z) = J_{gu}^+(x, y, z) - J_{gu}^-(x, y, z) = -D_g(x, y, z) \frac{\partial}{\partial u} \phi_g(x, y, z), \quad (\text{A.2})$$

com $u = x, y, z$.

Integrando a equação (A.1) dentro do volume $V^n = a_x^n a_y^n a_z^n$ de um nodo n genérico e a equação (A.2) na seção transversal a uma determinada direção u , temos que

$$\sum_{u=x,y,z} \frac{(J_{gur}^n - J_{gul}^n)}{a_u^n} + \sum_{Rg}^n \phi_g^n = \frac{1}{K_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 v \sum_{fg'}^n \phi_{g'}^n + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^2 \sum_{sgg'}^n \phi_{g'}^n \quad (A.3)$$

e

$$J_{gus}^n \equiv J_{gus}^{+n} - J_{gus}^{-n} = -D_g^n \frac{d}{du} \psi_{gu}^n(u) \Big|_{u=u_s^n} \quad (A.4)$$

onde os parâmetros de multigrupos, D_g^n , \sum_{Rg}^n , $\sum_{fg'}^n$, e $\sum_{sgg'}^n$, são uniformes dentro do nodo n , e são definidos da seguinte forma:

$$D_g^n \equiv \frac{1}{V^n \phi_g^n} \int_0^{a_x^n} \int_0^{a_y^n} \int_0^{a_z^n} D_g(x, y, z) \phi_g(x, y, z) dx dy dz, \quad (A.5)$$

$$\sum_{Xg}^n \equiv \frac{1}{V^n \phi_g^n} \int_0^{a_x^n} \int_0^{a_y^n} \int_0^{a_z^n} \sum_{Xg}(x, y, z) \phi_g(x, y, z) dx dy dz, \quad X = R, f, s. \quad (A.6)$$

Já, o fluxo médio de nêutrons no nodo n , ϕ_g^n , as correntes parciais médias da face s da direção u do nodo n , $J_{gus}^{\pm n}$, e o fluxo médio de nêutrons numa seção transversal à direção u no nodo n , $\psi_{gu}^n(u)$, são definidos, respectivamente, por:

$$\phi_g^n \equiv \frac{1}{V^n} \int_0^{a_x^n} \int_0^{a_y^n} \int_0^{a_z^n} \phi_g(x, y, z) dx dy dz,$$

$$J_{gus}^{\pm n} \equiv \frac{1}{a_v^n a_w^n} \int_0^{a_v^n} \int_0^{a_w^n} J_{gu}^{\pm n}(u_s^n, v, w) dv dw$$

e

$$\psi_{gu}^n(u) \equiv \frac{1}{a_v^n a_w^n} \int_0^{a_v^n} \int_0^{a_w^n} \phi_g^n(u, v, w) dv dw,$$

onde $s = e, d$, são as faces opostas, esquerda e direita, na direção u , e

$$u_s^n = \begin{cases} 0 & \text{se } s = e \\ a_u^n & \text{se } s = d. \end{cases}$$

Considerando a equação de difusão, eq. em geometria cartesiana e dois grupos de energia, que é obtida substituindo a equação (A.2) na (A.1),

$$-\sum_{u=x,y,z} D_g(x, y, z) \frac{\partial}{\partial u} \phi_g(x, y, z) + \sum_{Rg}(x, y, z) \phi_g(x, y, z) =$$

$$\frac{1}{K_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 \nu \sum_{fg'}(x, y, z) \phi_{g'}(x, y, z) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^2 \sum_{sgg'}(x, y, z) \phi_{g'}(x, y, z)$$

e integrando numa seção transversal à direção u em um nodo n , temos que:

$$-D_g^n \frac{d^2}{d^2 u} \psi_{gu}^n(u) + \sum_{Rg} \psi_{gu}^n(u) = \frac{1}{K_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 \nu \sum_{fg'} \psi_{g'u}^n(u) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^2 \sum_{sgg'} \psi_{g'u}^n(u) - L_{gu}^n(u) \quad (\text{A.7})$$

onde $L_{gu}^n(u)$ é a fuga transversal em relação à direção u , e é definida da seguinte forma:

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

As soluções das três equações unidimensionais em (A.7) ($u = x, y, z$), dadas pelas funções $\psi_{gu}^n(u)$, fazem o acoplamento entre ϕ_g^n e J_{gus}^n .

No NEM as equações unidimensionais em (A.7) são resolvidas aproximando-se $\psi_{gu}^n(u)$ por uma expansão polinomial truncada. O código para o NEM, desenvolvido no Programa de Engenharia Nuclear (PEN) da COPPE, usa uma expansão polinomial de quarto grau e é dada pela seguinte forma:

$$\psi_{gu}^n(u) = \sum_{m=0}^4 c_{mgu}^n P_m(u/a_u^n). \quad (\text{A.8})$$

Os polinômios P_m são definidos por:

$$P_0(\xi) = 1,$$

$$P_1(\xi) = 2\xi - 1,$$

$$P_2(\xi) = 6\xi(1 - \xi) - 1,$$

$$P_3(\xi) = 6\xi(1 - \xi)(2\xi - 1),$$

$$P_4(\xi) = 6\xi(1 - \xi)(5\xi^2 - 5\xi - 1), \quad \text{onde } \xi = u/a_u^n,$$

e possuem as seguintes propriedades:

$$P_m(\xi) = 0 \quad \text{em} \quad \xi = 0 (u = 0) \quad \text{e} \quad \xi = 1 (u = a_u^n) \quad ; \quad \text{para} \quad m \geq 3,$$

$$\int_0^1 P_m(\xi) d\xi = 0 \quad \text{para} \quad m \geq 1,$$

$$\int_0^1 P_1(\xi) P_m(\xi) d\xi = \begin{cases} 1/3 & \text{se } m = 1 \\ 0 & \text{se } m = 2 \\ 1/5 & \text{se } m = 3 \\ 0 & \text{se } m = 4 \end{cases},$$

$$\int_0^1 P_2(\xi)P_m(\xi)d\xi = \begin{cases} 0 & \text{se } m = 1 \\ 1/5 & \text{se } m = 2 \\ 0 & \text{se } m = 3 \\ -3/35 & \text{se } m = 4 \end{cases},$$

$$\int_0^1 \frac{d}{d\xi} P_1(\xi) \frac{d}{d\xi} P_m(\xi) d\xi = \begin{cases} 4 & \text{se } m = 1 \\ 0 & \text{se } m \neq 1 \end{cases}$$

e

$$\int_0^1 \frac{d}{d\xi} P_2(\xi) \frac{d}{d\xi} P_m(\xi) d\xi = \begin{cases} 12 & \text{se } m = 2 \\ 0 & \text{se } m \neq 2 \end{cases}.$$

Os coeficientes de baixa ordem, c_{0gu}^n , c_{1gu}^n e c_{2gu}^n (coeficientes primários) são obtidos levando em consideração uma condição de consistência, dada por

$$\phi_g^n = \frac{1}{a_u^n} \int_0^{a_u^n} \psi_{gu}^n(u) du$$

e pela aproximação da difusão

$$\psi_{gus}^n \equiv \psi_{gu}^n(u_s^n) = 2(J_{gus}^{+n} + J_{gus}^{-n})$$

e aplicando as propriedades dos polinômios P_m , obtemos as seguintes expressões:

$$c_{0gu}^n = \phi_g^n,$$

$$c_{1gu}^n = (J_{gud}^{+n} + J_{gud}^{-n}) - (J_{gue}^{+n} + J_{gue}^{-n}) \quad (\text{A.9})$$

e

$$c_{2gu}^n = \phi_g^n - ((J_{gud}^{+n} + J_{gud}^{-n}) + (J_{gue}^{+n} + J_{gue}^{-n})). \quad (\text{A.10})$$

Já os coeficientes de alta ordem, c_{3gu}^n e c_{4gu}^n (coeficientes secundários) são obtidos através da equação (A.7) e com auxílio da técnica dos resíduos ponderados, onde as funções peso são os polinômios P_m . Para os cálculos de c_{3gu}^n e c_{4gu}^n , usamos, respectivamente, como funções peso os polinômios $P_1(\xi)$ e $P_2(\xi)$, e consideramos a seguinte expansão polinomial para o termo de fuga, $L_{gu}^n(u)$:

$$L_{gu}^n(u) = \sum_{m=0}^2 \alpha_{mgu}^n P_m(u/a_u^n),$$

onde os coeficientes são dados por:

$$\alpha_{0gu}^n \equiv \bar{L}_{gu}^n = \sum_{\gamma=v,w} ((J_{\gamma d}^{+n} - J_{\gamma d}^{-n}) - (J_{\gamma e}^{+n} - J_{\gamma e}^{-n})) / a_\gamma^n, \quad (\text{A.11})$$

$$\alpha_{1gu}^n = \frac{1}{2} (L_{gud}^n - L_{gue}^n) \quad (\text{A.12})$$

e

$$\alpha_{2gu}^n = \bar{L}_{gu}^n - \frac{1}{2} (L_{gud}^n + L_{gue}^n), \quad (\text{A.13})$$

com

$$L_{gue}^n = \frac{(a_u^{n-1} \bar{L}_{gu}^n + a_u^n \bar{L}_{gu}^{n-1})}{(a_u^{n-1} + a_u^n)} \quad (\text{A.14})$$

e

$$L_{gud}^n = L_{gue}^{n-1}, \quad (\text{A.15})$$

sendo que os L_{gus}^n são obtidos impondo-se a condição de continuidade da função $L_{gu}^n(u)$

e de $\frac{d}{du}L_{gu}^n(u)$ nas interfaces entre os nodos.

Substituindo a expansão (A.8) na equação (A.4) e usando as definições dos coeficientes primários, c_{0gu}^n , c_{1gu}^n e c_{2gu}^n , segue que

$$J_{gue}^{-n} = A_{0gu}^n (\phi_g^n + c_{4gu}^n) + A_{1gu}^n J_{gue}^{+n} + A_{2gu}^n J_{gud}^{-n} - A_{3gu}^n c_{3gu}^n \quad (\text{A.16})$$

e

$$J_{gud}^{+n} = A_{0gu}^n (\phi_g^n + c_{4gu}^n) + A_{2gu}^n J_{gue}^{+n} + A_{1gu}^n J_{gud}^{-n} + A_{3gu}^n c_{3gu}^n, \quad (\text{A.17})$$

onde:

$$A_{0gu}^n \equiv \frac{6(D_g^n / a_u^n)}{(1 + 12(D_g^n / a_u^n))}, \quad (\text{A.18})$$

$$A_{1gu}^n = \frac{(1 - 48(D_g^n / a_u^n)^2)}{(1 + 12(D_g^n / a_u^n))(1 + 4(D_g^n / a_u^n))}, \quad (\text{A.19})$$

$$A_{2gu}^n = \frac{-8(D_g^n / a_u^n)}{(1 + 12(D_g^n / a_u^n))(1 + 4(D_g^n / a_u^n))} \quad (\text{A.20})$$

e

$$A_{3gu}^n = \frac{6(D_g^n / a_u^n)}{(1 + 4(D_g^n / a_u^n))}. \quad (\text{A.21})$$

Substituindo (A.16) e (A.17) em (A.3) temos, finalmente, o sistema de equações do qual o fluxo de nêutrons médio no nodo é obtido:

$$\begin{aligned}
\left(\sum_{u=x,y,z} 2A_{0gu}^n / a_u^n + \Sigma_{Rg}^n \right) \phi_g^n = & \frac{1}{K_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 \nu \Sigma_{fg'}^n \phi_{g'}^n + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^2 \Sigma_{gg'}^n \phi_{g'}^n + \\
& + \sum_{u=x,y,z} 2A_{0gu}^n (2(J_{gur}^{-n} + J_{gul}^{+n}) - c_{4gu}^n) / a_u^n .
\end{aligned} \tag{A.22}$$

As equações de (A.9) à (A.22), juntamente com os sistemas de equações para o cálculo dos coeficientes de altas ordens (c_{3gu}^n e c_{4gu}^n) e mais as condições de interface e de contorno, fazem parte do esquema iterativo usado no código desenvolvido no Programa de Engenharia Nuclear (PEN), para solucionar problemas estacionários em três dimensões e dois grupos de energia.

APÊNDICE B

TRATAMENTO DA MOVIMENTAÇÃO DE BBC PELO MÉTODO NEM

A discretização nodal pelo método de expansão nodal (NEM) considera que os nodos são homogêneos, significando que os parâmetros nucleares de multigrupo são uniformes dentro de cada nodo. No entanto em alguns problemas de transientes temos o movimento de Bancos de Barras de Controle (BBC), de modo que nodos com BBC parcialmente inseridos podem ocorrer, como podemos observar na Fig. B.1. Com isso é

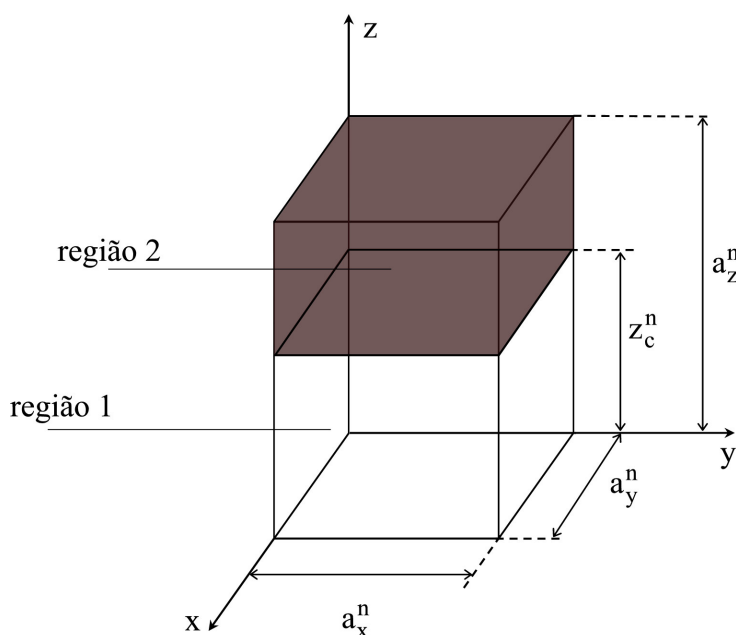


Fig. B.1 - Esquema de um nodo n com barra de controle parcialmente inserida.

necessário que o esquema de discretização do NEM seja reformulado para tratar o movimento de BBC. O método aqui descrito é o mesmo empregado em (MARTINEZ *et al.*, 1999).

De acordo com a Fig. B.1, cada uma das duas regiões em que o nodo n foi dividido (região 1 - parte do nodo sem BBC e região 2 - parte do nodo com BBC inserido) os parâmetros nucleares de multigrupo são uniformes e representados por $D_g^{n,tipo}$ e $\sum_{Xg}^{n,tipo}$ ($X = R, f, s$), com $tipo = 1$ indica a região 1 e $tipo = 2$ a região 2.

Para este tipo de problema, nodo com BBC parcialmente inserido, o método desenvolvido fornece uma homogeneização em volume para D_g e $\Sigma_{gg'}$, na seguinte forma:

$$\widehat{D}_g^n = \left(\frac{z_c^n}{a_z^n} \right) D_g^{n,1} + \left(1 - \left(\frac{z_c^n}{a_z^n} \right) \right) D_g^{n,2} \quad (\text{B.1})$$

e

$$\widehat{\Sigma}_{gg'}^n = \left(\frac{z_c^n}{a_z^n} \right) \Sigma_{gg'}^{n,1} + \left(1 - \left(\frac{z_c^n}{a_z^n} \right) \right) \Sigma_{gg'}^{n,2}. \quad (\text{B.2})$$

Enquanto que os outros parâmetros, Σ_{ag} , Σ_{fg} e $v\Sigma_{fg}$ são definidos como seguem:

$$\widehat{\Sigma}_{Xg}^n \equiv \frac{1}{V^n \phi_g^n} \int_0^{a_x^n} \int_0^{a_y^n} \int_0^{a_z^n} \Sigma_{Xg} (x, y, z) \phi_g (x, y, z) dx dy dz \quad (\text{B.3})$$

onde

$$\Sigma_{Xg} (x, y, z) = \begin{cases} \Sigma_{Xg}^{n,1} & \text{para } 0 < z < z_c^n \\ \Sigma_{Xg}^{n,2} & \text{para } z_c^n < z < a_z^n \end{cases} ; \quad \forall (x, y), \quad (\text{B.4})$$

e a forma funcional de $\phi_g (x, y, z)$ é dada por

$$\phi_g (x, y, z) = \phi_g^n + \sum_{u=x,y,z} \sum_{m=1}^2 c_{mgu}^n P_m (u/a_u^n), \quad (\text{B.5})$$

sendo $P_m (u/a_u^n)$ e c_{mgu}^n , respectivamente, as mesmas funções de base e os mesmos coeficientes primários da expansão (A.8).

Substituindo (B.4) e (B.5) em (B.3) segue que

$$\widehat{\Sigma}_{X_g}^n = f_{00}^n \Sigma_{X_g}^{n,1} + (1 - f_{00}^n) \Sigma_{X_g}^{n,2} + (\Sigma_{X_g}^{n,1} - \Sigma_{X_g}^{n,2}) \sum_{m=1}^2 c_{mgz}^n f_{0m}^n / \phi_g^n, \quad (\text{B.6})$$

onde:

$$f_{0m}^n \equiv \frac{1}{a_z^n} \int_0^{z_c^n} P_m(z/a_z^n) dz = \begin{cases} (f_{00}^n)^2 - f_{00}^n & \text{para } m = 1 \\ -2(f_{00}^n)^3 + 3(f_{00}^n)^2 - f_{00}^n & \text{para } m = 2 \end{cases}, \quad (\text{B.7})$$

com $f_{00}^n \equiv z_c^n / a_z^n$.

A homogeneização representada pela eq. (B.6) modifica a eq. (A.7), que é usada nos cálculos dos coeficientes secundários da expansão definida em (A.8). Com isso, as equações de difusão unidimensionais para as funções $\psi_{gu}^n(u, t)$, para os casos do nodo com BBC parcialmente inserido, ficam na seguinte forma:

$$-\widehat{D}_g^n \frac{d^2}{d^2u} \psi_{gu}^n(u) + \widehat{\Sigma}_{Rg}^n \psi_{gu}^n(u) = \quad (\text{B.8})$$

$$\frac{1}{K_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 v \widehat{\Sigma}_{fg'}^n \psi_{g'u}^n(u) + \sum_{\substack{g'=1 \\ g' \neq g}}^2 \widehat{\Sigma}_{sgg'}^n \psi_{g'u}^n(u) - L_{gu}^n(u) - d_{gu}^n(u),$$

onde:

$$d_{gu}^n(u) = (\widetilde{\Sigma}_{ag}^n(u) - \widehat{\Sigma}_{ag}^n) \psi_{gu}^n(u) - \frac{1}{k_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 (v \widetilde{\Sigma}_{fg'}^n(u) - v \widehat{\Sigma}_{fg'}^n) \psi_{g'u}^n(u),$$

com

$$\widetilde{\Sigma}_{X_g}^n(u) \psi_{gu}^n(u) \equiv \frac{1}{a_v^n a_w^n} \int_0^{a_v^n} \int_0^{a_w^n} \Sigma_{X_g}(u, v, w) \phi_g(u, v, w) dv dw. \quad (\text{B.9})$$

Substituindo (B.4) e (B.5) em (B.9), podemos concluir que:

➤ Para $u = x$ e y :

$$\tilde{\Sigma}_{X_g}^n (u_s^n) = f_{00}^n \Sigma_{X_g}^{n,1} + (1 - f_{00}^n) \Sigma_{X_g}^{n,2} + (\Sigma_{X_g}^{n,1} - \Sigma_{X_g}^{n,2}) \sum_{m=1}^2 c_{mgz}^n f_{0m}^n / \Psi_{gus}^n, \quad (\text{B.10})$$

onde $\Psi_{gus}^n = 2(J_{gus}^{+n} + J_{gus}^{-n})$ e $s = l, r$ (com $u_l^n = 0$ e $u_r^n = a_u^n$).

➤ para $u = z$:

$$\tilde{\Sigma}_{X_g}^n (u_s^n) = \begin{cases} \Sigma_{X_g}^{n,1} & \text{para } s = l \\ \Sigma_{X_g}^{n,2} & \text{para } s = r \end{cases}. \quad (\text{B.11})$$

É importante ressaltar que, segundo o método NEM, $d_{gu}^n(u)$ é tratado do mesmo modo que $L_{gu}^n(u)$, ou seja, através de uma expansão polinomial do segundo grau da seguinte forma:

$$d_{gu}^n(u) = \sum_{m=0}^2 \beta_{mgu}^n h_m(u/a_u^n), \quad (\text{B.12})$$

onde:

$$\beta_{0gu}^n = 0, \quad (\text{B.13})$$

$$\beta_{1gu}^n = \frac{1}{2}(d_{gur}^n - d_{gul}^n) \quad (\text{B.14})$$

e

$$\beta_{2gu}^n = -\frac{1}{2}(d_{gur}^n + d_{gul}^n), \quad (\text{B.15})$$

com

$$d_{gus}^n \equiv (\tilde{\Sigma}_{ag}^n(u_s^n) - \Sigma_{ag}^n) \Psi_{gus}^n - \frac{1}{k_{eff}} \chi_g \sum_{g'=1}^2 (v \tilde{\Sigma}_{fg'}^n(u_s^n) - v \Sigma_{fg'}^n) \Psi_{g'us}^n. \quad (\text{B.16})$$

Com isso, observa-se que os parâmetros de multigrupos (\hat{D}_g^n e $\hat{\Sigma}_{Xg}^n$), usados nas eqs. (A.18) a (A.22) e (B.8), são os parâmetros $D_g^{n,1}$ e $\Sigma_{Xg}^{n,1}$, para os nodos sem BBC inseridos (com $d_{gu}^n(u) = 0$ na eq. (B.8)), $D_g^{n,2}$ e $\Sigma_{Xg}^{n,2}$, para os nodos com BBC totalmente inseridos (também com $d_{gu}^n(u) = 0$ na eq. (B.8)) e dados, finalmente, pelas eqs. (B.1), (B.2) e (B.6), para os nodos com BBC parcialmente inseridos (com $d_{gu}^n(u) \neq 0$ na eq. (B.8) e dado pela expansão (B.12)).

REFERÊNCIAS

- AL-CHALABI, R. M., H., TURINSKY, P. J., FAURE, F. X., et al., 1993, "NESTLE: A Nodal Kinetics Code", *Trans. Am. Nucl. Soc.*, v. 68, pp.432-433.
- ARAGONES, J. M. & AHNERT, C., 1986, "A Linear Discontinuous Finite Difference Formulation for Synthetic Coarse-Mesh Few-Group Diffusion Calculations", *Nuclear Science and Engineering*, vol. 94, pp. 309-322.
- ARGONNE NATIONAL LABORATORY, 1977, *Argonne Code Center: Benchmark Problem Book*, ANL-7416, Supplement 2.
- AVILES, B. N., 1993, "Development of a Variable Time-Step Transient NEM Code: SPANDEX", *Trans. Am. Nucl. Soc.*, v. 68, pp. 425-427.
- AVILES, B. N., 1994, "Importance of Variable Time-Step Algorithms in Spatial Kinetics Calculations", *Trans. Am. Nucl. Soc.*, v. 71, pp. 451-453.
- BEAM, T. M., IVANOV, K. N., BARATTA, A. J., et al., 1999, "Nodal Kinetics Model Upgrade in the Penn State Coupled TRAC/NEM Codes", *Annals of Nuclear Energy*, v. 26, pp. 1205-1219.
- BELCHIOR, A., MOREIRA, J. M. L., 1992, "Chebychev Acceleration for Lambda Mode Calculations", *Trans. Am. Nucl. Soc.*, v. 66, pp. 237-238.
- BREGA, E., DI PASQUANTONIO, F., SALINA, E., 1978, "Three-dimensional Transient Analysis in Thermal Power Reactors: an Extensive Comparison Between Finite Difference and Space-Time Synthesis Method", *Annals of Nuclear Energy*, v. 5, pp. 117-132.
- BREGA, E., DI PASQUANTONIO, F., 1981, "Computation Accuracy and Efficiency of a Coarse-Mesh Analytic Nodal Method for LWR Transient Problems, in

Comparison with a Space-Time Synthesis Method", *Annals of Nuclear Energy*, v. 8, pp. 509-524.

CHAO, Y. -A., ATTARD, A., 1985, "A Resolution of the Stiffness Problem of Reactor Kinetics", *Nuclear Science and Engineering*, v. 90, pp. 40-46.

CHAO, Y. -A., HUANG, P., 1989, "Theory and Performance of the Fast-Running Multidimensional Pressurized Water Reactor Kinetics Code, SPNOVA-K", *Nuclear Science and Engineering*, v. 103, pp. 415-419.

CHAO, Y. -A., RISHER, D. H., 1993, "Using Dynamic Frequencies for Overcoming the Stiffness of the Neutronic Space-Time Kinetics Calculations", *Trans. Am. Nucl. Soc.*, v. 68, pp. 430-431.

CHAO, Y. A., 1999, "A Theoretical Analysis of the Coarse Mesh Finite Difference Representation in Advanced Nodal Methods", In: *The Proceedings of M&C'99-Madrid, Mathematics and Computation, Reactor Physics and Environmental Analysis in Nuclear Applications*, v. 1, pp.117-126, Madrid, Spain, 27-30 September.

CHAO, Y. A., 2000, "Coarse mesh finite difference methods and applications", In: *Proceedings of the ANS International Topical Meeting on Advances in Reactor Physics, Mathematics and Computation into the Next Millennium*, vol. 1, pp. 1-17, Pittsburgh, USA, 7-11 May.

CLARO, L. H., ALVIM, A. C. M., THOMÉ, Z. D., 1987, "Calculation of Intensive Localized Perturbations with the Pseudo-Harmônicos Method", *Annals Nuclear Energy*, v. 14, n. 11, pp. 619-622.

CLARO, L. H., ALVIM, A. C. M., 1991, "Aplicação do Método dos Pseudo-Harmônicos na Reconstrução do Fluxo Neutrônico Perturbado Bidimensional Utilizando Teoria de Difusão com Discretização Nodal". In: *Anais do 8^o Encontro Nacional de Física de Reatores e Termodinâmica*, pp. 405-410, Atibaia, SP, Setembro.

- CLARO, L.H., 1992, *O Método dos Pseudo-Harmônicos: Uma Nova Opção Usando Discretização Nodal*. Tese de D.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- CLARO, L. H., ALVIM, A. C. M., 1993, "Uma Metodologia para Escolha de Pseudo-Harmônicos na Reconstrução de Fluxo". In: *Anais do 9^o Encontro Nacional de Física de Reatores e Termodinâmica*, pp. 42-47, Caxambu, MG, Outubro.
- DA SILVA, F. C., WAINTRAUB, S., THOMÉ, Z. D., 1987, "The Pseudo-Harmonics Perturbation Method: Application to a PWR", *Annals of Nuclear Energy*, v. 14, n. 2, pp. 99.
- DA SILVA, F. C., WAINTRAUB, S., THOMÉ, Z. D., et al., 1988, "Méthode des Pseudo-Harmoniques: une Version Modifiée et Quelques Applications aux Réacteurs de Type REP", *E. D. F Bulletin de la Direction des Études et Recherches*, Série A, n. 1, pp. 53-60.
- DA SILVA, F. C., MARTINEZ, A. S., 2003, "Aceleração do Método Nodal NEM Usando Diferenças Finitas de Malha Grossa", *VI Encontro de Modelagem Computacional*, Nova Friburgo, Rio de Janeiro, 01-03 de Dezembro.
- DE ABREU, M. P., 1988, *Uma Metodologia Alternativa de Pseudo-Harmônicos: Aplicação ao Cálculo Bidimensional de Reatores*. Tese de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.
- DE ABREU, M. P., THOMÉ, Z. D., ALVIM, A. C. M., 1989, "An Alternative Pseudo-Harmonics Method: A Strong Solution-Based Formulation of the Standard and Modified Versions", *Annals of Nuclear Energy*, v. 16, n. 5, pp. 213-229.
- DE ABREU, M. P., THOMÉ, Z. D., ALVIM, A. C. M., et al., 1990, "Une Méthode Alternative de Pseudo-Harmoniques: Quelques Considérations au Sujet de la Solution Forte du Système Récurrent et des Nouvelles Applications", *E. D. F, Bulletin de la Direction des Études et Recherches*, Série C, n. 4, pp. 1-16.
- DE LIMA, Z. R., 2000, *Utilização de Pseudo-Harmônicos na Solução da Equação de*

Difusão de Nêutrons com Fonte Fixa. Tese de M.Sc., COPPE/UFRJ, Rio de Janeiro, RJ, Brasil.

DE LIMA, Z. R., DA SILVA, F. C., ALVIM, A. C. M., 2004, "Solution of the Fixed Source Neutron Diffusion Equation by Using the Pseudo-Harmonics Method", *Annals of Nuclear Energy*, v. 31, pp. 1649-1666.

DE LIMA, Z. R., DA SILVA, F. C., ALVIM, A. C. M., 2005a, "Use of Pseudo-Harmonics Method Coupled with Finite Differences Coarse Mesh in the Solution of Fixed Source Problems", *Annals of Nuclear Energy*, v. 32, pp. 1366-1376.

DE LIMA, Z. R., DA SILVA, F. C., ALVIM, A. C. M., 2005b, "Aplicação do Método dos Pseudo-Harmônicos à Cinética Espacial", *XIV ENFIR - National Meeting of Reactor Physics and Thermal Hydraulics*, Santos, SP, Brasil, 28 de Agosto a 2 de Setembro.

DODDS, H. L., 1976, "Accuracy of the Quasistatic Method for Two-Dimensional Thermal Reactor Transients with Feedback", *Nuclear Science and Engineering*, v. 59, pp. 271-276.

DORNING, J., 1979, "Modern Coarse-Mesh Methods - A Development of the '70s". In: *Proc. Topical Meeting on Computational Methods in Nuclear Engineering*, v. 3, pp. 1-31, Williamsburg, Virginia, 23-25 April.

FERGUSON, D. R., HANSEN, K. F., 1973, "Solution of the Space-Dependent Reactor Kinetics Equations in Three Dimensions", *Nuclear Science and Engineering*, v. 51, pp. 189-205.

FINNEMANN, H., BENNEWITZ, F., WAGNER, M. R., 1977, "Interface Current Techniques for Multidimensional Reactor Calculations", *Atomkernenergie-Kerntechnik*, v. 30, pp.123-128.

FINNEMANN, H., GUNDLACH, W., 1981, "Space-Time Kinetics Code IQSBOX for PWR and BWR", *Atomkernenergie-Kerntechnik*, v. 37, pp. 128-176.

- GANDINI, A., 1978, "Implicit and Explicit Higher Order Perturbation Methods for Nuclear Reactor Analysis", *Nuclear Science and Engineering*, vol. 67, pp. 347-355.
- GINESTAR, D., VERDÚ, G., VIDAL, V., et al., 1998, "High Order Backwards Discretization of the Neutron Diffusion Equation", *Annals of Nuclear Energy*, v. 25, n. 1-3, pp. 47-64.
- GINESTAR, D., MIRÓ, R., VERDÚ, G., et al., 2002, "A Transient Modal Method Analysis for a Neutron Diffusion Equation. Application to BWR Instability Event", *Journal of Nuclear Science and Technology*, v. 39, n. 5, pp. 554-563.
- GOMIT, J. M., PLANCHARD, J., SARGENI, A., 1982, "Utilisation des Harmoniques em Physique des Réacteurs: Méthode Standard et Méthode des Pseudo-Harmoniques", *Département Physique de Réacteurs, Électricité de France (E. D. F)*, Report HI4345-07.
- GOMIT, J. M., PLANCHARD, J., SARGENI, A., 1985, "La Méthode des Pseudo-Harmoniques: Théories et Application", *E. D. F, Bulletin de la Direction des Études et Recherches, Série A*, n. 1, pp. 61-66.
- GREENMAN, M. V., SMITH, K., HENRY, A. F., 1979, "Recent Advances in an Analytic Nodal Method for Static and Transient Reactor Analysis". In: *Proc. Topical Meeting on Computational Methods in Nuclear Engineering*, v. 3, pp. 49-71, Williamsburg, Virginia, 23-25 April.
- HAGEMAN, L. A., YASINSKY, J. B., 1969, "Comparison of Alternating-Direction Time-Differencing Methods with Other Implicit Methods for the Solution of the Neutron Group-Diffusion Equations", *Nuclear Science and Engineering*, v. 38, pp. 8-32.
- HASHIMOTO, K., OHSAWA, T., MIKI, R., et al., 1991, "Derivation of Consistent Reactivity Worth and Eigenvalue Separation from Space-Dependent Rod

- Worths on the Basis of Modal Approach", *Annals of Nuclear Energy*, v. 18, pp. 317-325.
- HASHIMOTO, K., HOTTA, A., TOSHIKAZU, T., 1997, "Neutronic Model for Modal Multichannel Analysis of Out-of-Phase Instability in Boiling Water Reactor Cores", *Annals of Nuclear Energy*, v. 24, pp. 99-111.
- HASHIMOTO, K., IKEDA, H., TAKEDA, T., 2000, "Numerical Instability of Time-Discretized One-Point Kinetic Equations", *Annals of Nuclear Energy*, v. 27, pp. 791-803.
- HENRY, A. F., CURLEE, N. J., 1958, "Verification of a Method for Treating Neutron Space-Time Problems", *Nuclear Science and Engineering*, v. 4, pp. 727.
- HUTT, P. K., KNIGHT, M. P., 1993, "Improvements to the Transient Solution in the PANTHER Space-Time Code", *Trans. Am. Nucl. Soc.*, v. 68, pp. 427-429.
- KANG, C. M., HANSEN, K. F., 1973, "Finite Element Methods for Reactor Analysis", *Nuclear Science and Engineering*, v. 51, pp. 456-495.
- KAPS, P., RENTROP, P., 1979, "Generalized Runge-Kutta Methods of Order Four with Step Size Control for Stiff Ordinary Differential Equations", *Numerische Mathematik*, v. 33, pp. 55-68.
- KAVENOKY, A., LAUTARD, J. J., 1982, "The Neutron Kinetics and Thermal-Hydraulic Transient Computational Module of the Neptune System". In: *Proc. Topical Meeting Advances in Reactor Physics and Core Thermal Hydraulics*, pp. 781-792, Kiamesha Lake, New York, 22-24 September.
- KERESZTÚRI, A., HEGYI, G., MARÁZCY, C., et al., 2003, "Development and Validation of the Three-Dimensional Dynamic Code - KIKO3D", *Annals of Nuclear Energy*, v. 30, pp. 93-120.
- KOEBKE, B., WAGNER, M. R., 1977, "The Determination of the Pin Power

- Distribution in a Reactor Core on the Basis of Nodal Coarse Mesh Calculations", *Atomkernenergie-Kerntechnik*, v. 30, pp.136-142.
- KOEBKE. B., 1978, "A New Approach to Homogenization and Group Condensation", *IAEA Technical Committee Meeting Homogenization Methods in Reactor Physics*, IAEA-TECDOC-231, Lugano, Italy, 13-15 November.
- LANGENBUCH, S., MAURER, W., WERNER, W., 1977a, "Coarse-Mesh Flux Expansion Method for the Analysis of Space Time Effects in Large Light Water Reactor Cores", *Nuclear Science and Engineering*, v. 63, pp. 437-456.
- LANGENBUCH, S., MAURER, W., WERNER, W., 1977b, "High-Order Schemes for Neutron Kinetics Calculations Based on a Local Polynomial Approximation", *Nuclear Science and Engineering*, v. 64, pp. 508-516.
- LAWRENCE, R. D., DORNING, J. J., 1980, "A Nodal Green's Function Method for Multidimensional Neutron Diffusion Calculations", *Nuclear Science and Engineering*, v. 76, pp. 218-231.
- LAWRENCE, R.D., 1986, "Progress in Nodal Methods for the Solution of the Neutron Diffusion and Transport Equations", *Progress in Nuclear Energy*, v. 17, n. 3, pp. 271-301.
- MAEDER, C., 1978, "A Nodal Diffusion Method with Legendre Polynomials", *Proc. Topical Meeting Advances in Reactor Physics*, Gatlinburg, Tennessee, 10-12 April.
- MARTINEZ, A. S., PEREIRA, V., SILVA, F. C., 1999, "A System for the Prediction and Determination of Sub-critical Multiplication Condition", *Kerntechnik*, v. 64, n. 4, pp. 230-234.
- MIRÓ, R., GINESTAR, D., VERDÚ, G., et al., 2002, "A Nodal Modal Method for the Neutron Diffusion Equation. Application to BWR Instabilities Analysis", *Annals of Nuclear Energy*, v. 29, pp. 1171-1194.

- MONTAGNINI, B., RAFFAELLI, P., SUMINI, M., et al., 1996, "A 3D Coarse-Mesh Time Dependent Code for Nuclear Reactor Kinetic Calculations", *Annals of Nuclear Energy*, v. 23, n. 6, pp. 517-532.
- MUÑOZ-COBOS, J. L., ROSELLÓ, O., MIRÓ, R., et al., 2000, "Coupling of Density Wave Oscillations in Parallel Channels with High Order Modal Kinetics: Application to BWR Out of Phase Oscillations", *Annals of Nuclear Energy*, v. 27, pp. 1345-1371.
- MUÑOZ-COBOS, J. L., CHIVA, S., SEKHRI, A., 2004, "A Reduced Order Model of BWR Dynamics with Subcooled Boiling and Modal Kinetics: Application to Out of Phase Oscillations", *Annals of Nuclear Energy*, v. 31, pp. 1135-1162.
- NAKAMURA, S., 1977, *Computational Methods in Engineering and Science*, New York, Wiley and Sons.
- PEREIRA, V., MARTINEZ, A. S., DA SILVA, F. C., 2002, "Formulação de Diferenças Finitas de Malha Grossa para Cálculo do Fluxo Adjunto Matemático". *XIII ENFIR - National Meeting of Reactor Physics and Thermal Hydraulics*, Rio de Janeiro, Brasil, Agosto.
- PRESS, H.W., TEUKOLSKY, S.A., VETTERLING, W.T., et al., 1992, *Numerical Recipes in Fortran*. 2 ed. New York, Cambridge University Press.
- ROHAN, P. E., KANG, C. M., SHOBER, R. A., et al, 1975, "A Multi-Dimensional Space-Time Kinetics Code for PWR Transients". In: *Proc. Conf. Computational Methods in Nuclear Engineering*, v. 4, pp. 69-82, Charleston, South Carolina, 15-17 April.
- SHOBER, R. A., SIMS, R. N., HENRY, A. F., 1977, "Two Nodal Methods for Solving Time-Dependent Group Diffusion Equations", *Nuclear Science and Engineering*, v. 64, pp. 582-592.
- SMITH, K. S., 1986, "Assembly Homogenization Techniques for Light Water Reactor

Analysis", *Progress in Nuclear Energy*, v. 17, pp. 303-335.

STACEY, W. M., 1967, *Modal Approximations: Theory and an Application to Reactor Physics*. Cambridge, Massachusetts, M.I.T Press.

STACEY, W. M., 1969, *Space-Time Nuclear Reactor Kinetics*, New York, Academic Press.

SUTTON, T. M., AVILES, B. N., 1996, "Diffusion Theory Methods for Spatial Kinetics Calculations", *Progress in Nuclear Energy*, v. 30, n. 2, pp. 119-182.

TAIWO, T. A., KHALIL, H. S., CALAHAN, J. E., et al., 1993, "Time-Step Selection Considerations in the Analysis of Reactor Transients with DIF3D-K", *Trans. Am. Nucl. Soc.*, v. 68, pp. 429-430.

TAMITANI, M., IWAMOTO, T., MOORE, B. R., 2003, "Development of Kinetics Model for BWR Core Simulator AETNA", *Journal of Nuclear Science and Technology*, v. 40, n. 4, pp. 201-212.

THOMÉ, Z. D., DA SILVA, F. C., ALVIM, A. C. M., 1997, "Application of Local Basis Pseudo-Harmonics Method", *Annals of Nuclear Energy*, v. 24, n. 2, pp. 955-963.

VERDÚ, G., GINESTAR, D., MIRÓ, R., et al., 2005, "Using the Jacobi–Davidson Method to Obtain the Dominant Lambda Modes of a Nuclear Power Reactor", *Annals of Nuclear Energy*, v. 32, pp. 1274-1296.

VIDAL, V., VERDÚ, G., GINESTAR, D., et al., 1997, "Eigenvalues Calculation Algorithms for λ -modes Determination. Parallelization Approach", *Annals of Nuclear Energy*, v. 24, pp. 387-410.

WACHPRESS, E. L., BURGESS, R. D., BARON, S., 1962, "Multichannel Flux Synthesis", *Nuclear Science and Engineering*, v. 12, pp. 381-389.

WACHSPRESS, E. L., 1966, *Iterative Solution of Elliptic Systems and Applications to the Neutron Diffusion Equations of Reactor Physics*. New Jersey, Prentice-hall.

ZIMIN, V. G., NINOKATA, H., 1998, "Nodal Neutron Kinetics Model Based on Nonlinear Iteration Procedure for LWR Analysis", *Annals of Nuclear Energy*, v. 25, n. 8, pp. 507-528.